

NOVAS FUNÇÕES DE BASE DO MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL PARA CÁLCULOS GLOBAIS DE REATORES NUCLEARES

Sérgio Barros Paixão

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

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro Março de 2022

NOVAS FUNÇÕES DE BASE DO MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL PARA CÁLCULOS GLOBAIS DE REATORES NUCLEARES

Sérgio Barros Paixão

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA 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.

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Aprovada por: Prof. Fernando Carvalho da Silva Prof. Antonio Carlos Marques Alvim Prof. Aquilino Senra Martinez Prof. Helio de Carvalho Vital Prof. Hermes Alves Filho

> RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL MARÇO DE 2022

Paixão, Sérgio Barros

Novas Funções de Base do Método de Expansão Nodal para Cálculos Globais de Reatores Nucleares / Sérgio Barros Paixão. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XI, 92 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 67-71.

1. Método de Expansão Nodal. 2. Métodos em Difusão Nodal.

3. Reatores nucleares. I. Silva, Fernando Carvalho da. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Agradecimentos

Gostaria de expressar meus mais sinceros agradecimentos ao Professor Fernando Carvalho da Silva, pelo inestimável apoio durante minha jornada como aluno do PEN/COPPE/UFRJ. Orientador seguro e meticuloso, de profundos e sólidos conhecimentos, fez de nossa convivência, para mim, uma experiência das mais enriquecedoras.

Ao Professor Antonio Carlos Marques Alvim, presença indiscutivelmente ímpar, pelas conversas sempre repletas de ensinamentos compartilhados com prodigalidade.

Ao Professores Aquilino Senra Martinez e Hermes Alves Filho, por terem aceitado compor tão ilustre banca examinadora. Senti-me honrado com suas presenças.

Ao Professor Helio de Carvalho Vital, cuja generosidade e competência somente são suplantadas por minha admiração, consequência dos anos de convivência profissional.

Ao amigo Gen Bda Carlos Eduardo da Mota Góes, com quem tive a honra de trabalhar por vários anos. Seu envolvimento pessoal tornou possível lançar-me a essa conquista de forma definitiva.

À minha melhor amiga, por sorte cúmplice e esposa, Mônica Celso Nogueira. Seu carinho e insistentes "cobranças" conduziram-me à retomada de muitas aspirações... quase perdidas.

Por fim, mas não menos importante, gostaria de agradecer a meus filhos: Mariana, Rafael e Guilherme. Suas ausências deliberadas ao longo dos anos têm feito de mim alguém mais forte e grato por tudo o que a Vida me tem dado.

> Ninguém pode voltar atrás e fazer um novo começo, mas qualquer um pode recomeçar e fazer um novo fim. Francisco Cândido Xavier

> > iv

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

NOVAS FUNÇÕES DE BASE DO MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL PARA CÁLCULOS GLOBAIS DE REATORES NUCLEARES

Sérgio Barros Paixão

Março/2022

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Neste trabalho é apresentado um formalismo matemático capaz de estender o conjunto de funções de base do Método de Expansão Nodal (NEM) a qualquer ordem. As novas funções de base devem introduzir termos necessários a uma aproximação mais adequada à forma do fluxo médio transversal, considerando-se as severas distorções presentes nas regiões de interface combustível-refletor.

Da mesma forma que o aumento do número de termos em séries convergentes deve conduzir a resultados mais precisos, supõe-se que o aumento da ordem das expansões no NEM possa aproximar de modo mais eficaz seus resultados à solução considerada "*referência*" para o problema em análise.

Simulações de problemas de autovalor para "benchmarks" bi e tridimensionais de reatores moderados à água leve (*LWR*), considerando expansões polinomiais de até décima ordem e funções-peso dos tipos momentos e Galerkin, foram realizadas. A introdução de novos termos ao conjunto de funções de base tradicional forneceu resultados mais precisos para o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e distribuições de potência normalizadas, inclusive em nodos de regiões de interface "núcleo-refletor". A análise dos resultados indica que as funções de base introduzidas podem agregar novas perspectivas ao NEM, com a possibilidade de resultados mais precisos sem comprometimento da eficiência do método.

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

NEW NODAL EXPANSION METHOD BASIS FUNCTIONS FOR NUCLEAR REACTORS GLOBAL CALCULATIONS

Sérgio Barros Paixão

March/2022

Advisor: Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

In this work, a mathematical formalism capable of extending the Nodal Expansion Method (NEM) basis functions' set to any order is introduced. The new basis functions should introduce the additional terms required to describe the average transverse flux more properly, considering its severe distortions at fuel-reflector interfaces. In the same way that the increase of the number of terms in convergent series should lead to more accurate results, it is assumed that increasing the expansion orders of the NEM should more effectively approximate the method's results to the expected solution.

Simulations of two- and three-dimensional LWR static benchmarks have been performed, using up to tenth-order polynomial expansions, for both moments weighting and Galerkin. The introduced basis functions have led to more accurate results for the calculated effective multiplication factors and normalized assembly power distributions, including nodes at fuel-reflector interfaces.

The analysis of the results indicates that the introduced basis functions can add new opportunities to the NEM, with the possibility of more accurate results and without a lack of the method's efficiency.

Sumário

CAPÍTULO 1 - Introdução	
1.1. Considerações gerais	
1.1.1. Método de diferenças finitas (FDM) – Malhas finas	
1.1.2. Métodos de malhas grossas	14
1.2. Métodos nodais transversalmente integrados (TINM)	15
1.2.1. Método nodal analítico (ANM)	16
1.2.2. Método de expansão nodal (NEM)	16
1.3. Objetivos da tese	17
1.4. A organização da tese	
CAPÍTULO 2 – Método de Expansão Nodal	19
2.1. Considerações gerais	19
2.2. Derivação das equações nodais	19
2.3. Termo de fuga e coeficientes de ordens superiores	
CAPÍTULO 3 – Funções de base do NEM	
3.1. Método de Galerkin	
3.2. Polinômios ortogonais	
3.3. Polinômios de ordens superiores	
3.3.1. Polinômios ortogonais e o NEM	
3.3.2. Restrições matemáticas	
3.4. Extensão do conjunto de funções de base	
3.5. Análise das funções de base	
CAPÍTULO 4 – Novas equações nodais	
4.1. Extensão das equações nodais	
4.2. Termo de fuga e coeficientes de ordens superiores	
CAPÍTULO 5 – Análises qualitativas	
5.1. Considerações gerais	
5.2. Informações sobre os "benchmarks"	
5.2.1. IAEA-2D	45
5.2.2. LRABWR-2D	45
5.2.3. BIBLIS-2D	
5.2.4. IAEA-3D	

5.2.5. LRABWR-3D	47
5.3. Análises qualitativas	47
CAPÍTULO 6 – Análises quantitativas	55
6.1. Comparações numéricas	55
6.1.1. IAEA-2D	56
6.1.2. LRABWR-2D	57
6.1.3. BIBLIS-2D	58
6.1.4. IAEA-3D	59
6.1.5. LRABWR-3D	60
6.2. Resumo dos resultados apresentados	61
CAPÍTULO 7 - Conclusões, comentários e sugestões	63
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	67
APÊNDICE A – Polinômios de ordens superiores	72
A.1. Forma generalizada da condição de consistência	73
A.2. Expansão de terceira ordem	75
A.3. Expansão de quarta ordem	75
A.4. Expansão de quinta ordem	75
A.5. Expansão de sexta ordem	76
A.6. Expansão de sétima ordem	77
A.7. Expansão de oitava ordem	78
A.8. Expansão de nona ordem	79
A.9. Expansão de décima ordem	80
A.10. Coeficientes associados ($cn, n \ge 3$)	
APÊNDICE B – Coeficientes de ordens superiores	
B.1. Equações básicas	
B.2. Derivadas das funções de base	
B.3. Equações de acoplamento para ordens superiores (N>2)	
B.4. Equações nodais para expansão de décima ordem (N=10)	
B.5. Coeficientes de ordens superiores	89
APÊNDICE C – Descrições dos problemas	93
C.1. IAEA-2D	93
C.2. LRABWR-2D	95
C.3. BIBLIS-2D	97

C.4. IAEA-3D		
C.5. LRABWR-3I)	

Lista de Figuras

Figura 1: Representação de um PWR convencional (OKA, 2014)	13
Figura 2: Representação de um BWR convencional (OKA, 2014)	13
Figura 3: Representação geométrica do nodo arbitrário m	
Figura 4: Problema IAEA-2D – Peso momentos	49
Figura 5: Problema IAEA-2D – Peso Galerkin	
Figura 6: Problema LRABWR-2D – Peso momentos	
Figura 7: Problema LRABWR-2D – Peso Galerkin	
Figura 8: Problema BIBLIS-2D – Peso momentos	51
Figura 9: Problema BIBLIS-2D – Peso Galerkin	51
Figura 10: Problema IAEA-3D – Peso momentos	
Figura 11: Problema IAEA-3D – Peso Galerkin	
Figura 12: Problema LRABWR-3D – Peso momentos	53
Figura 13: Problema LRABWR-3D – Peso Galerkin	53
Figura 14: Erros percentuais para o "benchmark" IAEA-2D	56
Figura 15: Erros percentuais para o "benchmark" LRABWR-2D	57
Figura 16: Erros percentuais para o "benchmark" BIBLIS-2D	58
Figura 17: Erros percentuais para o "benchmark" IAEA-3D	59
Figura 18: Erros percentuais para o "benchmark" LRABWR-3D	60
Figura 19: Mapeamento IAEA-2D	62
Figura 20: Mapeamento IAEA-3D	62
Figura 21: Mapeamento BIBLIS-2D	62
Figura 22: Mapeamento LRABWR-2D	62
Figura 23: Mapeamento LRABWR-3D	
Figura 24: IAEA-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e $1^{\underline{0}}$ quadrante)	93
Figura 25: LRABWR-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e 1° quadrante)	95
Figura 26: BIBLIS-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e 1° quadrante)	97
Figura 27: IAEA-3D – Vistas de topo e frontal	
Figura 28: IAEA-3D – Vista de topo em diferentes planos (1° quadrante)	100
Figura 29: LRABWR-3D – Vistas de topo e frontal	

Lista de Tabelas

Tabela 1: Extensão das funções de base de ordens superiores	36
Tabela 2: Ortogonalidade entre funções de base	37
Tabela 3: Ortogonalidade entre funções de base e segundas derivadas	42
Tabela 4: Aproximações mais representativas para $\bar{\psi}_{gu}^m(v)$, por função-peso	54
Tabela 5: Resumo dos resultados apresentados	61
Tabela 6: IAEA-2D – Dados nucleares	94
Tabela 7: LRABWR-2D – Dados nucleares	96
Tabela 8: BIBLIS-2D – Dados nucleares	98
Tabela 9: IAEA-3D – Dados nucleares	101
Tabela 10: LRABWR-3D – Dados nucleares	103

CAPÍTULO 1 Introdução

1.1. Considerações gerais

Em projetos e operações de reatores nucleares é essencial a disponibilidade de ferramentas de cálculo capazes de prever as distribuições de fluxos de nêutrons, consequentemente as distribuições de potência e taxas de reações, em cada local do núcleo, com precisão e rapidez. Neste sentido, seguem-se breves comentários sobre alguns dos vários métodos utilizados, com enfoque no Método de Expansão Nodal (NEM), o qual constitui o objetivo da presente tese.

1.1.1. Método de diferenças finitas (FDM) - Malhas finas

O Método das Diferenças Finitas (ALVIM, 2007; OKA, 2014) tem sido largamente utilizado como padrão de referência para a solução da equação de difusão de nêutrons, em diferentes tipos de reatores, como decorrência natural da consistência e precisão inerentes a esse método. Apesar disso, e dos contínuos avanços em tecnologias de computadores, permanecem ainda restrições de ordem prática na classe de problemas que podem ser resolvidos com sua utilização. Elevados consumo de tempo de processamento e disponibilidade de capacidade de armazenamento têm sido requisitos computacionais limitadores da aplicabilidade do método, comprometendo sua competitividade e tornando seu emprego proibitivo em muitas das aplicações em reatores, em face da existência de soluções alternativas também eficazes e muito mais eficientes.

No caso de reatores rápidos, devido ao grande tamanho do livre caminho médio dos nêutrons e, além disso, por não ser necessário o acoplamento entre cálculos nuclear e termo-hidráulico, o método das diferenças finitas permanece em utilização, apresentando rápida convergência das iterações externas (OKA, 2014). Por outro lado, para aplicações do FDM em LWRs – essa família de reatores representa 82,5% dos reatores nucleares comerciais em operação, 45 das 52 novas unidades em construção (IAEA, 2021) e 89,5% de toda a geração nucleoelétrica no planeta (GOSPODARCZYK, 2021), o emprego de malhas com espaçamentos de 1 a 2 cm fazse necessário, pois nesse caso o tamanho do livre caminho médio é pequeno (OKA, 2014).

A discretização tridimensional em malha fina do núcleo de um PWR de pouco mais que 33 m³ (Figura 1), ou de um BWR de aproximadamente 67 m³ (Figura 1), por exemplo, resulta em um número de dezenas de milhões de elementos de volume ("*mesh cells*"), embora excluída a região do refletor. A equação da difusão de nêutrons precisa ser resolvida dentro de cada um desses elementos, para cada grupo de energia, repetidas vezes até a convergência dos resultados, podendo ser necessário ainda considerar acoplamentos termo-hidráulicos e correções dos parâmetros nucleares. Como consequência da crescente complexidade computacional, o cálculo tridimensional de um LWR comercial usando o método de diferenças finitas em sua forma tradicional (malha fina) torna-se extremamente custoso mesmo para um computador de alto desempenho atual, e, portanto, inviável (OKA, 2014).



Figura 1: Representação de um PWR convencional (OKA, 2014).



Figura 2: Representação de um BWR convencional (OKA, 2014).

Um conjunto interessante e enriquecedor de informações sobre vários métodos utilizados em cálculo de reatores nucleares pode ser obtido da conjunção do trabalho de tese de LAWRENCE (1979) com os artigos de SUTTON e AVILES (1996) e de SMITH (2021). No último, a pedido da Sociedade de Energia Atômica do Japão, o Professor Kord Sterling Smith versa sobre suas experiências pessoais no desenvolvimento e aplicação de métodos em Física de Reatores.

1.1.2. Métodos de malhas grossas

O desenvolvimento dos métodos de malhas grossas teve por motivação o atendimento à demandas da área de análise de reatores térmicos, em estudos onde os resultados do fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e taxas médias de reações eram as informações de interesse. Fluxos e parâmetros neutrônicos médios calculados em sub-regiões contíguas do espaço, em lugar de soluções ditas "contínuas", podem então ser obtidos a partir de formas integradas do problema. Uma solução integrada incorre naturalmente na redução das quantidades de informações armazenadas, até então vinculadas a "pontos" espaciais. O crescimento das dimensões da malha (elemento de volume) reduz de modo drástico os números de incógnitas e varáveis associadas, minimizando sensivelmente os requisitos de processamento e armazenamento. Apesar de, em alguns cálculos, os detalhes da forma da distribuição do fluxo neutrônico dentro das sub-regiões poderem ser considerados "um requisito secundário", para alcançar uma aplicabilidade mais geral, um método de malha grossa deve ter a capacidade de tornar possível recuperar essa informação a partir da solução para o problema integrado.

Segundo PUTNEY (1984) as famílias de métodos de malha grossa podem ser subdivididas em: métodos de diferenças finitas de malha grossa (CMFD), métodos de elementos finitos (FEM), métodos de síntese de fluxo (FSM), métodos de matriz resposta (RMM) e métodos nodais (NM).

O presente estudo situa-se na família dos métodos de difusão nodal desenvolvidos para cálculos globais em geometrias cartesianas (LAWRENCE, 1986). Inicialmente apresentados na década de 1960, constituem-se na abordagem dominante

entre as ferramentas atuais para projeto e análise de segurança do núcleo de LWRs comerciais (OKA, 2014; SMITH, 2017).

1.2. Métodos nodais transversalmente integrados (TINM)

A maioria dos Métodos Nodais utiliza-se do procedimento de "Integração Transversal". Considerado um marco no desenvolvimento de novas possibilidades de cálculo em LWRs, o surgimento desse procedimento data do início da década de 1970, tendo ocorrido na Alemanha (SMITH, 2021).

Nesse procedimento, a equação de difusão de nêutrons tridimensional é integrada sobre as direções transversais àquela considerada, de modo a reduzir-se a um conjunto de três equações unidimensionais acopladas e formalmente exatas. Na forma transversalmente integrada aparecem termos associados às fugas nas direções transversais, denominados *"fugas transversais"*. A forma unidimensional resultante pode então ser resolvida dentro de um elemento genérico de volume, denominado *"nodo"*.

Formalmente, são duas as classes de métodos nodais fundamentadas na solução das equações transversalmente integradas: Analíticos (SHOBER, 1976; SMITH, 1979; LAWRENCE, 1979; LAWRENCE; DORNING, 1980) e Polinomiais (FINNEMANN *et al.*, 1977; SMITH *et al.*, 1985).

Entre os métodos nodais analíticos pode-se exemplificar o Método Analítico Nodal (ANM) (SMITH, 1979) e o Método Nodal de Função de Green (NGFM) (LAWRENCE, 1979). Enquanto que entre os métodos polinomiais destacam-se o Método de Expansão Nodal (NEM) (FINNEMANN *et al.*, 1977) e o Método QPANDA – "Quartic Polynomial Analytic Nonlinear Diffusion Accelerated" (SMITH *et al.*, 1985). O ANM e o NEM são os dois métodos de difusão nodais mais amplamente utilizados.

Em todos os métodos nodais que se utilizam do procedimento de integração transversal encontra-se a mesma fonte primária de imprecisão: a aproximação do termo de fuga transversal.

1.2.1. Método nodal analítico (ANM)

No caso do ANM, a forma de fluxo intra-nodal é dada pela solução analítica da equação de difusão de nêutrons transversalmente integrada a dois grupos de energia. Esta abordagem não requer outra aproximação além da definição do termo de fuga transversal, expresso através de uma expansão polinomial de segunda ordem. No entanto, devido à sua complexidade, o método nodal analítico tem sido usado restritamente a problemas de modelagem com não mais que dois grupos de energia. Existem menções sobre a extensão do método a problemas na forma multigrupo (VOGEL; WEISS, 1992; SMITH, 2021).

Embora possa parecer matematicamente mais atrativo, o ANM apresenta resultados totalmente compatíveis àqueles fornecidos pelo NEM .

1.2.2. Método de expansão nodal (NEM)

O NEM tem sido o método polinomial mais utilizado. Nesse método, a forma do fluxo unidimensional intra-nodal é tradicionalmente aproximada através de uma expansão polinomial de quarta ordem, utilizando termos pertencentes a um conjunto de funções de base. As formas polinomiais inicialmente propostas encontram-se apresentadas nos artigos de FINNEMANN (1975) e FINNEMANN e WAGNER (1975), tendo sido posteriormente redefinidas por FINNEMANN *et al.* (1977) para as formas comumente empregadas. Os coeficientes polinomiais da expansão são calculados a partir da técnica empregada nos Métodos dos Resíduos Ponderados.

Segundo relatado por CHRISTENSEN (1985): "as vantagens do NEM são que ele é muito rápido e preciso, e a solução também converge em direção à solução correta com refinamentos da malha. A única desvantagem é que a base teórica é bastante pobre para aproximações de ordens superiores, mas para todos os reatores moderados por água leve o método funciona muito bem".

Segundo PALMTAG (1997), os métodos nodais polinomiais podem ser convenientes por serem mais rápidos que os analíticos, além de permitir que as seções de choque espacialmente dependentes sejam mais facilmente tratadas. Para a maioria dos problemas em LWRs, o fluxo neutrônico é uma função relativamente suave e, por isso, os métodos polinomiais fornecem resultados precisos. No entanto, podem tornar-se imprecisos para problemas com grandes gradientes de fluxo (PALMTAG, 1997).

Uma das vantagens clássicas associada ao NEM é a de não apresentar em seus fundamentos teóricos restrição quanto a grupos de energia (WAGNER *et al.*, 1977).

1.3. Objetivos da tese

Reconhecidamente, a necessidade de representar o termo de fuga transversal através de alguma forma aproximada persiste como fonte de imprecisão comum a todos os métodos nodais transversalmente integrados. Seguramente, a forma real da fuga transversal é muito mais complicada que a expansão quadrática amplamente utilizada. Próximo aos limites do reator, em nodos situados na fronteira núcleo-refletor, e em regiões de mudanças abruptas de composição, como nos casos de presença de barras de controle, onde os gradientes de fluxo devido à termalização são mais pronunciados, a aproximação quadrática torna-se insuficiente. Nesses casos, o esquema numérico pode levar a erros de até 10% no fluxo ou mesmo resultados negativos, que podem, por sua vez, desestabilizar o cálculo e levar à não convergência da simulação (PRINSLOO; TOMAŠEVIĆ, 2011).

Tentativas em aperfeiçoar a forma para a aproximação do termo de fuga têm sido objetivos de investigações (PRINSLOO; TOMAŠEVIĆ, 2011; ALVIM *et al.*, 2012; SMITH, 2021). Porém, sem ganhos consideráveis.

Por outro lado, nenhum investimento em ampliar a ordem das expansões polinomiais ou a quantidade de termos disponíveis no conjunto de funções de base do NEM, supostamente capazes de aproximar de forma mais eficaz a solução do problema, tem sido observado desde a proposição do método. É nessa premissa que se fundamentam os objetivos do presente estudo. Para tanto, a correta compreensão do desenvolvimento do método, o estabelecimento de um formalismo matemático que permita sustentar a extensão das funções de base e a análise de resultados frente a *"benchmarks"*, resumem as etapas a serem conduzidas.

1.4. A organização da tese

O Capítulo 2 apresenta o método da expansão nodal (FINNEMANN *et al.*, 1977), NEM, procurando observar o conjunto de funções de base associado e as definições dos coeficientes polinomiais.

O Capítulo 3 apresenta conceitos matemáticos indispensáveis ao desenvolvimento do NEM, tais como Polinômios Ortogonais e o Método de Galerkin. O emprego desses conceitos permite estabelecer os formalismos necessários para gerar polinômios de novas ordens superiores ao conjunto de funções de base existente e para determinar os respectivos coeficientes associados, possibilitando generalizar o conjunto dos *"polinômios do* NEM" a qualquer ordem. No Apêndice A são apresentadas as etapas necessárias para extensão desse conjunto à décima ordem.

No Capítulo 4 apresenta-se a generalização do conjunto de equações nodais, na forma multigrupo, associadas à extensão do conjunto de funções de base do método. Além disso, é apresentada a generalização dos coeficientes polinomiais necessários a expansão (PAIXÃO; SILVA, 2022) agora de ordem ilimitada. No Apêndice B descreve-se detalhadamente a construção desses coeficientes.

No Capítulo 5 são apresentados os "*benchmarks*" simulados, bem como análises qualitativas dos resultados das várias aproximações utilizadas para cada caso estudado. Para tais análises são definidos parâmetros que possibilitam identificar quais as melhores aproximações a cada um dos casos. As configurações geométrica e material para cada um dos "*benchmarks*" considerados são apresentadas no Apêndice C.

O Capítulo 6 apresenta comparações numéricas dos resultados obtidos com a expansão de quarta ordem como aproximação ao fluxo médio transversal e de segunda ordem para o termo de fuga transversal - M_4B^2 , em notação adotada por FINNEMANN *et al.* (1977) – características do NEM e largamente empregadas, àqueles obtidos através das escolhas orientadas pelas análises qualitativas realizadas no capítulo anterior.

No Capítulo 7 são apresentados comentários, conclusões e sugestões de possíveis aplicações das agora novas possibilidades do NEM.

CAPÍTULO 2 Método de Expansão Nodal

2.1. Considerações gerais

O Método de Expansão Nodal (NEM) é um método de malha grossa, amplamente testado e que provou ser uma poderosa ferramenta na análise de LWRs. Trata-se de um método consistente; ou seja, seus resultados convergem para a solução exata do problema à medida que o espaçamento da malha é reduzido, de mesma forma que o Método de Diferenças Finitas, e sem restrições quanto a número de grupos de energia. O NEM utiliza procedimentos do Método dos Resíduos Ponderados (FINNEMANN *et al.*, 1977), mais propriamente do Método de Galerkin, onde a qualidade seus resultados está atrelada à escolha da função de ponderação adequada.

Em LWRs, o fluxo tem uma forma relativamente suave. No entanto, em regiões próximas às interfaces núcleo-refletor (WAGNER *et al.*, 1977; SMITH, 1986; HETZELT; WINTER, 1999; SANDRIN *et al.*, 2011), por exemplo, uma expansão de quarta ordem, conforme utilizado em ferramentas de cálculo baseadas no NEM, pode não ser capaz de produzir resultados suficientemente precisos, principalmente devido a efeitos dos nêutrons térmicos. Com o propósito de definir uma melhor aproximação à solução exata da equação transversalmente integrada, polinômios de novas ordens superiores devem ser determinados, como uma extensão natural do conjunto de funções de base do método.

Ao longo do capítulo serão destacadas informações contidas no artigo de FINNEMANN *et al.* (1977), considerado principal referência para o desenvolvimento do presente estudo, cabendo aos próximos capítulos as investigações necessárias à extensão do conjunto de funções de base do método.

2.2. Derivação das equações nodais

Assim como em todos os métodos de difusão nodal, o domínio espacial do núcleo do reator é particionado em elementos de volume, denominados "*nodos*". No NEM, considerando geometria cartesiana tridimensional, os nodos são paralelepípedos

retangulares com dimensões comparáveis à largura do elemento combustível (EC), dentro dos quais os parâmetros materiais (seções de choque) são homogêneos.

Em métodos de difusão nodal, o ponto de partida é a integração da equação de continuidade de nêutrons no volume V_m ($V_m = a_x^m a_y^m a_z^m$) de um nodo arbitrário *m* (Figura 3), conferindo à essa equação um sentido de "média volumétrica", conforme descrito na Equação (2.1). Onde u (u = x, y, z) representa a direção considerada, a_u^m é a largura do nodo *m* para essa mesma direção, *s* (s = l, r) refere-se a lado (esquerdo ou direito, respectivamente), e A_u^m refere-se à superfície transversal à direção u.



Figura 3: Representação geométrica do nodo arbitrário m.

$$\frac{1}{V_m} \int_{V_m} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_g(x, y, z) + \Sigma_{tg}(x, y, z) \phi_g(x, y, z) \right) dV$$

$$= \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \sum_{g'=1}^G \left(\frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}(x, y, z) + \Sigma_{gg'}(x, y, z) \right) \phi_{g'}(x, y, z) dV.$$
(2.1)

Onde:

$$I_g$$
 = corrente líquida de nêutrons do grupo g (cm⁻² s⁻¹)

$$\phi_g$$
 = fluxo escalar de nêutrons do grupo g (cm⁻² s⁻¹),

 k_{eff} = autovalor para a configuração do núcleo,

$$\Sigma_{tg}$$
 = seção de choque macroscópica total para o grupo g (cm⁻¹),

$$v\Sigma_{fg}$$
 = número médio de nêutrons emitidos por fissão vezes a seção de choque macroscópica de fissão para o grupo g (cm⁻¹),

$$\Sigma_{gg}$$
, = seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g^{-1} para o grupo g (cm⁻¹),

$$G$$
 = número total de grupos de energia.

Considerando parâmetros nucleares homogêneos dentro do nodo *m*, a equação da continuidade de nêutrons integrada (Equação 2.1), fornece um conjunto de equações denominadas "*equações de balanço nodal*".

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} \left(\bar{J}_{gur}^m - \bar{J}_{gul}^m \right) + \Sigma_{tg}^m \bar{\phi}_g^m = \sum_{g'=1}^G \left(\Sigma_{gg'}^m + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^m \right) \bar{\phi}_{g'}^m, g = 1, \cdots G. \quad (2.2)$$

Onde fluxo médio nodal $\bar{\phi}_g^m$, correntes líquidas médias nas interfaces \bar{J}_{gus}^m e seção de choque genérica homogêna Σ_{Xg}^m são definidos:

$$\bar{\phi}_g^m \equiv \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \phi_g(x, y, z) \mathrm{d}V, \qquad (2.3.1)$$

$$\bar{J}_{gus}^{m} \equiv \frac{1}{A_{u}^{m}} \int_{A_{u}^{m}} J_{gu}(u_{s}^{m}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \, \mathrm{d}A_{u}; \, \mathrm{d}A_{u} = \mathrm{d}\boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{w}, \qquad (2.3.2)$$

e

$$\Sigma_{Xg}(x, y, z) = \Sigma_{Xg}^m, \text{ para } (x, y, z) \in V_m.$$
(2.3.3)

Embora a formulação das equações de balanço nodal seja formalmente exata, ela é incompleta no sentido de que relaciona duas quantidades ainda desconhecidas: $\bar{\phi}_g^m$ e \bar{J}_{gus}^m . Para estabelecer um sistema completo de equações, relações adicionais são derivadas a partir da Lei de Fick, aplicando-se o procedimento de integração transversal. As equações resultantes são denominadas "*equações de acoplamento*".

$$\bar{J}_{gus}^{m} = \bar{J}_{gus}^{+m} - \bar{J}_{gus}^{-m} = -D_{g}^{m} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) \Big|_{u=u_{s}^{m}}$$
(2.4)

Onde fluxo médio transversal $\bar{\psi}^m_{gu}(u)$ e coeficiente de difusão são definidos:

$$\bar{\psi}_{gu}^m(u) \equiv \frac{1}{A_u^m} \int_{A_u^m} \phi_g(u, v, w) \mathrm{d}A_u \,, \tag{2.5.1}$$

e

$$D_g^m = \frac{1}{3\Sigma_{trg}^m}.$$
 (2.5.2)

É possível escrever uma relação entre os fluxos integrados no volume e na seção transversal (Equações 2.3.1 e 2.5.1, respectivamente):

$$\bar{\phi}_g^m \equiv \frac{1}{a_u^m} \int_0^{a_u^m} \bar{\psi}_{gu}^m(u) \mathrm{d}u \tag{2.6}$$

Essa relação de preservação dos fluxos integrados (Equação 2.6) é denominada "condição de consistência".

Além disso, uma equação para o fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^m(u)$ pode ser obtida através do procedimento de integração transversal da equação da difusão de nêutrons tridimensional.

$$-D_g^m \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}u^2} \bar{\psi}_{gu}^m(u) + \Sigma_{tg}^m \bar{\psi}_{gu}^m(u) = \sum_{g'=1}^G \left(\Sigma_{gg'}^m + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^m \right) \bar{\psi}_{g'u}^m(u) - L_{gu}^m(u)$$
(2.7)

Onde $L_{gu}^m(u)$ representa o termo de fuga nas direções transversais à direção considerada.

$$L_{gu}^{m}(u) \equiv -\frac{1}{A_{u}^{m}} \int_{A_{u}^{m}} D_{g}^{m} \left(\frac{\partial^{2}}{\partial v^{2}} \phi_{g}(u, v, w) + \frac{\partial^{2}}{\partial w^{2}} \phi_{g}(u, v, w) \right) dv dw \qquad (2.8)$$

Como não se conhece a solução da Equação (2.7), no NEM faz-ze uso de uma expansão quártica como aproximação ao fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^m(u)$ e de uma expansão quadrática como aproximação ao termo de fuga transversal $L_{gu}^m(u)$.

$$\bar{\psi}_{gu}^{m}(u) = \sum_{n=0}^{4} c_{ngu}^{m} h_n\left(\frac{u}{a_u^{m}}\right)$$
(2.9.1)

e

$$L_{gu}^{m}(u) = \sum_{n=0}^{2} \alpha_{ngu}^{m} h_{n} \left(\frac{u}{a_{u}^{m}}\right).$$
(2.9.2)

Os coeficientes α_{ngu}^m podem ser observados na Equação (2.19).

As condições de contorno do problema podem ser definidas:

$$\left. \bar{\psi}_{gu}^{m}(u_{s}^{m}) \right|_{s=l} = \bar{\psi}_{gul}^{m},$$
 (2.10.1)

e

$$\left. \bar{\psi}_{gu}^m(u_s^m) \right|_{s=r} = \bar{\psi}_{gur}^m. \tag{2.10.2}$$

As funções de base largamente empregadas por usuários e estudiosos do NEM, $h_n(v)$, são definidas de modo que $v = u/a_u^m$ ($u \in [0, a_u^m] \rightarrow v \in [0,1]$) (FINNEMANN *et al.*, 1977).

$$h_0 = 1,$$
 (2.11.1)

$$h_1(v) = 2v - 1, (2.11.2)$$

$$h_2(v) = 6v(1-v) - 1,$$
 (2.11.3)

$$h_3(v) = 6v(1-v)(2v-1),$$
 (2.11.4)

$$h_4(v) = 6v(1-v)(5v^2 - 5v + 1), \tag{2.11.5}$$

A imposição das condições de contorno (Equações 2.10.1 e 2.10.2) e de consistência (Equação 2.6) à expansão (Equação 2.9.1) que aproxima o fluxo médio transversal, $\bar{\psi}_{gu}^{m}(u)$, possibilita a determinação dos três primeiros coeficientes de ajuste associados. Essa primeira forma de aproximação é denominada "variante básica" do método, caracterizando o NEM de baixa ordem.

$$\bar{\psi}_{gu}^{m}(v) = \bar{\phi}_{g}^{m} + \frac{1}{2} (\bar{\psi}_{gur}^{m} - \bar{\psi}_{gul}^{m}) (2v - 1) +$$

$$\left[\bar{\phi}_{g}^{m} - \frac{1}{2} (\bar{\psi}_{gur}^{m} + \bar{\psi}_{gul}^{m}) \right] (6v(1 - v) - 1), v = u/a_{u}^{m} v \in [0, 1]$$

$$(2.12)$$

Explicitando os coeficientes da variante básica:

$$c^m_{0gu} = \bar{\phi}^m_g, \qquad (2.13.1)$$

$$c_{1gu}^{m} = \frac{1}{2} \left(\bar{\psi}_{gur}^{m} - \bar{\psi}_{gul}^{m} \right), \tag{2.13.2}$$

e

$$c_{2gu}^{m} = \bar{\phi}_{g}^{m} - \frac{1}{2} \left(\bar{\psi}_{gur}^{m} + \bar{\psi}_{gul}^{m} \right).$$
(2.13.3)

Através da aproximação da difusão transversalmente integrada é possível obter uma expressão adicional que estabelece relações entre grandezas nas faces do nodo: fluxo médio transversal, $\bar{\psi}_{gu}^m(u_s^m)$, e correntes médias parciais, $\bar{J}_{gus}^{\pm m}$.

$$\bar{\psi}_{gu}^m(u_s^m) = 2(\bar{J}_{gus}^{+m} + \bar{J}_{gus}^{-m}), s = l, r.$$
(2.14)

O conjunto de equações nodais é composto das equações de correntes de saída, obtidas das equações de acoplamento, e de balanço nodal, obtida através da atualização dos termos de corrente de saída na forma prévia da equação de balanço.

A introdução da forma aproximada para o fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^m(u)$ (Equação 2.9.1) nas equações de acoplamento (Equação 2.4), possibilita estabelecer equações para as correntes de saída: $\bar{J}_{gul}^{-m} \in \bar{J}_{gur}^{+m}$. Esse conjunto de equações explicita relações matemáticas das componentes em questão com: fluxo médio nodal, correntes parciais de entrada e coeficientes de ajuste associados aos polinômios de ordens superiores ($c_{3gu}^m \in c_{4gu}^m$).

$$\bar{J}_{gul}^{-m} = A_{0gu}^m \bar{\phi}_g^m + A_{1gu}^m \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{2gu}^m \bar{J}_{gur}^{-m} - A_{3gu}^m c_{3gu}^m + A_{4gu}^m c_{4gu}^m, \qquad (2.15.1)$$

e

$$\bar{J}_{gur}^{+m} = A_{0gu}^m \bar{\phi}_g^m + A_{2gu}^m \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{1gu}^m \bar{J}_{gur}^{-m} + A_{3gu}^m c_{3gu}^m + A_{4gu}^m c_{4gu}^m.$$
(2.15.2)

A decomposição das correntes líquidas, presentes na equação de balanço nodal (Equação 2.2), em suas componentes parciais, possibilita substituir as componentes de saída pelas equações recém obtidas (Equações 2.15.1 e 2.15.2), estabelecendo-se uma forma para a equação de balanço nodal que explicita não mais apenas relações entre fluxos e correntes, mas uma dependência com o coeficiente de ajuste associado ao polinômio de quarta ordem (c_{4gu}^m).

$$\left(\sum_{tg}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m} \right) \bar{\phi}_{g}^{m}$$

$$= \sum_{g'=1}^{G} \left(\sum_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) \bar{\phi}_{g'}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \left\{ \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m} [2(\bar{J}_{gul}^{+m} + \bar{J}_{gur}^{-m}) - c_{4u,g}^{m}] \right\}.$$
(2.16)

Onde os coeficientes A_{ngu}^m ($n = 0, \dots 4$) são funções racionais do quociente D_g^m/a_u^m .

$$A_{0gu}^{m} = \frac{6(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})}{1+12(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})},$$
(2.17.1)

$$A_{1gu}^{m} = \frac{1 - 48 \left(D_{g}^{m} / a_{u}^{m} \right)^{2}}{\left(1 + 4 \left(D_{g}^{m} / a_{u}^{m} \right) \right) \left(1 + 12 \left(D_{g}^{m} / a_{u}^{m} \right) \right)},$$
(2.17.2)

$$A_{2gu}^{m} = -\frac{8(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})}{\left(1 + 4(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})\right)\left(1 + 12(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})\right)},$$
(2.17.3)

$$A_{3gu}^{m} = \frac{6(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})}{1 + 4(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})},$$
(2.17.4)

e

$$A_{4gu}^{m} = \frac{6(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})}{1+12(D_{g}^{m}/a_{u}^{m})} = A_{0gu}^{m}.$$
(2.17.5)

De acordo com FINNEMANN *et al.* (1977), o NEM é fruto da utilização dos Métodos dos Resíduos Ponderados, cuja eficácia depende intimamente da escolha adequada da função ponderadora, denominada "*função-peso*".

Em seu artigo, FINNEMANN *et al.* (1977) utilizaram duas formas de ponderação: momentos e Galerkin. No esquema tipo Galerkin o polinômio da própria ordem investigada é usado como função-peso, enquanto que na ponderação tipo momentos o polinômio duas ordens inferior é utilizado. Com base nos resultados para os dois *"benchmarks"* bidimensionais estudados (IAEA e LRABWR), FINNEMANN *et al.* (1977) sugeriram que a ponderação tipo momentos lhes parecia preferível.

2.3. Termo de fuga e coeficientes de ordens superiores

A aplicação da técnica associada aos Métodos de Resíduos Ponderados, mais precisamente à aplicação do Método de Galerkin, na equação da difusão de nêutrons transversalmente integrada (Equação 2.7), em um nodo genérico *m*:

$$\frac{1}{a_{u}^{m}} \int_{0}^{a_{u}^{m}} W(u) \left[-D_{g}^{m} \frac{d^{2}}{du^{2}} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) + \Sigma_{tg}^{m} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) - \right]$$

$$\sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) \bar{\psi}_{g'u}^{m}(u) + L_{gu}^{m}(u) du = 0, \quad g = 1, \dots G.$$
(2.18)

Onde W(u) é a função-peso utilizada e $\overline{\psi}_{gu}^m(u)$ e $L_{gu}^m(u)$ as formas expandidas (Equações 2.9.1 e 2.9.2, respectivamente).

Semelhante a variante básica do método, o termo de fuga transversal é escrito:

$$L_{gu}^{m}(u) = \bar{L}_{gu}^{m} + \frac{L_{gur}^{m} - L_{gul}^{m}}{2} h_{1}\left(\frac{u}{a_{u}^{m}}\right) + \left(\bar{L}_{gu}^{m} - \frac{L_{gur}^{m} + L_{gul}^{m}}{2}\right) h_{2}\left(\frac{u}{a_{u}^{m}}\right).$$
(2.19)

Onde os termos L_{gul}^m e L_{gur}^m são informações da fuga no contorno, definidos a partir de condições de continuidade entre nodos imediatamente vizinhos, e \overline{L}_{gu}^m representa a fuga média transversal, definida pela combinação linear de correntes transversais parciais.

$$\bar{L}_{gu}^{m} = \sum_{\eta = v, w} \frac{1}{a_{\eta}^{m}} \left[\left(\bar{J}_{g\eta l}^{-m} + \bar{J}_{g\eta r}^{+m} \right) - \left(\bar{J}_{g\eta l}^{+m} + \bar{J}_{g\eta r}^{-m} \right) \right]$$
(2.20)

Os coeficientes de ajuste de ordens superiores $(c_{3gu}^m e c_{4gu}^m)$ são determinados através de relações de ortogonalidade entre polinômios de base e segundas derivadas. Ao resolver o problema a dois de grupos de energia, empregando-se como aproximação para o fluxo médio transversal uma expansão de terceira ordem, os coeficientes c_{3gu}^m vêm naturalmente da solução de um sistema matricial 2×2. Quando a expansão de quarta ordem é usada como aproximação, um sistema matricial 4×4 é encontrado, para a definição de c_{3gu}^m e c_{4gu}^m . Por características de paridade ligadas à ortogonalidade, o sistema 4×4 degenera-se em dois sistemas 2×2, permitindo a identificação de cada um dos coeficientes de ajuste de ordens superiores, c_{3gu}^m e c_{4gu}^m , de maneira independente.

CAPÍTULO 3 Funções de base do NEM

Analisadas as etapas do NEM (FINNEMANN *et al.*, 1977), um formalismo para generalização do conjunto de funções de base é apresentado como primeira etapa de contribuição da tese a extensão do método à quaisquer ordens.

Ao longo do presente capítulo é conduzida a análise detalhada dos polinômios tradicionais do NEM, bem como uma breve introdução ao Método de Galerkin, o primeiro dos Métodos dos Resíduos Ponderados, aplicado ao problema de valor de contorno.

3.1. Método de Galerkin

De acordo com FINLAYSON e SCRIVEN (1966), o Método de Galerkin, formulado em 1915 pelo matemático russo Boris Grigoryevich Galerkin, foi o primeiro e principal método que compõe a família dos "*Métodos dos Resíduos Ponderados*".

A denominação Métodos dos Resíduos Ponderados foi cunhada em 1956 por Stephen Harry Crandall, professor do curso de Engenharia Mecânica do Massachusetts Institute of Technology (MIT). Crandall, observando a mesma característica do Método de Galerkin em vários outros métodos (Método Integral, Método dos Subdomínios, Método dos Mínimos Quadrados, Método de Colocação, Método dos Momentos, etc.), propõe agrupá-los em uma mesma família (FINLAYSON; SCRIVEN, 1966).

Resumidamente, os Métodos dos Resíduos Ponderados podem ser entendidos como ferramentas teóricas desenvolvidas para identificar uma solução aproximada $\psi(\mathbf{x})$, capaz de exibir o mesmo comportamento global da variável dependente $\phi(\mathbf{x})$ para um problema de valor de contorno, dentro de um dado domínio espacial D. A forma aproximada $\psi(\mathbf{x})$ deve satisfazer as condições de contorno do problema original (FINLAYSON; SCRIVEN, 1966; SALIH, 2016). Como $\psi(\mathbf{x})$ é uma aproximação à solução esperada $\phi(\mathbf{x})$, falha em satisfazer ao problema original, causando um erro denominado "*resíduo*", $\mathcal{Res}(\mathbf{x})$. Com a incapacidade natural da solução aproximada

 $\psi(\mathbf{x})$ em representar a distribuição local esperada, Galerkin (LINDGREN, 2009; FINLAYSON, 2014) supôs então, atendidas as condições de contorno, um formalismo matemático no qual a solução aproximada produza o mesmo efeito médio global da solução esperada. Para isso, a existência de uma função ponderadora, denominada "função-peso", supostamente capaz de anular os efeitos do resíduo (SALIH, 2016).

Seja a equação,

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})) + f(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \mathbb{D}.$$
(3.1)

Onde $\phi(\mathbf{x})$ é a solução esperada do problema e $f(\mathbf{x})$ uma função conhecida, dentro do domínio \mathbb{D} . Seja \mathcal{L} o operador diferencial que transforma $\phi(\mathbf{x})$ dentro desse mesmo domínio, de modo a estabelecer uma relação com $f(\mathbf{x})$.

Considerando que $\psi(\mathbf{x})$ seja uma solução que atenda às condições de contorno do problema e aproxime o comportamento geral da solução esperada $\phi(\mathbf{x})$ dentro do domínio desse mesmo problema, sua introdução na equação original (Equação 3.1) produz um desvio do comportamento esperado, o resíduo ($\mathcal{R}es(\mathbf{x})$). Então,

$$\mathcal{L}(\psi(\mathbf{x})) + f(\mathbf{x}) = \mathcal{R}es(\mathbf{x}), \ \mathcal{R}es(\mathbf{x}) \neq 0, \mathbf{x} \in \mathbb{D}.$$
(3.2)

Procura-se, em um sentido médio, anular os efeitos do resíduo $\mathcal{R}es(\mathbf{x})$ no domínio do problema:

$$\int_{\mathbb{D}} w(\mathbf{x}) \mathcal{R}es(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = 0.$$
(3.3)

Onde $w(\mathbf{x})$, a função-peso, impõe uma ponderação à distribuição do desvio que a solução aproximada guarda da esperada, ao longo da dimensão do problema, de tal modo que torne nulo o efeito resultante dessa distribuição. Logo, conclui-se que tão mais eficaz será a forma aproximada, quão melhor escolhida for a função-peso (FINLAYSON; SCRIVEN, 1966).

Considerando que a solução aproximada $\psi(\mathbf{x})$ seja uma combinação linear de termos $N_i(\mathbf{x})$ de um conjunto finito de funções de base; ou seja, de termos pertencentes a um conjunto linearmente independente de funções analíticas previamente definidas, denominadas "funções-tentativa",

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{I} c_i N_i(\mathbf{x}).$$
(3.4)

A independência linear assegura ao conjunto de funções-tentativa a condição suficiente e necessária à formação de uma base funcional, dentro do universo de soluções possíveis ao problema. Tradicionalmente, polinômios e funções trigonométricas representam as formas mais comuns de funções-tentativa empregadas na Física. Porém, outras formas analíticas convenientemente escolhidas podem ser assumidas, desde que atendam os requisitos para a formação de uma base funcional e atendam às condições de contorno do problema de valor de contorno original (LINDGREN, 2009).

3.2. Polinômios ortogonais

Polinômios ortogonais são formas de funções-tentativa convenientes pois, por serem ortogonais, são intrinsecamente linearmente independentes e variam de forma suave em intervalos típicos. (SALIH, 2016).

A propriedade de ortogonalidade entre os polinômios $p_n(x)$ de uma família ortogonal pode ser expressa através da relação:

$$\langle p_k(x), p_n(x) \rangle \equiv \frac{1}{x_1 - x_0} \int_{x_0}^{x_1} W(x) p_k(x) p_n(x) dx = \varepsilon_n \delta_{kn} .$$
(3.5)

Onde W(x) representa a função-peso característica associada a família ortogonal considerada e δ_{kn} é o delta de Kronecker.

3.3. Polinômios de ordens superiores

Devido a ampla gama de aplicações em problemas da Física e da Matemática, os polinômios de Legendre, $P_n(x)$ ($x \in [-1,1]$), são os mais utilizados dentre as várias famílias ortogonais (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1970). Logo, a investigação de uma possível relação com as funções de base do NEM faz-se necessário.

3.3.1. Polinômios ortogonais e o NEM

Os primeiros seis elementos do conjunto de polinômios de Legendre em sua forma trasladada (*"shifted "*), $P_n^*(x)$ ($x \in [0,1]$), são apresentados:

$$P_0^* = 1,$$
 (3.6.1)

$$P_1^*(x) = 2x - 1, (3.6.2)$$

$$P_2^*(x) = 6x^2 - 6x + 1, (3.6.3)$$

$$P_3^*(x) = 20x^3 - 30x^2 + 12x - 1, (3.6.4)$$

$$P_4^*(x) = 70x^4 - 140x^3 + 90x^2 - 20x + 1, (3.6.5)$$

$$P_5^*(x) = 252x^5 - 630x^4 + 560x^3 - 210x^2 + 30x - 1.$$
(3.6.6)

A comparação com as funções de base do NEM (FINNEMANN *et al.*, 1977), resulta que:

$$h_0 = P_0^*,$$
 (3.7.1)

$$h_1(x) = P_1^*(x),$$
 (3.7.2)

$$h_2(x) = -P_2^*(x).$$
 (3.7.3)

A variante básica do NEM, apresentada na Equação (2.12), pode ser reescrita usando polinômios de Legendre. Os polinômios de ordens superiores (n > 2) apresentados no artigo de FINNEMANN *et al.* (1977) diferem totalmente dos respectivos polinômios de Legendre. Porém, é consistente afirmar que os polinômios de Legendre fundamentam a base funcional do NEM.

$$\bar{\psi}_{gu}^{m}(v) = \bar{\phi}_{g}^{m} P_{0}^{*} + \frac{1}{2} \left(\bar{\psi}_{gur}^{m} - \bar{\psi}_{gul}^{m} \right) P_{1}^{*}(v) - \left[\bar{\phi}_{g}^{m} - \frac{1}{2} \left(\bar{\psi}_{gur}^{m} + \bar{\psi}_{gul}^{m} \right) \right] P_{2}^{*}(v)$$
(3.8)

Algumas das propriedades dos polinômios ortogonais de Legendre em sua forma transladada são destacadas (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1970):

$$W_{\rm P}(x) = W_{\rm P} = 1, x \in [0,1],$$
 (3.9.1)

e

$$\langle P_j^*(x), P_k^*(x) \rangle = \frac{1}{2k+1} \,\delta_{jk} \,.$$
 (3.9.2)

Onde W_P representa a função-peso característica da família de polinômios ortogonais de Legendre.

3.3.2. Restrições matemáticas

Uma vez que os três primeiros termos do conjunto de funções de base do NEM satisfazem as condições de consistência (Equação 2.6) e de contorno (Equações 2.10.1 e 2.10.2), esgotam-se as condições naturais disponíveis ao problema, restando aos termos (polinômios) de ordens superiores restrições matemáticas derivadas das condições já atendidas.

$$h_n(v)|_{v=0} = h_n(v)|_{v=1} = 0, (3.10.1)$$

e

$$\int_{0}^{1} h_{n}(v) \mathrm{d}v = 0, \forall n \neq 0.$$
(3.10.2)

A combinação dessas restrições possibilita estabelecer um formalismo para a generalização dos polinômios de ordens superiores, através das definições de forma polinomial e de coeficientes associados. Tais definições derivam-se de condições de *nulidades* e de *ortogonalidades*, respectivamente.

As condições de nulidade possibilitam estabelecer a característica comum a todos os polinômios de ordens superiores: imposição de raízes no contorno. No caso de polinômios de graus ímpares, existe ainda a característica adicional de possuírem raiz no ponto central do nodo. À forma característica fundamental será acrescido um polinômio auxiliar, cujo grau complementa a forma polinomial necessária à ordem em pesquisa.

As condições de ortogonalidade possibilitam determinar os coeficientes associados ao polinômio auxiliar, parte do formalismo necessário à generalização dos polinômios de ordens superiores.

<u>Nulidade no contorno do nodo</u> – para todos os polinômios de ordens superiores (n > 2).

$$v(v-1)$$
 (3.11)

<u>Nulidade no centro do nodo</u> – para todos os polinômios de ordens ímpares, devido a troca de sinal em torno do ponto central do nodo ($v = \frac{1}{2}$), no domínio considerado.

$$(2\nu - 1)$$
 (3.12)

Então, a forma dos polinômios de ordens superiores $\hat{h}_n(v)$ pode ser escrita:

$$\hat{h}_n(v) = \begin{cases} c_n v(1-v) f_{n,n-2}(v), \text{ para valores pares de } n, \\ c_n v(1-v)(2v-1) f_{n,n-3}(v), \text{ para valores impares de } n. \end{cases}$$
(3.13)

Onde os c_n são coeficientes arbitrários e os $f_{n,k}(v)$ são o polinômios auxiliares.

$$f_{n,k}(v) = \begin{cases} 1, \text{ se } k = 0, \\ \sum_{j=0}^{k} a_{n,j} v^{j}, k > 0, v \in [0,1]. \end{cases}$$
(3.14)

<u>Ortogonalidade ao polinômio fundamental</u> – relação de ortogonalidade que expressa matematicamente a condição de consistência.

$$\langle h_0, h_n(\nu) \rangle = 0, n \neq 0 \tag{3.15}$$

<u>Ortogonalidade entre polinômios de ordens superiores</u> - garantia de independência linear do conjunto.

$$\langle h_k(v), h_n(v) \rangle = 0, k \neq n \tag{3.16}$$

3.4. Extensão do conjunto de funções de base

A existência das restrições matemáticas torna possível o estabelecimento de um formalismo matemático capaz de gerar adequadamente polinômios de ordens superiores de quaisquer ordens.

Propõe-se que o fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^m(v)$ possa agora ser aproximado por uma expansão teoricamente ilimitada, a partir de um conjunto de infinitos termos que formam a nova base funcional extendida, truncada apenas por requisitos práticos, distintamente da formulação tradicional do NEM (FINNEMANN *et al.*, 1977).

$$\bar{\psi}_{gu}^{m}(v) = \bar{\psi}_{gu}^{m(2)}(v) + \sum_{n=3}^{N} c_{ngu}^{m} \hat{h}_{n}(v)$$
(3.17)

Onde o termo $\bar{\psi}_{gu}^{m(2)}(v)$ refere-se a solução de baixa ordem (Equação 2.12); ou seja, a variante básica do NEM. Enquanto que o termo subsequente representa a expansão em polinômios de ordens superiores, a serem identificados.

Os resultados obtidos através do formalismo estabelecido, exemplificados através de expansões de até décima ordem, encontram-se disponibilizados na Tabela 1. A descrição detalhada dos cálculos para cada uma das ordens consta do Apêndice A.

Comparações entre os polinômios de ordens superiores apresentados no artigo de FINNEMANN *et al.* (1977), $h_n(v)$, e polinômios obtidos através do formalismo de generalização estabelecido, $\hat{h}_n(v)$, conduzem à conclusão de que os coeficientes c_n , pertencentes à definição dos $\hat{h}_n(v)$, devem todos possuir um mesmo valor: 6. Esse número está associado ao polinômio dominante da variante básica do método, repetindo-se nas componentes de ordens superiores como característica do método. Porém, mais que isso, deve ser entendido como o DNA associado à família de polinômios ortogonais utilizada... No presente caso, a família "Legendre"!

3.5. Análise das funções de base

Definidos os polinômios de ordens superiores, encontram-se listados na Tabela 2 os resultados das relações de ortogonalidade entre as funções de base. Nessa tabela encontram-se representados dois grupos polinomiais distintos a saber: variante básica $(0 \le n \le 2)$ e ordens superiores $(n \ge 3)$, onde é possível observar:

- Simetria em relação à diagonal principal;
- Condição de consistência, caracterizada na primeira linha;
- Ortogonalidade entre polinômios de baixa ordem;
- Ortogonalidade entre polinômios de ordens superiores;
- Não-ortogonalidade entre polinômios de ordens superiores ímpares e pares e os de primeira e segunda ordens do grupo de baixa ordem, respectivamente.

Embora o conjunto de funções de base não preserve relações de ortogonalidade entre todos os seus elementos, esse conjunto é linearmente independente. Essa propriedade pode ser verificada através do Wronskiano do conjunto de funções de base, dentro do domínio espacial do problema.

$$\mathcal{W}(\{\hat{h}_n(v)\}) \neq 0, \ v \in [0,1].$$
 (3.18)

Esse resultado assegura que o conjunto de funções de base é capaz de gerar soluções possíveis ao problema considerado.

Tabela 1 - Extensão das funções de base de ordens superiores.

n	$\frac{\hat{h}_n(v)}{c_n}$
3	v(1-v)(2v-1)
4	$v(1-v)(5v^2-5v+1)$
5	$v(1-v)(2v-1)(6v^2-6v+1)$
6	$v(1-v)\left(\frac{308}{9}v^4 - \frac{616}{9}v^3 + \frac{419}{9}v^2 - \frac{111}{9}v + 1\right)$
7	$v(1-v)(2v-1)\left(\frac{143}{3}v^4 - \frac{286}{3}v^3 + \frac{187}{3}v^2 - \frac{44}{3}v + 1\right)$
8	$v(1-v)\left(\frac{5265}{18}v^6 - \frac{15795}{18}v^5 + \frac{18421}{18}v^4 - \frac{10517}{18}v^3 + \frac{3028}{18}v^2 - \frac{402}{18}v + 1\right)$
9	$v(1-v)(2v-1)442v^6 - 1326v^5 + 1521v^4 - 832v^3 + 221v^2 - 26 + 1)$
10	$v(1-v)\left(\frac{28424}{10}v^8 - \frac{113696}{10}v^7 + \frac{188479}{10}v^6 - \frac{167501}{10}v^5 + \frac{86179}{10}v^4 - \frac{25835}{10}v^3 + \frac{4300}{10}v^2 - \frac{350}{10}v + 1\right)$
Tabela 2 – Ortogonalidade entre funções de base.

n k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{5}$	0	$\frac{1}{35}$	0	$\frac{1}{126}$	0	$\frac{1}{330}$	0
2	0	0	$\frac{1}{5}$	0	$-\frac{3}{35}$	0	$-\frac{3}{189}$	0	$-\frac{3}{594}$	0	$-\frac{3}{1430}$
3	0	$\frac{1}{5}$	0	6 35	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	$-\frac{3}{35}$	0	$\frac{6}{105}$	0	0	0	0	0	0
5	0	$\frac{1}{35}$	0	0	0	6 385	0	0	0	0	0
6	0	0	$-\frac{3}{189}$	0	0	0	6 819	0	0	0	0
7	0	$\frac{1}{126}$	0	0	0	0	0	$\frac{6}{1890}$	0	0	0
8	0	0	$-\frac{3}{594}$	0	0	0	0	0	6 3366	0	0
9	0	$\frac{1}{330}$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{6}{6270}$	0
10	0	0	$-\frac{3}{1430}$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{6}{10010}$

$$\int_{0}^{1} W_{\rm P} \hat{h}_k(v) \hat{h}_n(v) \, \mathrm{d}v$$

CAPÍTULO 4 Novas equações nodais

Efetivamente, a primeira etapa para a generalização do NEM pode ser definida como o estabelecimento de um formalismo para generalização do conjunto de funções de base. Tal formalismo encontra-se descrito e fundamentado ao longo do Capítulo 3. Como segunda etapa à generalização do método procede-se o desenvolvimento das equações nodais, com idênticas considerações e equações neutrônicas observadas no NEM (FINNEMANN *et al.*, 1977), conforme apresentadas no Capítulo 2.

4.1. Extensão das equações nodais

Tal como no artigo de FINNEMANN *et al.* (1977), efetivamente, o primeiro conjunto de equações a ser definido contempla equações para correntes de saída: \bar{J}_{gul}^{-m} e \bar{J}_{gur}^{+m} . Para isso, tal como no Capítulo 2, a expansão polinomial, agora generalizada, é utilizada como aproximação ao fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^{m}(v)$, introduzido nas equações de acoplamento (Equação 2.4) para definição das componentes de saída.

$$\bar{\psi}_{gu}^{m}(v) = \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^{m} \, \hat{h}_{n}(v), v = u/a_{u}^{m}, v \in [0,1] \,.$$
(4.1)

A introdução da aproximação para $\bar{\psi}^m_{gu}(v)$ nas equações de acoplamento

$$\bar{J}_{gus}^{m} = \bar{J}_{gus}^{+m} - \bar{J}_{gus}^{-m} = -D_{g}^{m} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) \Big|_{u=u_{s}^{m}},$$
(2.4)

permite estabelecer as novas equações para as correntes de saída, agora na forma generalizada.

$$\bar{J}_{gul}^{-m} = A_{0gu}^m \bar{\phi}_g^m + A_{1gu}^m \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{2gu}^m \bar{J}_{gur}^{-m} - A_{3gu}^m \sum_{i=2}^{I} c_{(2i-1)gu}^m + A_{4gu}^m \sum_{k=2}^{K} c_{(2k)gu}^m , \qquad (4.2.1)$$

e

$$\bar{J}_{gur}^{+m} = A_{0gu}^{m} \bar{\phi}_{g}^{m} + A_{2gu}^{m} \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{1gu}^{m} \bar{J}_{gur}^{-m} + A_{3gu}^{m} \sum_{i=2}^{I} c_{(2i-1)gu}^{m} + A_{4gu}^{m} \sum_{k=2}^{K} c_{(2k)gu}^{m} .$$
(4.2.2)

Esse conjunto de equações explicita as correntes de saída, para o nodo genérico m, em função de: fluxo nodal, correntes parciais de entrada e coeficientes de ajuste associados exclusivamente aos polinômios de ordens superiores, na forma de somatórios com segregação de paridades.

A decomposição das correntes líquidas, presentes na equação de balanço nodal (Equação 2.2), em componentes parciais, possibilita substituir as componentes de saída por suas representações recém obtidas (Equações 4.2.1 e 4.2. 2), estabelecendo a forma generalizada para a equação de balanço nodal. Essa forma generalizada passa agora a apresentar contribuições de fluxos, correntes e coeficientes de ajuste de ordens superiores exclusivamente pares.

$$\left(\Sigma_{tg}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m}\right) \bar{\phi}_{g}^{m} = \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{1}{k_{eff}} \chi_{g} \nu \Sigma_{fg'}^{m}\right) \bar{\phi}_{g'}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \left\{ \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m} [2(\bar{J}_{gul}^{+m} + \bar{J}_{gur}^{-m}) - \sum_{k=2}^{K} c_{(2k)gu}^{m}] \right\}.$$
(4.2.3)

Onde os índices I e K, utilizados nas três últimas equações apresentadas, possuem relação direta com N, que representa a ordem da expansão considerada.

$$K = \begin{cases} \frac{N}{2} \rightarrow I = K, \text{ para N par.} \\ \frac{N-1}{2} \rightarrow I = K+1, \text{ para N ímpar e maior que 3.} \end{cases}$$
(4.2.4)

Os coeficientes A_{ngu}^m apresentam idênticas definições àquelas presentes no NEM em sua forma convencional (Equações 2.17.1 a 2.17.5).

4.2. Termo de fuga e coeficientes de ordens superiores

Conforme informado previamente, o termo de fuga transversal $L_{gu}^m(u)$ não se constitui em objetivo do presente estudo. Logo, a aproximação quadrática, amplamente utilizada em aplicações do NEM e indicada por SMITH (2021) como ainda a melhor e mais precisa forma de aproximação, é mantida com as mesmas definições apresentadas no Capítulo 2.

A introdução de expansões polinomiais como aproximações aos termos de fluxo médio e fuga transversais ($\overline{\psi}_{gu}^m(v)$ e $L_{gu}^m(v)$, respectivamente) na equação da difusão de nêutrons transversalmente integrada, representa, aos olhos do Método de Galerkin (Capítulo 3, item 3.1), o termo residual ($\mathcal{R}es(v), v \in [0,1]$).

$$\left(-\frac{D_{gu}^{m}}{a_{u}^{m}}\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}v^{2}}+\Sigma_{tg}^{m}\right)\sum_{n=0}^{N}c_{ngu}^{m}\hat{h}_{n}(v)-$$

$$\sum_{g'=1}^{G}\left(\Sigma_{gg'}^{m}+\frac{\chi_{g}}{k_{eff}}v\Sigma_{fg'}^{m}\right)\sum_{n=0}^{N}c_{ng'u}^{m}\hat{h}_{n}(v)+\sum_{n=0}^{2}\alpha_{ngu}^{m}\hat{h}_{n}(v)=\mathcal{R}es(v)$$
(4.3)

Permanecendo na formulação de Galerkin tem-se que:

$$\int_{0}^{1} W(v) \mathcal{R}es(v) \, \mathrm{d}v = 0. \tag{4.4}$$

Com isso, a aplicação do Método de Galerkin (FINLAYSON, 2014) na equação da difusão de nêutrons transversalmente integrada utilizando a forma polinomial generalizada como aproximação ao fluxo médio transversal (Equação 4.3), permite observar dois termos característicos:

$$\int_{0}^{1} W(v) \,\bar{\psi}_{gu}^{m}(v) \,\mathrm{d}v = \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^{m} \int_{0}^{1} W_{\mathrm{P}} \hat{h}_{k}(v) \hat{h}_{n}(v) \,\mathrm{d}v, \qquad (4.5.1)$$

 $\int_{0}^{1} W(v) \frac{d^{2}}{dv^{2}} \bar{\psi}_{gu}^{m}(v) dv = \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^{m} \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{k}(v) \frac{d^{2} \hat{h}_{n}}{dv^{2}} dv.$ (4.5.2)

Onde W(v) representa a função-peso efetiva, a qual, no caso presente, incorpora informações de duas funções de ponderação: W_P, a função-peso associada à família de polinômios ortogonais de Legendre (Equação 3.9.1), e $\hat{h}_k(v)$, a função-peso associada ao Método de Galerkin, extraída diretamente do conjunto de funções de base.

$$W(v) = W_{\rm P}\hat{h}_k(v) \tag{4.6}$$

Os resultados para a Equação (4.5.1) encontram-se disponíveis na Tabela 2, enquanto que os resultados para a Equação (4.5.2) encontram-se na Tabela 3.

O conhecimento prévio das informações geométricas e materiais do problema, das condições de contorno associadas à equação transversalmente integrada, do conjunto de funções de base que aproxima a solução e da família de funções analíticas que fundamentam esse conjunto, onde as relações de ortogonalidade retornam apenas números, possibilita que, com o emprego dos Métodos dos Resíduos Ponderados, os coeficientes de ajuste de ordens superiores da expansão aproximadora tornem-se as incógnitas de um sistema de equações lineares de ordem $(N - 2)G \times (N - 2)G$. Como para o NEM não há cruzamento entre polinômios de ordens pares e ímpares, esse sistema se degenera em dois outros sistemas, cada um com a metade da ordem do sistema original. Daí o comentário no fim do item 2.3 (Termo de fuga e coeficientes de ordens superiores) do Capítulo 2, onde, considerando aproximação quártica (c_{3gu}^m e c_{4gu}^m) a dois grupos de energia, o sistema 4×4 de equações degenera-se em dois sistemas 2×2.

e

Os processos de ponderação da equação de difusão de nêutrons transversalmente integrada e definição dos coeficientes de ordens superiores (SILVA, 2020) encontramse detalhadamente apresentados no Apêndice B.

 \int_{c}^{1} $d^{2}\hat{b}$

Tabela 3 – Ortogonalidade entre funções de base e segundas derivadas.

n k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	0	0	-12	0	-12	0	-12	0	-12	0	-12
1	0	0	0	-12	0	-12	0	-12	0	-12	0
2	0	0	0	0	12	0	12	0	12	0	12
3	0	0	0	$-\frac{36}{5}$	0	$-\frac{36}{35}$	0	$-\frac{2}{7}$	0	$-\frac{6}{55}$	0
4	0	0	0	0	$-\frac{36}{7}$	0	$-\frac{20}{21}$	0	$-\frac{10}{33}$	0	$-\frac{18}{143}$
5	0	0	0	$-\frac{36}{35}$	0	$-\frac{108}{35}$	0	$-\frac{6}{7}$	0	$-\frac{18}{55}$	0
6	0	0	0	0	$-\frac{20}{21}$	0	$-\frac{148}{63}$	0	$-\frac{74}{99}$	0	$-\frac{222}{715}$
7	0	0	0	$-\frac{2}{7}$	0	$-\frac{6}{7}$	0	$-\frac{106}{63}$	0	$-\frac{106}{165}$	0
8	0	0	0	0	$-\frac{10}{33}$	0	$-\frac{74}{99}$	0	$-\frac{134}{99}$	0	$-\frac{402}{715}$
9	0	0	0	$-\frac{6}{55}$	0	$-\frac{18}{55}$	0	$-\frac{106}{165}$	0	$-\frac{58}{55}$	0
10	0	0	0	0	$-\frac{18}{143}$	0	$-\frac{222}{715}$	0	$-\frac{402}{715}$	0	$-\frac{126}{143}$

$$\int_{0}^{1} W_{\rm P} \hat{h}_k(v) \frac{\mathrm{d}^2 \hat{h}_n}{\mathrm{d} v^2} \,\mathrm{d} v$$

CAPÍTULO 5 Análises qualitativas

5.1. Considerações gerais

Em seu artigo "Interface current techniques for multidimensional reactor calculations", FINNEMANN et al. (1977) utilizaram expansões de até quinta ordem como aproximações ao fluxo médio transversal ($\bar{\psi}_{gu}^m(u)$) e de até segunda ordem para os termos de fugas transversais ($L_{gu}^m(u)$). Nesse artigo foram investigados dois "benchmarks" bidimensionais clássicos: IAEA e LRA. Os resultados encontrados indicaram como as melhores aproximações: segunda ordem para os termos de fugas transversais (B^2 , na notação utilizada) e de quarta ordem com ponderação do tipo momentos (M_2) e quinta ordem com ponderação tipo Galerkin (G_3) para o fluxo médio transversal. Apesar da aproximação G_3B^2 ter fornecido resultados mais precisos que M_2B^2 , lê-se no artigo:

"The results for both problems suggest that moments weighting is preferable to Galerkin weighting..."

Em consequência dessa suposta contradição, e de não haver comentário que a possa fundamentar, as aproximações dos tipos M_2B^2 e G_3B^2 , escritas na notação de FINNEMANN *et al.* (1977), definem o ponto de partida para as investigações computacionais no presente estudo.

Desenvolveu-se um programa em linguagem FORTRAN 90, baseado na infraestrutura computacional em difusão nodal (SILVA *et al.*, 2010) estabelecida no PEN/COPPE/UFRJ. Utilizou-se o compilador Microsoft Visual Studio 2008, em máquina Intel i3-2350M, CPU de 2,30 GHz, RAM de 8 GB e sistema operacional Windows®7 de 64 bits. Todos os cálculos de ponto flutuante foram realizados com dupla precisão. Em todas as simulações foram utilizadas tolerâncias de 10^{-7} e 10^{-5} como critérios de convergência para o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e fluxos nodais ($\bar{\phi}_g^m$), respectivamente, considerando simetria de um quarto de núcleo.

5.2. Informações sobre os "benchmarks"

Para verificar a eficácia das novas expansões de ordens superiores apresentadas, foram realizadas simulações computacionais de "*benchmarks*" bi e tridimensionais amplamente utilizados na literatura: IAEA, LRABWR e BIBLIS. Todas as simulações objetivaram testar a generalização do NEM exclusivamente para cálculos em "malhas grossas". Por esse motivo, as dimensões dos nodos foram assumidas iguais à largura do elemento combustível; ou seja, em configurações de um nodo por "*assembly*" (1×1). Nas simulações foram consideradas expansões polinomiais de até décima ordem.

Conceitual e resumidamente, um "*benchmark*" baseia-se em um conjunto de informações associadas ao núcleo de um reator real ou hipotético, com características de um problema de particular interesse, visando comparar eficiência e/ou eficácia de distintas ferramentas, técnicas ou métodos de solução. Supõe-se que, preferencialmente, os "*benchmarks*" destinam-se a comparações dentro de uma mesma classe de métodos de solução ou categoria de ferramentas. Porém, uma vez considerados adequados, não há impecilhos à possíveis investigações com outras classes ou categorias.

Os "*benchmarks*" considerados no presente estudo são comumente utilizados em publicações referentes a "métodos de malha grossa". Porém, é importante salientar que os casos IAEA e BIBLIS destinam-se originalmente a cálculos em "malhas finas".

Todos os valores utilizados como referências comparativas foram gerados a partir de cálculos em "malhas finas" com emprego do Método de Diferenças Finitas (ALVIM, 2007).

Em cada um dos "*benchmarks*" considerados é apresentado breve conjunto de informações, contendo indicações das referências utilizadas por fontes de dados do problema e de resultados para referências comparativas. As descrições geométrica e materiais de cada "*benchmark*" encontram-se disponíveis no Apêndice C.

5.2.1. IAEA-2D

De acordo com MÜLLER e WEISS (1991), o "*benchmark*" IAEA-2D caracteriza um problema altamente simplificado representativo de um LWR a dois grupos de energia. Consiste de um núcleo com duas zonas radiais de carregamento, contendo 177 elementos combustíveis homogeneizados com 20 cm de largura cada um deles, cercado por 20 cm de espessura de material refletor (água), com condição de contorno do tipo "vácuo". Severas perturbações são causadas pelas presenças de barras de controle e pelos gradientes de fluxo térmico na interface núcleo-refletor.

As informações geométricas e das seções de choque foram extraídas do "Benchmark Problem Book, Supp.2" (ARGONNE CODE CENTER, 1977), página 437 (ID.11-A2), e encontram-se no Apêndice C. O problema IAEA-2D deriva do problema IAEA-3D, representando a configuração radial à meia altura da dimensão axial. Trata-se de um problema característico para "malhas finas".

O conjunto das referências comparativas foi definido a partir dos resultados de PESSOA *et al.* (2016), com malha de 0,50 cm de largura.

5.2.2. LRABWR-2D

De acordo com CHRISTENSEN (1985), o "*benchmark*" LRABWR-2D é um modelo simplificado de um BWR a dois grupos de energia. Consiste de um núcleo com duas zonas radiais de carregamento, contendo 312 elementos combustíveis homogeneizados com 15 cm de largura cada um deles, circundado por 30 cm de espessura de material refletor (água), com condição de contorno do tipo "fluxo nulo". As barras de controle estão presentes em grande parte dos elementos combustíveis carregados. Acarretando severas perturbações no fluxo local, produzindo um problema de consideráveis dificuldades de solução.

As informações geométricas e seções de choque para esse problema foram extraídas do "*Benchmark Problem Book, Supp.2*" (ARGONNE CODE CENTER, 1977), página 548 (BBS-14), e da publicação de KIM (1983), presentes no Apêndice C.

Trata-se de um problema característico para "malhas grossas", com seções de choque convenientemente geradas para isso.

O conjunto das referências comparativas foi apresentado por KIM (1983), obtido a partir de resultados para "malhas finas" com largura de 0,75 cm.

5.2.3. BIBLIS-2D

De acordo com MÜLLER e WEISS (1991), o "benchmark" BIBLIS-2D é um problema representativo de um PWR real, a dois grupos de energia, com um carregamento de núcleo do tipo "tabuleiro de xadrez". O núcleo é formado por 193 elementos combustíveis homogeneizados e de sete composições distintas, cada um deles com largura igual a 23,1226 cm. O núcleo é circundado por um refletor homogeneizado, composto da mistura de materiais estrutural ("baffle") e refletor, de espessura idêntica à largura dos elementos combustíveis. Devido à sua natureza mais realista, esse caso é considerado um desafio aos métodos de malha grossa.

As informações geométricas e seções de choque foram extraídas do artigo de NAKATA e MARTIN (1983) e encontram-se no Apêndice C. Apesar dos claros indícios de que as seções de choque foram convenientemente geradas, trata-se de um problema originalmente proposto para cálculos em "malhas finas". O conjunto das referências comparativas foi disponibilizado por SHOBER (1978), sem menção à origem mas com a ressalva de possuírem restrições comerciais de confidencialidade.

5.2.4. IAEA-3D

O "Problema LWR Tridimensional", também conhecido como "Benchmark 3D IAEA", foi proposto originalmente por B. Micheelsen (RISØ) para o "Panel on Reactor Burn-up Physics", realizado em Viena, no período de 12 a 16 de julho de 1971. O problema IAEA-3D é uma montagem cilíndrica de 380 cm de altura, onde o plano radial à meia altura do núcleo constitui-se no "benchmark" IAEA-2D.

As informações geométricas e seções de choque foram extraídas do "*Benchmark Problem Book, Supp.2*" (ARGONNE CODE CENTER, 1977), página 277 (BSS-11), e encontram-se no Apêndice C. Trata-se de um problema proposto para "malhas finas".

O conjunto das referências comparativas foi definido a partir dos resultados gerados pelo programa VENTURE (VONDY *et al.*, 1975), com emprego da técnica de extrapolação para infinitos pontos.

5.2.5. LRABWR-3D

De acordo com KOTCHOUBEY (2015), o estudo cinético do LRA ("*Laboratorium für Reaktorregelung und Anlagensicherung*") foi estabelecido originalmente como um problema bidimensional, com simetria de um quarto de núcleo. SMITH (1979) estendeu o caso para três dimensões com ejeção de quatro barras de controle e, em outro cenário transitório adicional, com a ejeção de apenas uma.

As informações geométricas e seções de choque para esse problema foram extraídas do "*Benchmark Problem Book, Supp.2*" (ARGONNE CODE CENTER, 1977), página 548 (BBS-14), e da publicação de KIM (1983), presentes no Apêndice C.

Trata-se de um problema característico para "malhas grossas", com seções de choque convenientemente geradas para isso.

O conjunto das referências comparativas foi apresentado por KIM (1983), obtido a partir de resultados para "malhas finas" com largura de 0,75 cm.

5.3. Análises qualitativas

No presente estudo serão considerados como parâmetros de análise: o desvio relativo do fator de multiplicação efetivo (Δk_{eff}), os valores máximo e médio dos erros relativos absolutos nas distribuições de potência normalizadas (ΔP_{Max} e ΔP_{Med} , respectivamente). A análise de tais parâmetros possibilita identificar a ordem de expansão e o esquema de ponderação mais adequados ao caso em consideração. Antes de proceder às simulações, faz-se necessário definir cada um dos mencionados parâmetros.

Erro relativo do fator de multiplicação efetivo (Δk_{eff}):

$$\Delta k_{eff} \equiv \frac{k_{eff} - k_{eff}^{ref}}{k_{eff}^{ref}}$$
(5.1)

Onde os valores para Δk_{eff} são fornecidos em *pcm*, que significa "por centena de milhar" (1 *pcm* = 10⁻⁵).

<u>Máximo erro relativo absoluto na distribuição de potência normalizada</u> (ΔP_{Max}):

$$\Delta P_m = \frac{P_m - P_m^{ref}}{P_m^{ref}} \to \Delta P_{Max} \equiv \max_m \{|\Delta P_m|\}.$$
(5.2)

<u>Média dos erros relativos absolutos para a distribuição de potência normalizada</u> (ΔP_{Med}) :

$$\Delta P_{Med} \equiv \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} |\Delta P_m|.$$
(5.3)

Onde o subscrito m refere-se à identificação sequencial dos elementos combustíveis e M é o número total de elementos de combustíveis presentes na configuração do núcleo.

<u>Fator de desvio</u> (ε_{β}):

Fator de desvio é a ordenada da função de forma da distribuição do parâmetro de análise β sob verificação, associada à ordem da aproximação para uma dada funçãopeso. Como o fator de desvio é um índice absoluto ($\varepsilon_{\beta} \in [0,1]$), quanto menor seu valor mais preciso o resultado em consideração.

$$B = \{\beta_1, \beta_2, \beta_{\kappa} \cdots\} \rightarrow \varepsilon_{\beta} = \left\{\frac{|\beta_1|}{\beta_{Max}}, \frac{|\beta_2|}{\beta_{Max}}, \frac{|\beta_{\kappa}|}{\beta_{Max}} \cdots\right\}, \beta_{Max} = \max_{\kappa}\{|\beta_{\kappa}|\}.$$
(5.4)

Nas Figuras de 4 a 13 são apresentadas as distribuições de fator de desvio para os parâmetros de análise (Δk_{eff} , ΔP_{Max} e ΔP_{Med}), considerando expansões de até décima ordem para os tipos de ponderações consideradas. No presente estudo, o parâmetro ΔP_{Med} é o indicador da qualidade dos resultados obtidos.



Figura 4: Problema IAEA-2D – Peso momentos.



Figura 5: Problema IAEA-2D – Peso Galerkin.



Figura 6: Problema LRABWR-2D – Peso momentos.



Figura 7: Problema LRABWR-2D – Peso Galerkin.



Figura 8: Problema BIBLIS-2D – Peso momentos.



Figura 9: Problema BIBLIS-2D – Peso Galerkin.



Figura 10: Problema IAEA-3D – Peso momentos.



Figura 11: Problema IAEA-3D – Peso Galerkin.



Figura 12: Problema LRABWR-3D – Peso momentos.



Figura 13: Problema LRABWR-3D – Peso Galerkin.

Como no presente estudo utiliza-se unicamente a forma quadrática como aproximação ao termo de fuga transversal, $L_{gu}^m(v)$, doravante essa informação seguirá implícita. Com isso, apenas a ordem da expansão e a função-peso utilizadas na verificação da aproximação ao fluxo médio transversal, $\bar{\psi}_{gu}^m(v)$, serão mencionadas. A notação adotada compõe-se de dois campos alfanuméricos apenas: uma letra maiúscula, explicitando a função-peso utilizada (M ou G), seguida de um número, que representa a ordem da expansão (N). Logo, considerando a notação em FINNEMANN *et al.* (1977), M_2B^2 torna-se M4.

Considerado ΔP_{Med} o parâmetro de análise mais representativo da qualidade dos resultados, apresenta-se na Tabela 4 as aproximações consideradas as mais precisas para cada conjunto de simulações.

"Ranchmarks"	Funções-peso				
Denchmarks	Momentos	Galerkin			
IAEA-2D	M5	G5			
LRABWR-2D	M6	G8			
BIBLIS-2D	M5	G6			
IAEA-3D	M4	G5			
LRABWR-3D	M6	G8			

Tabela 4 – Aproximações mais representativas para $\bar{\psi}^m_{gu}(v)$, por função-peso.

CAPÍTULO 6 Análises quantitativas

6.1. Comparações numéricas

A fim de verificar possíveis vantagens na utilização das novas expansões de ordens superiores, são confrontados resultados dos parâmetros de análise (Δk_{eff} , ΔP_{Max} e ΔP_{Med}) para essas aproximações (Tabela 4) àqueles gerados pela aproximação M4, tradicionalmente utilizada por usuários do NEM. Conforme justificado no Capítulo 5, ΔP_{Med} é o parâmetro de análise escolhido para indicar a aproximação mais conveniente.

É comum em Física de Reatores comparações dos tempos de execução (Δt_{Exe}) necessários ao cômputo dos casos. Essa informação é também disponibilizada junto ao conjunto de parâmetros de análise dos casos simulados.

Nos mapeamentos das distribuições de desvio relativo de potência nodal normalizada encontra-se o índice abreviado "Ref.", na definição da ordenação sequencial dos resultados para cada nodo. O referido índice alude o valor de potência normalizada utilizado como referência comparativa, destacado no topo de cada conjunto sequencial, enquanto que os resultados sequentes são os valores dos desvios relativos associados às aproximações empregadas.

Conforme especificado no Capítulo 5, em todas as simulações foram utilizadas tolerâncias de 10^{-7} e 10^{-5} como critérios de convergência para k_{eff} e fluxos médios nodais ($\bar{\phi}_q^m$), respectivamente.

Todos os cálculos foram realizados usando simetria de um quarto de núcleo. No entanto, por questões de facilidade de representação, os resultados numérios são apresentados usando simetria de um oitavo núcleo.

Entenda-se que a menção NEM refere-se explícitamente ao método introduzido por FINNEMANN *et al.* (1977), na forma aqui apresentada. Outrossim, que os resultados para todas e quaisquer ordens de aproximação apresentadas foram calculados com base na estrutura computacional desenvolvida no PEN/COPPE/UFRJ, a qual possui características estruturais próprias e independentes que a diferem de tantos outros programas baseados no mesmo método.

Das Figuras 4 e 5, conforme apresentado na Tabela 4, observa-se que as aproximações dos tipos M5 e G5 parecem ser as escolhas mais adequadas ao problema. Conforme os resultados apresentados na Figura 14, conclui-se que a aproximação G5 foi a mais precisa.

Em comparação à aproximação M4, G5 produziu resultados mais precisos em 68% da distribuição de potência normalizada e idênticos resultados em 5% dos nodos. Sendo mais precisa que M4 em 40% dos nodos periféricos (fronteira núcleo-refletor). O máximo desvio nessa distribuição (ΔP_{Max}), ocorreu na interface combustível-refletor, não ultrapassando a 1,17%. Houve melhora nos resultados para o fator de multiplicação efetivo, com redução do Δk_{eff} de 7,6 pcm (M4) para 3,0 pcm (G5). As variações nos tempos de execução foram desprezíveis.

		k_{eff} = 1.029575							
	Δt_{Exe} (S)	$ \begin{array}{c c} \Delta k_{eff} & \Delta P_{Med} & \Delta P_{M} \\ (pcm) & (\%) & (\%) \end{array} $							
M4	0.28	-7.6	0.43	1.22					
M5	0.30	4.0	0.38	1.58					
G5	0.29	3.0	0.29	1.17					

= 1.02	9575			Ref.	0.5838		
۸D	۸D			M4	0.24		
ΔP_{Med}	ΔP_{Max}			M5	-1.54		
(%)	(%)			G5	0.31		
0 43	1 22			0.4703	0.6853	0.5959	
0.38	1 58			0.26	0.92	0.12	
0.30	1 17			-0.13	-0.48	-1.58	
0.29	1.1			0.38	-0.28	0.34	
			1.1935	0.9675	0.9063	0.8451	
			-0.45	-0.08	0.23	0.50	
			0.08	0.17	-0.43	-0.86	
			-0.34	-0.18	-0.28	0.26	
		1.4704	1.3459	1.1797	1.0705	0.9746	0.6906
		-0.46	-0.48	-0.31	0.07	0.87	0.49
		0.37	0.19	0.16	0	0.05	1.09
		-0.23	-0.30	0.12	0.07	0.49	0.77
	1.4362	1.4809	1.3158	1.0704	1.0363	0.9500	0.7347
	-0.58	-0.54	-0.52	-0.16	0.01	0.54	1.22
	0.44	0.39	0.27	0.37	0.09	-0.14	-0.29
	-0.29	-0.28	-0.31	-0.07	0.04	0.19	0.84
0.7457	1.3110	1.4548	1.2118	0.6099	0.9354	0.9341	0.7539
-0.71	-0.40	-0.53	-0.34	-0.23	0.09	0.49	1.02
0.08	0.69	0.53	0.54	0.05	0.18	-0.06	0.03
-0.48	-0.14	-0.16	-0.22	0	-0.03	0.21	1.17

Figura 14: Erros percentuais para o "benchmark" IAEA-2D.

6.1.2. LRABWR-2D

Das Figuras 6 e 7 observa-se que à partir de M6 e G8 encontram-se as aproximações mais adequadas ao problema.

Na Figura 15 observam-se resultados praticamente idênticos para M6 e G8. Em relação a M4, as aproximações M6 e G8 forneceram resultados mais precisos em 96% da distribuição de potência normalizada e em 100% dos nodos periféricos. O máximo desvio na distribuição de potência normalizada (ΔP_{Max}) ocorreu na região periférica do núcleo, caindo de 2,13% (M4) para 0,33%. Houve melhora significativa nos resultados para o fator de multiplicação efetivo, com redução do Δk_{eff} de 17,1 pcm (M4) para 2,0 pcm (M6 ou G8). Não ocorreram variações significativas nos tempos de execução.

		k _{ef}	f = 0.996	540			Ref.	1.3332	
		• • •	,				M4	1.88	
	Δt_{Exe}	Δk_{eff}	ΔP_{Med}	ΔP_{Max}			M6	0.28	
	<i>(s)</i>	(pcm)	(%)	(%)			G8	0.28	
M4	0 73	_17 1	0 69	2 1 2			2.1592	1.6225	0.8504
M6	0.75	-1/.1	0.00	2.13			0.04	0.99	2.13
C Q	0.00	-2.0	0.09	0.33			-0.13	0.04	0.33
00	0.90	2.0	0.09	0.55			-0.13	0.03	0.33
						1.8483	2.0480	1.6790	0.9735
						-0.44	-0.22	0.46	1.45
						-0.17	-0.16	-0.12	0.11
						-0.17	-0.16	-0.13	0.11
					0.8635	1.1519	1.3398	1.4204	0.9341
					-0.32	0.08	0.29	0.24	1.08
					-0.08	0.01	0.05	-0.06	0.19
					-0.08	0.01	0.05	-0.06	0.19
				0.5519	0.6776	0.8428	1.0223	1.2203	0.8545
				-0.71	-0.49	-0.14	0.13	0.20	0.97
				-0.13	-0.07	-0.02	0.07	0.02	0.21
				-0.13	-0.07	-0.02	0.06	0.02	0.21
			0.4237	0.4916	0.6176	0.7822	0.9668	1.1721	0.8284
			-0.99	-0.85	-0.68	-0.36	-0.06	0.06	0.85
			-0.09	-0.12	-0.08	-0.03	0.07	0.05	0.24
			-0.09	-0.12	-0.08	-0.03	0.07	0.05	0.24
		0.3992	0.4064	0.4900	0.6698	0.9398	1.1514	1.2802	0.8689
		-1.33	-1.11	-0.94	-0.82	-0.48	-0.21	-0.16	0.68
		-0.05	-0.05	-0.04	-0.07	-0.01	0.07	0.01	0.23
		-0.05	-0.05	-0.04	-0.07	-0.01	0.07	0.01	0.23
	0.6108	0.4403	0.4128	0.5116	0.7902	1.3824	1.6583	1.4808	0.9260
	-2.11	-1.27	-1.11	-0.82	-0.65	-1.22	-1.00	-0.24	0.68
	-0.25	-0.02	-0.05	0	0.05	-0.18	-0.17	-0.09	0.24
	-0.25	-0.02	-0.05	0	0.05	-0.18	-0.17	-0.09	0.24

Figura 15: Erros percentuais para o "benchmark" LRABWR-2D.

6.1.3. BIBLIS-2D

Das Figuras 8 e 9, conforme apresentado na Tabela 4, observa-se que as aproximações M5 e G6 parecem ser as escolhas mais adequadas ao problema.

A inspeção dos resultados na Figura 16 permite concluir que a aproximação M5 mostrou-se mais interessante que G6. Em relação a M4, a aproximação M5 produziu resultados mais precisos em 65% da distribuição de potência normalizada e idênticos resultados em 4% dos nodos, sendo ainda mais precisa em 100% dos nodos periféricos. O máximo desvio na distribuição normalizada (ΔP_{Max}) ocorreu na região periférica do núcleo, com uma redução de 2,05% (M4) para 0,88%. Houve sensível piora nos resultados para o fator de multiplicação efetivo, com aumento do Δk_{eff} de 7,8 pcm (M4) para 15,6 pcm (G5). As variações nos tempos de execução não foram significativas.

		k _{efj}	$k_{eff} = 1.02512$							
	Δt_{Exe} (s)	$ \begin{array}{c} \sum_{kee} \Delta k_{eff} & \Delta P_{Med} \\ (pcm) & (\%) & (\%) \end{array} $								
M4	0.33	7.8	0.42	2.05						
M5	0.35	15.6	0.23	0.88						
G6	0.35	17.7	0.28	0.88						

= 1.02	2512			Ref.	1.202	0.6863	
ΛΡ.,	ΛΡ.,			M4	0.39	2.05	
— меа (%)	(%)			M5 G6	-0.34	0.88	
				1,124	0.9942	0.8765	
0.42	2.05			0.27	-0.05	1.16	
0.23	0.88			0.23	-0.37	0.27	
0.28	0.88			0.28	-0.36	0.34	
	•		1.161	1.039	0.9509	0.7653	0.5459
			-0.03	-0.06	-0.04	-0.05	1.25
			0.22	0.03	-0.06	-0.46	0.27
			0.34	-0.02	0	-0.51	0.26
		1.122	1.104	1.120	0.9232	0.9308	0.8240
		-0.43	-0.26	-0.10	-0.16	-0.34	0.30
		0.09	0.11	0.12	-0.10	-0.46	-0.27
		0.23	0.07	0.23	-0.19	-0.47	-0.40
	1.117	1.133	1.223	1.067	1.032	1.071	0.9694
	-0.48	-0.39	-0.22	-0.27	-0.32	-0.44	0.51
	0.15	0.16	0.22	0.01	-0.15	-0.48	0.02
	0.28	0.12	0.34	-0.05	-0.14	-0.57	-0.14
1.090	1.101	1.242	1.220	1.088	0.9812	1.094	1.013
-0.58	-0.50	-0.25	-0.39	-0.40	-0.43	-0.30	0.46
0.13	0.09	0.29	0.09	-0.01	-0.15	-0.48	0.02
0.23	0.10	0.42	0.07	0.06	-0.40	-0.42	-0.17

Figura 16: Erros percentuais para o "benchmark" BIBLIS-2D.

Das Figuras 10 e 11, conforme apresentado na Tabela 4, a aproximação G5 foi aquela que apresentou mais adequada ao problema, segundo o critério do parâmetro de análise escolhido (ΔP_{Med}).

Com base nos resultados apresentados na Figura 17, em comparação à aproximação M4, a aproximação G5 produziu resultados mais precisos em 62% da distribuição de potência normalizada e idênticos resultados em 11% dos nodos. Sendo ainda mais precisa que M4 em 40% dos nodos periféricos e com igual precisão para 10% desses. O máximo desvio nessa distribuição de potência normalizada (ΔP_{Max}) ocorreu na interface combustível-refletor, não ultrapassando a 1,03%. Houve melhora significativa no resultado para o fator de multiplicação efetivo, com redução do Δk_{eff} de -4.9 pcm (M4) para o zero (G5). A variação no tempo de execução foi de aproximadamente 0,5 s, representando um aumento de cerca de 20% em relação a M4.

		k _{efj}	f = 1.02	903						
	Δt_{Exe} (S)	Δk_{eff} (pcm)	ΔP _{Med} (%)	ΔP _{Max} (%)			Ref. M4 G5	0.597 0 0		
M4 G5	2.57 3.13	-4.9 0	0.32 0.20	1.06 1.03			0.476 0.21 0.42	0.700 0.86 -0.29	0.611 0 0.16	
						1.178 -0.34 -0.17	0.972 0 -0.10	0.923 0.22 -0.33	0.866 0.35 0.12	
					1.368 -0.29 0	1.311 -0.31 -0.15	1.181 -0.17 0	1.089 0.09 0.09	1.000 0.80 0	0.711 0.42 0.70
				1.397 -0.36 0	1.432 -0.28 0	1.291 -0.31 -0.08	1.072 0 0.09	1.055 0.09 0.09	0.976 0.51 0.20	0.757 1.06 0.66
			0.729 -0.55 -0.27	1.281 -0.16 0.08	1.422 -0.35 0.07	1.193 -0.17 -0.08	0.610 -0.16 0	0.953 0.10 0	0.959 0.42 0.10	0.777 0.90 1.03

Figura 17: Erros percentuais para o "benchmark" IAEA-3D.

6.1.5. LRABWR-3D

Das Figuras 12 e 13, conforme apresentado na Tabela 4, observa-se que à partir de M6 e G8 encontram-se as escolhas mais adequadas ao problema.

Na Figura 18 observam-se resultados praticamente idênticos para M6 e G8. Em relação a M4, as aproximações M6 e G8 forneceram resultados mais precisos em 99% da distribuição de potência normalizada e em 100% dos nodos periféricos. O ΔP_{Max} ocorreu na região periférica do núcleo, caindo de 2,15% (M4) para 0,39%. Houve melhora significativa na qualidade dos resultados para o fator de multiplicação efetivo, com redução do Δk_{eff} de -16,1 pcm para zero. Houve um aumento no tempo de execução em cerca de 30% (1,78 s) para M6 e em cerca de 90% (5,39 s) para G8.

		k _{ef}	f = 0.996	540			Ref.	1.3332	
1		e))				M4	1.91	
	Δt_{Exe}	Δk_{eff}	ΔP_{Med}	ΔP_{Max}			M6	0.29	
	<i>(s)</i>	(pcm)	(%)	(%)			G8	0.29	
M4	C 10	16 1	0 60	0 1 5			2.1592	1.6225	0.8504
M6	7 94	-10.1	0.09	2.13			0.06	1.00	2.15
	11 57	0	0.11	0.39			-0.09	0.04	0.39
00	11.37	0	0.11	0.39			-0.09	0.04	0.39
						1.8483	2.0480	1.6790	0.9735
						-0.41	-0.20	0.46	1.46
						-0.14	-0.12	-0.11	0.17
						-0.13	-0.12	-0.12	0.16
					0.8635	1.1519	1.3398	1.4204	0.9341
					-0.35	0.06	0.28	0.24	1.09
					-0.09	0	0.04	-0.07	0.25
					-0.09	0	0.04	-0.07	0.25
				0.5519	0.6776	0.8428	1.0223	1.2203	0.8545
				-0.72	-0.52	-0.17	0.11	0.19	0.98
				-0.16	-0.10	-0.06	0.04	0.01	0.26
				-0.16	-0.10	-0.06	0.04	0	0.26
			0.4237	0.4916	0.6176	0.7822	0.9668	1.1721	0.8284
			-1.04	-0.90	-0.70	-0.38	-0.09	0.05	0.85
			-0.14	-0.16	-0.11	-0.06	0.04	0.03	0.28
			-0.14	-0.16	-0.11	-0.06	0.04	0.03	0.28
		0.3992	0.4064	0.4900	0.6698	0.9398	1.1514	1.2802	0.8689
		-1.35	-1.16	-0.96	-0.85	-0.49	-0.22	-0.16	0.68
		-0.13	-0.10	-0.10	-0.10	-0.03	0.05	-0.02	0.28
		-0.13	-0.10	-0.10	-0.10	-0.03	0.05	-0.02	0.28
	0.6108	0.4403	0.4128	0.5116	0.7902	1.3824	1.6583	1.4808	0.9260
	-2.10	-1.29	-1.16	-0.86	-0.66	-1.19	-0.97	-0.23	0.69
	-0.26	-0.07	-0.10	-0.04	0.01	-0.17	-0.15	-0.10	0.28
	-0.26	-0.07	-0.10	-0.04	0.03	-0.16	-0.15	-0.11	0.28

Figura 18: Erros percentuais para o "benchmark" LRABWR-3D.

6.2. Resumo dos resultados apresentados

São apresentadas tabela e figuras que contém compilações dos resultados encontrados em "Comparações Numéricas" (6.1.), como formas compactas que facilitam avaliação de uma possível maior eficácia das expansões de ordens superiores (EOS) sobre a aproximação tradicional empregada M4.

A Tabela 5 contém os valores dos parâmetros de análise: Δk_{eff} , $\Delta P_{Max} \in \Delta P_{Med}$, e do tempo de execução (Δt_{Exe}), extraídos dos conjuntos de resultados apresentados.

		М	[4		Expansões de Ordens Superiores (EOS)				
"Benchmark"	Δk_{eff} (pcm)	ΔP _{Med} (%)	ΔP _{Max} (%)	Δt_{Exe} (S)	EOS	Δk_{eff} (pcm)	ΔP _{Med} (%)	ΔP _{Max} (%)	Δt_{Exe} (s)
IAEA-2D	7,6	0,43	1,22	0,28	G5	3,0	0,29	1,17	0,29
LRABWR-2D	17,1	0,68	2,13	0,73	M6 / G8	2,0	0,09	0,33	0,80 / 0,90
BIBLIS-2D	7,8	0,42	2,05	0,33	M5	15,6	0,23	0,88	0,35
IAEA-3D	4,9	0,32	1,06	2,57	G5	0	0,20	1,03	3,13
LRABWR-3D	16,1	0,69	2,15	6,18	M6 / G8	0	0,11	0,39	7,94 / 11,57

Tabela 5 – Resumo dos resultados apresentados.

As Figuras 19 a 23 representam o mapeamento dos desvios relativos das distribuições nodais de potência normalizada (ΔP_m) e as localizações dos máximos desvios relativos absolutos (ΔP_{Max}), favoráveis ou ao emprego de expansões de ordens superiores (EOS) ou à manutenção da forma tradicionalmente empregada (M4), para cada um dos "*benchmarks*" simulados.

Nas Figuras 19 a 23 são utilizadas as seguintes representações:

- Resultado favorável a M4.
- Resultado favorável às EOS.
- Idêntico resultado para M4 e EOS.



Figura 19: Mapeamento IAEA-2D.



← Localização de ΔP_{Max} para EOS.



Figura 20: Mapeamento IAEA-3D.



Figura 21: Mapeamento BIBLIS-2D.



Figura 22: Mapeamento LRABWR-2D.



Figura 23: Mapeamento LRABWR-3D.

CAPÍTULO 7 Conclusões, comentários e sugestões

O presente estudo estabeleceu um formalismo capaz de generalizar as expansões polinimomias, em conformidade ao proposto por FINNEMANN *et al.* (1977) no estabelecimento do Método de Expansão Nodal (NEM). Esse formalismo permite uma compreensão do método em todas as suas etapas e a extensão do conjunto de funções de base a quaisquer ordens, o que possibilita o aumento na precisão dos resultados para cálculos e análises de núcleos de reatores nucleares, além da abertura de novas perspectivas ao NEM. Para tanto, foram escritos os procedimentos necessários à formação dos novos polinômios, elementos de uma base funcional agora de dimensão infinita. É agora possível investigar a utilização de outras famílias ortogonais, na pesquisa por uma melhor aproximação ao fluxo médio transvesal. Além disso, como a existência do NEM está intimamente atrelada ao Método dos Resíduos Ponderados, quanto mais apropriadamente escolhida for a função-peso tão mais próximo da solução esperada estará a solução aproximada. Portanto, tornam-se também oportunas a pesquisa e verificações de outros métodos de ponderação, bem como de funções-peso.

Em algumas publicações (LAWRENCE, 1983, 1986; KANG, 1996; PALMTAG, 1997; NES, 2002) é encontrada a afirmação de que comparações numéricas usando o NEM mostraram que a ponderação tipo momentos (expansão de quarta ordem, M4) é mais precisa do que a ponderação tipo Galerkin (expansão de quinta ordem, G5). Curiosamente, todas essas publicações remetem-se única e exclusivamente à alusão de uma expectativa presente no artigo "*Interface current techniques for multidimensional reactor calculations*", de FINNEMANN *et al.* (1977), onde não são apresentadas evidências ou argumentos que fundamentem tal suposição.

Assumindo a premissa de que o objetivo maior dos métodos de malha grossa seja o resultado mais preciso, se possível obtido de forma a mais eficiente, para a distribuição de potência no núcleo considerando malhas da dimensão dos elementos combustíveis, observa-se nesse mesmo artigo, tanto para aproximação quadrática quanto linear ao termo de fuga transversal, que tal qualidade foi alcançada quando utilizados expansão de quinta ordem e ponderação tipo Galerkin. O que representa um hiato à suposição de FINNEMANN *et al.* (1977), e um contraditório às afirmações de LAWRENCE (1983, 1986), KANG (1996), PALMTAG (1997) e NES (2002). Além disso, como conclusão da análise das simulações realizadas na presente tese, ambas as formas de ponderação sugerem ser igualmente eficazes, fornecendo resultados compatíveis. No entanto, parece que ponderações do tipo Galerkin possam ser consideradas mais promissoras e eficazes do que tipo Momentos.

Conforme abordado no Capítulo 5, é de fundamental importância que as seções de choque sejam geradas de forma conveniente ao tipo de método empregado. Sem isso, o método, por conseguinte a ferramenta de cálculo, certamente terá sua eficácia comprometida.

As vantagens obtidas pela utilização de expansões de ordens superiores nas simulações dos "*benchmarks*" LRABWR 2D e 3D tornam-se evidentes através das Figuras 22 e 23, respectivamente. Da página 548 (BBS-14) da referência "*Benchmark Problem Book, Supp.2*" (ARGONNE CODE CENTER, 1977) extrai-se:

Suggested Function: Test 2d, 3d Neutron Kinetics Solution, Especially for Coarse Mesh Methods.

É possível observar nas Figuras 6, 7, 12 e 13 um comportamento assintótico, convergente para resultados os mais precisos de fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e distribuição de potência nodal, com o aumento das ordens das expansões. Como era de se esperar, os resultados de distribuição de potência são mais sensíveis aos efeitos residuais causados pela aproximação dos termos de fugas transversais por uma forma limitadamente quadrática.

Por outro lado, em decorrência dos casos IAEA (2D e 3D) e BIBLIS terem seus conjuntos de seções de choques gerados para métodos de "malhas finas", ocorreram alternâncias entre expansões de ordens superiores (EOS) e a forma tradicional (M4) na geração dos resultados os mais precisos. Contudo, de uma forma geral as EOS se mostraram melhores opções que M4. Ressalte-se que os *"benchmarks"* IAEA caracterizam um problema altamente simplificado de um LWR, enquanto que o caso BIBLIS possui natureza mais realista de um PWR e seções de choque "melhor" geradas. Por isso, observa-se na Figura 21 que em todos os nodos periféricos os resultados na

distribuição de potência nodal foram mais precisos quando calculados usando alguma expansão de ordens superiores. Na Figura 16 constata-se uma redução significativa do máximo desvio relativo absoluto na distribuição de potência nodal normalizada (ΔP_{Max}) de 2,05%, com aproximação M4, para 0,88%, com aproximações M5 ou G6.

Para os "benchmarks" simulados, as expansões de ordens superiores apresentadas produziram melhores resultados em 84% dos nodos nas distribuições de potência normalizada, em 80% dos nodos situados na fronteira núcleo-refletor e melhores resultados para k_{eff} em 80% dos casos.

Como se sabe, em sua formulação convencional (M4), o NEM não funciona adequadamente em regiões de grande gradiente do fluxo térmico, como acontece no caso de nodos vizinhos ao Refletor. Contudo, para os problemas simulados, conforme apresentado nas Figuras 21,22 e 23, a introdução das novas funções de base de ordens superiores permitiu resultados mais precisos em todos os nodos situados na interface combustível-refletor. Embora supostamente promissora, a extensão do conjunto de funções de base deve ser mais profundamente investigada e testada para que possíveis melhorias introduzidas possam ser devidamente avaliadas.

Um possível benefício prático talvez possa surgir da "estratificação das aproximações"; ou seja, algum recurso computacional que possibilite empregar diferentes ordens de expansão e/ou formas de ponderação no núcleo: uma distribuição de aproximações, em lugar de uma mesma aproximação (ordem de expansão e função-peso) para todos os nodos. Essa investigação pode conduzir a critérios de otimização na forma de escolha da ordem de expansão e da função-peso empregadas, a partir de parâmetros geométricos e/ou materiais locais.

Embora as novas funções de base introduzidas tenham produzido resultados mais precisos do que a aproximação M4 tradicional, os polinômios de ordens superiores seguramente não tornam os fatores de descontinuidade desnecessários. Uma possível investigação futura poderá estar focada na análise do comportamento do fluxo transversalmente integrado em interfaces nodais ou no impacto sobre os fatores de descontinuidade quando as novas funções de base de ordens superiores são empregadas. Segundo a Teoria da Equivalência (KOEBKE *et al.*, 1985; SMITH, 1986), os fatores de descontinuidade devem ser derivados a partir da mesma metodologia utilizada nos

cálculos globais do núcleo. Em outras palavras, os processos para a determinação do fator de descontinuidade devem estar totalmente alinhados com a aproximação utilizada; ou seja, devem ser utilizadas mesmas ordem de expansão e função-peso empregadas para solução das equações nodais.

Considerando as informações apresentadas, pode parecer razoável afirmar que a introdução dos novos polinômios de ordens superiores ao conjunto de funções de base do NEM aumenta sua eficácia e possibilita uma "injeção de sangue novo" ao método. Porém, deve-se ter em consideração que esta tese é apenas um início de possíveis investigações sobre a real viabilidade desse novo conjunto de funções ao método, ou mesmo de novas aproximações. Porém, muitas tantas outras avaliações são necessárias antes de uma conclusão em definitivo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAMOWITZ, M., STEGUN, I.A., 1970, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. 9 ed. National Bureau of Standards, US Department of Commerce.
- ALVIM, A.C.M., 2007, *Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear*. 1^ª edição. Editora Certa.
- ALVIM, A.C.M., SILVA, F.C., MARTINEZ, A.S., 2012, "Improved Neutron Leakage Treatment on Nodal Expansion Method for PWR Reactors". *International Journal of Engineering and Physical Sciences*, v. 6, pp. 282-285.
- ARGONNE CODE CENTER, 1977, Benchmark Problem Book Supplement 2. In: ANL-7416 Mathematics and Computers (UC-32), Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois.
- CHRISTENSEN, B., 1985, *Three-Dimensional Static and Dynamic Reactor Calculations by the Nodal Expansion Method.* Ph.D. thesis, Risø National Laboratory, DK-4000 Roskilde, Denmark.
- FINLAYSON, B.A., SCRIVEN, L.E., 1966, "The Method of Weighted Residuals A Review", Applied Mechanics Reviews, v. 19, n. 9 (Set), pp. 735-748.
- FINLAYSON, B.A., 2014, The Method of Weighted Residuals and Variational Principles. SIAM Ed. Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- FINNEMANN, H., 1975, "A Consistent Nodal Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large LWR's". In: Joint NEACRP/CSNI Specialists' Meeting on New Developments in Three-Dimensional Neutron Kinetics and Review of Kinetics Benchmark Calculations, pp. 133-172, Garching (Munich), Jan.

- FINNEMANN, H., WAGNER, M.R., 1975, "The Nodal Expansion Method: A New Computational Technique for the Solution of Multidimensional Neutron Diffusion Problems". In: International Meeting of Specialists on "Methods of Neutron Transport Theory in Reactor Calculations" (Paper preprint form), Bologna, Italy, Nov.
- FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F., WAGNER, M.R., 1977, "Interface current techniques for multidimensional reactor calculations", *Atomkernenergie* (ATKE), v. 30, n. 2, pp. 123-128.
- GOSPODARCZYK, M.M., Nuclear Power Proves its Vital Role as an Adaptable, Reliable Supplier of Electricity during COVID-19. 2021. Disponível em: <u>https://www.iaea.org/newscenter/news/nuclear-power-proves-its-vital-role-as-an-adaptable-reliable-supplier-of-electricity-during-covid-19</u>. Acesso em: 06 dez. 2021.
- HETZELT, L., WINTER, H.J., 1999, "Generalization of the Equivalent Reflector Model for the Siemens Standard Core Design Procedure". In: Proc. Conf. Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, Sep.
- IAEA INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Nuclear Power Reactors in the World – 2021 Edition. 2021. Disponível em: <u>https://www.iaea.org/publications/14989/nuclear-power-reactors-in-the-world</u>. Acesso em: 06 dez. 2021.
- KANG, C.H., 1996, Discontinuous Space-Time Dependent Nodal Synthesis Method for Reactor Analysis. D.Sc. thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.
- KIM, C.H., 1983, "A Modified Borresen's Coarse-Mesh Solution to the LRA-BWR Benchmark Problem", *Journal of the Korean Nuclear Society*, v. 15, n. 2, pp. 135-141.
- KOEBKE, K., HAASE, H., HETZELT, L., WINTER, H.J., 1985, "Application and Verification on the Simplified Equivalence Theory for Burnup States". In: *Proceedings of the International Meeting on Advances in Nuclear Engineering Computational Methods*, Knoxville, Tennessee, USA, Apr.

- KOTCHOUBEY, J., 2015, *POLCA-T Neutron Kinetics Model Benchmarking*. M.Sc. thesis, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden.
- LAWRENCE, R.D., 1979, A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations. Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois, USA.
- 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., 1983, The DIF3D Nodal Neutronics Option for Two- and Three-Dimensional Diffusion-Theory Calculations in Hexagonal Geometry. In: ANL-83-1, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois.
- 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.
- LINDGREN, L.E. From Weighted Residual Methods to Finite Element Methods. 2009. Disponível em: <u>https://www.ltu.se/cms_fs/1.47275!/mwr_galerkin_fem.pdf</u>. Acesso em: 08 ago. 2020.
- MÜLLER, E.Z., WEISS, Z.J., 1991, "Benchmarking with the Multigroup Diffusion High-Order Response Matrix Method". *Annals of Nuclear Energy*, v. 18, n. 9, pp. 535-544.
- NAKATA, H., MARTIN, W.R., 1983, "The Finite Element Response Matrix Method", *Nuclear Science and Engineering*, v. 85, pp. 289-305.
- NES, R., 2002, An Advanced Nodal Discretization for the Quasi-Diffusion Low-Order Equations. M.Sc. thesis, Oregon State University, Corvallis, Oregon, USA.
- OKA, Y., 2014, Nuclear Reactor Design, An Advanced Course in Nuclear Engineering. Tokyo, Springer.
- PAIXÃO, S.B., SILVA, F.C., 2022, "New basis functions for reactor core calculations using the noda expansion method". Annals of Nuclear Energy, v. 166, pp. 108714.

- PALMTAG, S.P., 1997, Advanced Nodal Methods for MOX Fuel Analysis. Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.
- PESSOA, P.O., SILVA, F.C., MARTINEZ, A.S., 2016, "Finite Difference Applied to the Reconstruction Method of the Nuclear Power Density Distribution". *Annals* of Nuclear Energy, v. 92, pp. 378-390.
- PRINSLOO, R.H., TOMAŠEVIĆ, D.I, 2011, "A Practical Implementation of a Higher Order Transverse Leakage Approximation". In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May.
- PUTNEY, J.M., 1984, Nodal Methods for Solving the Diffusion Equation for Fast Reactor Analysis. Ph.D. thesis, University of London, London, UK.
- SALIH, A. Weighted Residual Methods. 2016. Disponível em: <u>https://www.iist.ac.in/sites/default/files/people/IN08026/WRM.pdf</u>. Acesso em: 06 ago. 2020.
- SANDRIN, C., SANCHEZ, R., DOLCI, F., 2011, "An Analysis of Reflector Homogenization Techniques for Full Core Diffusion Calculations". *Nuclear Science and Engineering*, v. 168, pp. 59-72.
- SHOBER, R.A., 1976, Nonlinear Methods for Solving the Diffusion Equation. Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.
- SHOBER, R.A., 1978, A Nodal Method for Solving Transient Fewgroup Neutron Diffusion Equations. In: Report ANL-78-51, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois.
- SILVA, F.C., 2020, *Notas pessoais sobre o Método de Expansão Nodal*, Programa de Engenharia Nuclear (PEN/COPPE), Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- SILVA, F.C., ALVIM, A.C.M., MARTINEZ, A.S., 2010, "An Alternative Nodal Expansion Method without Inner Iteration". In: International Conference on the Physics of Reactors 2010 (PHYSOR 2010): Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania, May.
- SMITH, K.S., 1979, An Analytic Nodal Method for Solving the Two-Group, Multidimensional, Static and Transient Neutron Diffusion Equations. Nucl. Eng.

and M.Sc. thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.

- SMITH, K.S., 1986, "Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis". *Progress in Nuclear Energy*, v. 17, n. 3, pp. 303-335.
- SMITH, K.S., 2017, "Nodal Diffusion Methods and Lattice Physics Data in LWR Analyses: Understanding Numerous Subtle Details". *Progress in Nuclear Energy*, v. 101, Part C, pp. 360-369.
- SMITH, K.S. Experiences and Historical Perspectives on the Development and Application of Reactor Physics Methods for LWR Core Neutronic Analysis. 2021. Disponível em: <u>https://rpg.jaea.go.jp/else/rpd/annual_report/pdf73/No73-02-02.pdf</u>. Acesso em: 01 dez. 2021.
- SMITH, K.S., VER PLANCK, D.M., EDENIUS, M., 1985, "QPANDA: An Advanced Nodal Method for LWR Analyses". *Transactions of the American Nuclear Society*, v. 50, pp. 532-533.
- 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.
- VOGEL, D.L., WEISS, Z.J., 1992, "A General Multigroup Formulation of the Analytic Nodal Method". In: American Nuclear Society (ANS) Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Charleston, South Carolina, Mar.
- VONDY, D.R., FOWLER, T.B., CUNNINGHAM, G.W., 1975, VENTURE: A Code Block for Solving Multigroup Neutronics Problems Applying the Finite-Difference Diffusion-Theory Approximation to Neutron Transport. In: Report ORNL-5062, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- WAGNER, M.R., FINNEMANN, H., KOEBKE, K., WINTER, H.J., 1977, "Validation of the Nodal Expansion Method and the Depletion Program MEDIUM-2 by Benchmark Calculations and Direct Comparison with Experiment", *Atomkernenergie* (ATKE), v. 30, n. 2, pp. 129-135.

APÊNDICE A Polinômios de ordens superiores

Neste apêndice, as restrições matemáticas introduzidas no Capítulo 3 são utilizadas para definir novos polinômios responsáveis pela expansão do conjunto de funções de base do NEM. Com esses novos polinômios podem ser obtidas aproximações supostamente mais precisas à representação do fluxo médio transversal de nêutrons $\bar{\psi}_{gu}^m(v)$. As funções de forma para alguns desses novos polinômios são apresentadas na Tabela 1.

As restrições de nulidades apresentadas no Capítulo 3, para a definição das novas funções polinomiais de ordens superiores, $\hat{h}_n(v)$, foram expressas na forma:

$$\hat{h}_n(v) = \begin{cases} c_n v(1-v) f_{n,n-2}(v), \text{ para valores pares de } n, \\ c_n v(1-v)(2v-1) f_{n,n-3}(v), \text{ para valores impares de } n. \end{cases}$$
(3.13)

Onde c_n são constantes arbitrárias, a serem analisadas, e $f_{n,k}(v)$ tem forma polinomial.

$$f_{n,k}(v) = \begin{cases} 1, \text{ se } k = 0, \\ \sum_{j=0}^{k} a_{n,j} v^{j}, k > 0, v \in [0,1]. \end{cases}$$
(3.14)

As restrições de ortogonalidades utilizadas podem ser escritas na forma:

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_n(v) \rangle = \int_0^1 W_P \hat{h}_0 \hat{h}_n(v) dv = 0, n \neq 0.$$
 (3.15)

e

$$\langle \hat{h}_k(v), \hat{h}_n(v) \rangle = \beta_n \delta_{kn}, \ \beta_n > 0, \ j \ge 3, \ k \ge 3.$$
 (3.16)

72
A.1. Forma generalizada da condição de consistência

$$\bar{\phi}_g^m = \frac{1}{a_u^m} \int_0^{a_u^m} \bar{\psi}_{gu}^m(u) \mathrm{d}u \tag{2.6}$$

Generalizando a aproximação $\bar{\psi}^m_{gu}(u)$ como uma expansão de ordem N,

$$\bar{\psi}_{gu}^m(u) = \sum_{n=0}^N c_{ngu}^m \,\hat{h}_n\left(\frac{u}{a_u^m}\right)\!\!. \tag{4.1}$$

Onde,

$$\hat{h}_0 = 1,$$
 (2.11.1)

e

$$c_{0gu}^m = \bar{\phi}_g^m. \tag{2.13.1}$$

Então, a Equação (2.6) pode ser reescrita,

$$\bar{\phi}_g^m = \frac{1}{a_u^m} \int_0^{a_u^m} \sum_{n=0}^N c_{ngu}^m \, \hat{h}_n\left(\frac{u}{a_u^m}\right) \mathrm{d}u.$$

Se $v = \frac{1}{a_u^m}$, $u \in [0, a_u^m] \rightarrow v \in [0, 1]$. Logo, $dv = \frac{1}{a_u^m} du$. Então,

$$\bar{\phi}_g^m = \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^m \int_0^1 \hat{h}_n(v) \mathrm{d}v.$$

Utilizando o Método de Galerkin para Resíduos Ponderados e considerando a ortogonalidade entre o termo fundamental e as demais funções de base,

$$W_{\rm P} = W_{\rm P}(v) = 1, v \in [0,1],$$
 (3.9.1)

 $\langle \hat{h}_0, \hat{h}_0 \rangle = 1,$

e

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_n(\nu) \rangle = 0, n \neq 0. \tag{3.15}$$

Como,

$$\bar{\phi}_{g}^{m} = c_{0gu}^{m} \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{0} \hat{h}_{0} dv + \sum_{n=1}^{N} c_{ngu}^{m} \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{0} \hat{h}_{n}(v) dv$$
(A.1)

$$\rightarrow \bar{\phi}_g^m = c_{0gu}^m \langle \hat{h}_0, \hat{h}_0 \rangle + \sum_{n=1}^N c_{ngu}^m \langle \hat{h}_0, \hat{h}_n(v) \rangle.$$
(A.2)

Logo,

$$c_{0gu}^m = \bar{\phi}_g^m. \tag{2.13.1}$$

As Equações (A.1) e (A.2) podem ser então entendidas como formas representativas da generalização da condição de consistência.

A.2. Expansão de terceira ordem

$$\hat{h}_3(v) = c_3 v (1 - v) (2v - 1).$$
 (A.3)

A.3. Expansão de quarta ordem

$$\hat{h}_4(v) = c_4 v (1 - v) f_{4,2}(v),$$
$$f_{4,2}(v) = a_{4,0} + a_{4,1} v + a_{4,2} v^2.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_4(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{4,0} = -\left(\frac{1}{2}a_{4,1} + \frac{3}{10}a_{4,2}\right)$$

b) Condição de ortogonalidade

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_3(v), \hat{h}_4(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{4,1} = -a_{4,2}.$$

$$\Rightarrow \hat{h}_4(v) = c_4 v (1 - v) (5v^2 - 5v + 1). \tag{A.4}$$

A.4. Expansão de quinta ordem

$$\hat{h}_5(v) = c_5 v (1 - v) (2v - 1) f_{5,2}(v),$$
$$f_{5,2}(v) = a_{5,0} + a_{5,1}v + a_{5,2}v^2.$$

a) Condição de consistência

 $\langle \hat{h}_0, \hat{h}_5(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{5,1} = -a_{5,2}.$

b) Condições de ortogonalidade

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{4}(v), \hat{h}_{5}(v) \rangle = 0.$$

$$\langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{5}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{5,0} = \frac{1}{6} a_{5,2}.$$

$$\hat{h}_4(v) = c_5 v (1-v) (5v^2 - 5v + 1).$$
 (A.5)

A.5. Expansão de sexta ordem

$$\hat{h}_6(v) = c_6 v (1 - v) f_{6,4}(v),$$

$$f_{6,4}(v) = a_{6,0} + a_{6,1} v + a_{6,2} v^2 + a_{6,3} v^3 + a_{6,4} v^4.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_6(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{6,0} = -\left(\frac{1}{2}a_{6,1} + \frac{3}{10}a_{6,2} + \frac{1}{5}a_{6,3} + \frac{1}{7}a_{6,4}\right).$$

- b) Condições de ortogonalidade
- $\Rightarrow \langle \hat{h}_5(v), \hat{h}_6(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{6,3} = -2a_{6,4}.$ $\Rightarrow \langle \hat{h}_4(v), \hat{h}_6(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{6,2} = \frac{419}{308}a_{6,4}.$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{6}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{6,1} = -\frac{111}{308}a_{6,4}$$

$$\hat{h}_6(v) = c_6 v (1-v) \left(\frac{308}{9}v^4 - \frac{616}{9}v^3 + \frac{419}{9}v^2 - \frac{111}{9}v + 1\right).$$
(A.6)

A.6. Expansão de sétima ordem

$$\hat{h}_7(v) = c_7 v (1 - v) (2v - 1) f_{7,4}(v),$$
$$f_{7,4}(v) = a_{7,0} + a_{7,1} v + a_{7,2} v^2 + a_{7,3} v^3 + a_{7,4} v^4.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_7(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{7,1} = -\left(a_{7,2} + \frac{6}{7}a_{7,3} + \frac{5}{7}a_{7,4}\right).$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{6}(v), \hat{h}_{7}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{7,3} = -2a_{7,4}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{5}(v), \hat{h}_{7}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{7,2} = \frac{17}{13}a_{7,4}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{4}(v), \hat{h}_{7}(v) \rangle = 0.$$

$$\langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{7}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{7,0} = \frac{3}{143}a_{7,4}.$$

$$\hat{h}_7(v) = c_7 v (1-v) (2v-1) \left(\frac{143}{3} v^4 - \frac{286}{3} v^3 + \frac{187}{3} v^2 - \frac{44}{3} v + 1 \right).$$
(A.7)

A.7. Expansão de oitava ordem

$$\hat{h}_8(v) = c_8 v (1 - v) f_{8,6}(v),$$

$$f_{8,6}(v) = a_{8,0} + a_{8,1} v + a_{8,2} v^2 + a_{8,3} v^3 + a_{8,4} v^4 + a_{8,5} v^5 + a_{8,6} v^6.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_8(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,0} = -\left(\frac{1}{2}a_{8,1} + \frac{3}{10}a_{8,2} + \frac{1}{5}a_{8,3} + \frac{1}{7}a_{8,4} + \frac{3}{28}a_{8,5} + \frac{1}{12}a_{8,6}\right).$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{7}(v), \hat{h}_{8}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,5} = -3a_{8,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{6}(v), \hat{h}_{8}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,4} = \frac{1417}{405}a_{8,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{5}(v), \hat{h}_{8}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,3} = -\frac{809}{405}a_{8,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{4}(v), \hat{h}_{8}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,2} = \frac{3028}{5265}a_{8,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{8}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{8,1} = -\frac{134}{1755}a_{8,6}.$$

$$\hat{h}_{8}(v) = c_{8}v(1-v)\left(\frac{5265}{18}v^{6} - \frac{15795}{18}v^{5} + \frac{18421}{18}v^{4} - \frac{10517}{18}v^{3} + \frac{3028}{18}v^{2} - \frac{402}{18}v + 1\right).$$
(A.8)

A.8. Expansão de nona ordem

$$\hat{h}_{9}(v) = c_{9}v(1-v)(2v-1)f_{9,6}(v),$$

$$f_{9,6}(v) = a_{9,0} + a_{9,1}v + a_{9,2}v^{2} + a_{9,3}v^{3} + a_{9,4}v^{4} + a_{9,5}v^{5} + a_{9,6}v^{6}.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_0, \hat{h}_9(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,1} = -\left(a_{9,2} + \frac{6}{7}a_{9,3} + \frac{5}{7}a_{9,4} + \frac{25}{42}a_{9,5} + \frac{1}{2}a_{9,6}\right).$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{8}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,5} = -3a_{9,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{7}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,4} = \frac{117}{34}a_{9,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{6}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,3} = -\frac{32}{17}a_{9,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{5}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,2} = \frac{1}{2}a_{9,6}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{4}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0.$$

$$\langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{9}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{9,0} = \frac{1}{442}a_{9,6}.$$

$$\hat{h}_{9}(v) = c_{9}v(1-v)(2v-1)(442v^{6}-1326v^{5}+1521v^{4}-832v^{3}+221v^{2}-26v+1).$$
(A.9)

A.9. Expansão de décima ordem

$$\hat{h}_{10}(v) = c_{10}v(1-v)f_{10,8}(v),$$
$$f_{10,8}(v) = \sum_{j=0}^{8} a_{10,j}v^{j}.$$

a) Condição de consistência

$$\langle \hat{h}_{0}, \hat{h}_{10}(\nu) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,0} = -\left(\frac{1}{2}a_{10,1} + \frac{3}{10}a_{10,2} + \frac{1}{5}a_{10,3} + \frac{1}{7}a_{10,4} + \frac{3}{28}a_{10,5} + \frac{1}{12}a_{10,6} + \frac{1}{15}a_{10,7} + \frac{3}{55}a_{10,8}\right) .$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{9}(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,7} = -4a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_8(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,6} = \frac{11087}{1672} a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_7(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,5} = -\frac{9853}{1672} a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_6(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,4} = \frac{86179}{28424} a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_5(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,3} = -\frac{25835}{28424} a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_4(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,2} = \frac{1075}{7106} a_{10,8}.$$

$$\Rightarrow \langle \hat{h}_{3}(v), \hat{h}_{10}(v) \rangle = 0 \rightarrow a_{10,1} = -\frac{175}{14212} a_{10,8}.$$

$$\hat{h}_{10}(v) = c_{10}v(1-v)\left(\frac{28428}{10}v^8 - \frac{113696}{10}v^7 + \frac{188479}{10}v^6 - \frac{167501}{10}v^5 + \frac{86179}{10}v^4 - \frac{25835}{10}v^3 + \frac{4300}{10}v^2 - \frac{350}{10}v + 1\right).$$
(A.10)

A.10. Coeficientes associados ($c_n, n \ge 3$)

Conforme descrito nas análises teóricas do presente estudo, observa-se do artigo de FINNEMANN *et al.* (1977) que os coeficientes c_n associados aos polinômios de ordens superiores possuem todos um mesmo valor, 6. Supõe-se que esse número seja extraído da função de base dominante na variante básica do NEM; ou seja, no presente caso, o coeficiente da expansão de segunda ordem da família ortogonal dos polinômios de Legendre deslocados, $P_n^*(x)$.

APÊNDICE B Coeficientes de ordens superiores

O Apêndice B é uma complementação às informações apresentadas no Capítulo 4. São apresentadas as etapas do desenvolvimento necessário ao cálculo dos coeficientes c_{ngu}^{m} das expansões polinomiais de ordens superiores, até a décima ordem.

B.1. Equações básicas

A Lei de Fick transversalmente integrada resulta em equações unidimensionais denominadas "equações de acoplamento", apresentadas na Equação (2.4).

$$\bar{J}_{gus}^{m} = \bar{J}_{gus}^{+m} - \bar{J}_{gus}^{-m} = -D_{g}^{m} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) \Big|_{u=u_{s}^{m}}$$
(2.4)

Onde, $u \in [0, a_u^m]$, $u = x, y, z, s = l, r, g = 1, \dots G$.

Seja o fluxo médio transversal $\bar{\psi}_{gu}^m(u)$ aproximado por uma expansão polinomial de ordem genérica "N", escrita na forma da Equação (4.1)

$$\bar{\psi}_{gu}^m(u) = \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^m \,\hat{h}_n\left(\frac{u}{a_u^m}\right). \tag{4.1}$$

Introduzida a aproximação para o fluxo médio transversal (Equação 4.1) na Equação (2.4), então a equação para a corrente média líquida no contorno do nodo pode ser escrita:

$$\bar{J}_{gus}^m = -D_g^m \sum_{n=1}^N c_{ngu}^m \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \hat{h}_n \left(\frac{u}{a_u^m}\right) \Big|_{u=u_s^m}.$$
(B.1)

Como $\hat{h}_0 = 1$, então

$$\frac{\mathrm{d}\hat{h}_0}{\mathrm{d}u} = 0. \tag{B.2}$$

Se
$$v = u/a_u^m$$
, $u \in [0, a_u^m] \rightarrow v \in [0, 1]$, então

$$\mathrm{d}\nu = \frac{1}{a_u^m} \mathrm{d}u\,,\tag{B.3}$$

e

$$\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}\nu^k} = (a_u^m)^k \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}u^k}.$$
 (B.4)

Portanto,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\hat{h}_n\left(\frac{u}{a_u^m}\right)\Big|_{u=u_s^m} = \frac{1}{a_u^m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_n(v)\Big|_{v=v_s^m}, v = \begin{cases} 0, s=l,\\ 1, s=r. \end{cases}$$
(B.5)

As equações de acoplamento (Equação B.1) podem ser reescritas

$$\bar{J}_{gus}^{m} = -D_{gu}^{m} \sum_{n=1}^{N} c_{ngu}^{m} \frac{d}{dv} \hat{h}_{n}(v) \Big|_{v=v_{s}^{m}}.$$
(B.6.1)

Onde,

$$D_{gu}^m = \frac{D_g^m}{a_u^m}.\tag{B.6.2}$$

B.2. Derivadas das funções de base

Com vistas à continuidade do processo para identificação dos coeficientes das expansões polinomiais, são identificadas as derivadas das funções de base $\hat{h}_n(v)$ nas fronteiras do nodo *m* (Equação B.5).

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_n(v)\Big|_{v=v_s^m}, v = \begin{cases} 0, s = l, \\ 1, s = r. \end{cases}$$

$$\hat{h}_0 = 1 \rightarrow \frac{\mathrm{d}\hat{h}_0}{\mathrm{d}\nu} = 0. \tag{B.2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{1}(v)\Big|_{v=0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{1}(v)\Big|_{v=1} = 2.$$
(B.7)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{2}(v)\Big|_{v=0} = 6, \ \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{1}(v)\right|_{v=1} = -6.$$
(B.8)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{3}(v)\Big|_{v=0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{3}(v)\Big|_{v=1} = -6.$$
(B.9)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_4(v)\Big|_{v=0} = 6, \ \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_4(v)\right|_{v=1} = -6.$$
(B.10)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{5}(v)\Big|_{v=0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{5}(v)\Big|_{v=1} = -6.$$
(B.11)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{6}(v)\Big|_{v=0} = 6, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{6}(v)\Big|_{v=1} = -6. \tag{B.12}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{7}(v)\Big|_{v=0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{7}(v)\Big|_{v=1} = -6.$$
(B.13)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{8}(v)\Big|_{v=0} = 6, \ \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{8}(v)\right|_{v=1} = -6.$$
(B.14)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{9}(v)\Big|_{v=0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{9}(v)\Big|_{v=1} = -6.$$
(B.15)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{10}(v)\Big|_{v=0} = 6, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}\hat{h}_{10}(v)\Big|_{v=1} = -6.$$
(B.16)

Logo, generalizando, para $n \ge 2$,

÷

$$\begin{cases} \left. \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \hat{h}_n(v) \right|_{v=0} = \left. \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \hat{h}_n(v) \right|_{v=1} = -6, \text{ se } n \text{ \acute{e} impar,} \tag{B.17.1} \end{cases}$$

$$\left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \hat{h}_n(v) \right|_{v=0} = 6, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \hat{h}_n(v) \Big|_{v=1} = -6, \quad \text{se } n \text{ é par.}$$
(B.17.2)

B.3. Equações de acoplamento para ordens superiores (N>2)

As equações de acoplamento descritas sob a forma da Equação (B.6.1) podem ser reescritas, utilizando as informações das derivadas no contorno do nodo m.

$$\bar{J}_{gul}^{m} = \bar{J}_{gul}^{+m} - \bar{J}_{gul}^{-m} = -D_{gu}^{m} \left(2c_{1gu}^{m} + 6\sum_{n=2}^{N} (-1)^{n} c_{ngu}^{m} \right),$$
(B.18.1)

e,

$$\bar{J}_{gur}^{m} = \bar{J}_{gur}^{+m} - \bar{J}_{gur}^{-m} = -D_{gu}^{m} \left(2c_{1gu}^{m} - 6\sum_{n=2}^{N} c_{ngu}^{m} \right).$$
(B.18.2)

Utilizando a forma transversalmente integrada da aproximação da difusão (Equação 2.14) nas Equações (2.13.2) e (2.13.3), possibilita escrever os coeficientes polinomiais c_{1gu}^m e c_{2gu}^m como funções de correntes médias nas faces do nodo:

$$c_{1gu}^{m} = \left(\bar{J}_{gur}^{+m} + \bar{J}_{gur}^{-m}\right) - \left(\bar{J}_{gul}^{+m} + \bar{J}_{gul}^{-m}\right),\tag{B.19.1}$$

e

$$c_{2gu}^{m} = \bar{\phi}_{g}^{m} - \left[\left(\bar{J}_{gur}^{+m} + \bar{J}_{gur}^{-m} \right) + \left(\bar{J}_{gul}^{+m} + \bar{J}_{gul}^{-m} \right) \right].$$
(B.19.2)

Onde \bar{J}_{gul}^{-m} e \bar{J}_{gur}^{+m} são as correntes médias parciais de saída à esquerda e direita do nodo *m*, respectivamente. Enquanto que \bar{J}_{gul}^{+m} e \bar{J}_{gur}^{-m} identificam as correntes médias parciais de entrada nesse mesmo nodo.

B.4. Equações nodais para expansão de décima ordem (N=10)

$$\begin{cases} \bar{J}_{gul}^{+m} - \bar{J}_{gul}^{-m} = -D_{gu}^{m} \left[2c_{1gu}^{m} + 6c_{2gu}^{m} + 6\sum_{n=3}^{10} (-1)^{n} c_{ngu}^{m} \right] \\ \\ \bar{J}_{gur}^{+m} - \bar{J}_{gur}^{-m} = -D_{gu}^{m} \left[2c_{1gu}^{m} - 6c_{2gu}^{m} - 6\sum_{n=3}^{10} c_{ngu}^{m} \right] \end{cases}$$

$$\begin{cases} (1+8D_{gu}^{m})\bar{J}_{gul}^{-m} + 4D_{gu}^{m}\bar{J}_{gur}^{+m} = (1-8D_{gu}^{m})\bar{J}_{gul}^{+m} - 4D_{gu}^{m}\bar{J}_{gur}^{-m} + \\ & 6D_{gu}^{m} \left(\bar{\phi}_{g}^{m} + \sum_{n=3}^{10} (-1)^{n} c_{ngu}^{m}\right) \\ & 4D_{gu}^{m} \bar{J}_{gul}^{-m} + (1+8D_{gu}^{m})\bar{J}_{gur}^{+m} = -4D_{gu}^{m} \bar{J}_{gul}^{+m} + (1-8D_{gu}^{m})\bar{J}_{gur}^{-m} + \\ & 6D_{gu}^{m} \left(\bar{\phi}_{g}^{m} + \sum_{n=3}^{10} c_{ngu}^{m}\right) \end{cases}$$
(B.20.1)

Esse sistema de duas equações com duas incógnitas ($\bar{J}_{gul}^{-m} e \bar{J}_{gur}^{+m}$) possui solução da seguinte forma,

$$\bar{J}_{gul}^{-m} = A_{0gu}^{m} \bar{\phi}_{g}^{m} + A_{1gu}^{m} \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{2gu}^{m} \bar{J}_{gur}^{-m} - A_{3gu}^{m} \sum_{n=2}^{5} c_{(2n-1)gu}^{m} + A_{4gu}^{m} \sum_{n=2}^{5} c_{(2n)gu}^{m}$$
(B.21.1)

$$\bar{J}_{gur}^{+m} = A_{0gu}^{m} \bar{\phi}_{g}^{m} + A_{2gu}^{m} \bar{J}_{gul}^{+m} + A_{1gu}^{m} \bar{J}_{gur}^{-m} + A_{3gu}^{m} \sum_{n=2}^{5} c_{(2n-1)gu}^{m} + A_{4gu}^{m} \sum_{n=2}^{5} c_{(2n)gu}^{m}$$
(B.21.2)

Onde os coeficientes A_{ngu}^m ($n = 0, \dots 4$) encontram-se definidos no Capítulo 2 (Equações 2.17.1 a 2.17.5).

Com essas definições, a equação de balanço nodal expressa na Equação (2.2) pode ser revisitada.

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} \left[\left(\bar{J}_{gur}^{+m} - \bar{J}_{gur}^{-m} \right) - \left(\bar{J}_{gul}^{+m} - \bar{J}_{gul}^{-m} \right) \right] + \Sigma_{tg}^m \bar{\phi}_g^m$$

$$= \sum_{g'=1}^G \left(\Sigma_{gg'}^m + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^m \right) \bar{\phi}_{g'}^m, g = 1, \cdots G.$$
(2.2)

Resultando na forma apresentada na Equação (4.2.3).

$$\left(\Sigma_{tg}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m} \right) \bar{\phi}_{g}^{m} = \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{1}{k_{eff}} \chi_{g} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) \bar{\phi}_{g'}^{m} + \sum_{u=x,y,z} \left\{ \frac{2}{a_{u}^{m}} A_{0gu}^{m} [2(\bar{J}_{gul}^{+m} + \bar{J}_{gur}^{-m}) - \sum_{n=2}^{5} c_{(2k)gu}^{m}] \right\}.$$

$$(4.2.3)$$

B.5. Coeficientes de ordens superiores

Para a definição dos coeficientes de ordens superiores, o Método dos Resíduos Ponderados é aplicada na equação da difusão de nêutrons transversalmente integrada (Equação 2.7), considerando parâmetros homogeneizados, em um dado nodo m, na forma:

$$\frac{1}{a_{u}^{m}} \int_{0}^{a_{u}^{m}} W(u) \left[-D_{g}^{m} \frac{d^{2}}{du^{2}} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) + \Sigma_{tg}^{m} \bar{\psi}_{gu}^{m}(u) - \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) \bar{\psi}_{g'u}^{m}(u) + L_{gu}^{m}(u) \right] du = 0, \quad g = 1, \cdots G.$$

$$(2.18)$$

W(u) representa a função-peso escolhida, enquanto que $\bar{\psi}_{gu}^m(u)$ e $L_{gu}^m(u)$ assumem suas formas aproximadas: expansões polinomiais de enésima e de segunda ordens, respectivamente.

$$W(u) = W_{\rm P} \hat{h}_{\rm k} \left(\frac{u}{a_u^m}\right)$$
$$\bar{\psi}_{gu}^m(u) = \sum_{n=0}^{\rm N} c_{ngu}^m \hat{h}_n \left(\frac{u}{a_u^m}\right)$$
(4.1)

$$L_{gu}^{m}(u) = \sum_{n=0}^{2} \alpha_{ngu}^{m} \hat{h}_{n} \left(\frac{u}{a_{u}^{m}}\right)$$
(2.9.2)

A Equação (2.18) fica então com a seguinte forma,

$$\int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{k}(v) \left[\left(-\frac{D_{gu}^{m}}{a_{u}^{m}} \frac{d^{2}}{dv^{2}} + \Sigma_{tg}^{m} \right) \sum_{n=0}^{N} c_{ngu}^{m} \hat{h}_{n}(v) - \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} v \Sigma_{fg'}^{m} \right) \sum_{n=0}^{N} c_{ng'u}^{m} \hat{h}_{n}(v) + \sum_{n=0}^{2} \alpha_{ngu}^{m} \hat{h}_{n}(v) \right] dv = 0.$$
(B.22)

Conhecidos os parâmetros geométricos e materiais no nodo, os processos de integrações ficam restritos a duas formas básicas:

$$\int_{0}^{1} W_{\mathrm{P}} \hat{h}_{k}(v) \hat{h}_{n}(v) \,\mathrm{d}v \tag{B.23.1}$$

e

$$\int_{0}^{1} W_{\rm P} \hat{h}_{k}(v) \frac{{\rm d}^{2} \hat{h}_{n}}{{\rm d}v^{2}} {\rm d}v.$$
(B.23.2)

Os coeficientes $c_{ngu}^m e \alpha_{ngu}^m$ para $0 \le n \le 2$ são conhecidos (Equações 2.13.1 a 2.13.3 e 2.19, respectivamente). Observando as integrações e respeitando as propriedades vinculadas à ortogonalidade, a equação da difusão de nêutrons transversalmente integrada em sua forma ponderada pode ser escrita

$$\sum_{n=3}^{N} \left\{ -\frac{D_{gu}^{m}}{a_{u}^{m}} c_{ngu}^{m} \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{k}(v) \frac{d^{2} \hat{h}_{n}}{dv^{2}} dv + \left[\Sigma_{tg}^{m} c_{ngu}^{m} - \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} v \Sigma_{fg'}^{m} \right) c_{ng'u}^{m} \right] \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{k}(v) \hat{h}_{n}(v) dv \right\}$$
$$= \sum_{n=1}^{2} \left\{ \left[\sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} v \Sigma_{fg'}^{m} \right) c_{ng'u}^{m} - \left(\Sigma_{tg}^{m} c_{ngu}^{m} + \alpha_{ngu}^{m} \right) \right] \int_{0}^{1} W_{P} \hat{h}_{k}(v) \hat{h}_{n}(v) dv \right\}, \quad g = 1, \cdots G.$$
(B.24)

Definindo,

$$\theta_{k,n} \equiv \int_{0}^{1} W_{\mathrm{P}} \hat{h}_{k}(v) \hat{h}_{n}(v) \,\mathrm{d}v \qquad (B.25.1)$$

e

$$\beta_{k,n} \equiv \int_{0}^{1} W_{\rm P} \hat{h}_k(v) \frac{\mathrm{d}^2 \hat{h}_n}{\mathrm{d}v^2} \mathrm{d}v. \tag{B.25.2}$$

Então, a Equação (B.24) pode ser escrita

$$\sum_{n=3}^{10} \mathbf{A}_{knu}^m \tilde{\boldsymbol{c}}_{nu}^m = \tilde{\boldsymbol{s}}_{ku}^m. \tag{B.26}$$

Onde os elementos da matriz \mathbf{A}_{knu}^m apresentam a seguinte forma

$$[\mathbf{A}_{knu}^m]_{gg} = -\frac{D_{gu}^m}{a_u^m}\beta_{k,n} + \left[\Sigma_{tg}^m - \left(\Sigma_{gg}^m + \frac{\chi_g}{k_{eff}}\nu\Sigma_{fg}^m\right)\right]\theta_{k,n}, \qquad (B.27.1)$$

$$[\mathbf{A}_{knu}^m]_{gg'} = -\left(\Sigma_{gg'}^m + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^m\right) \theta_{k,n}, \quad g' \neq g, g = 1, \cdots G.$$
(B.27.2)

As componentes $\tilde{\boldsymbol{c}}_{nu}^m$ apresentam a forma

$$\tilde{\boldsymbol{c}}_{nu}^{m} = \begin{bmatrix} c_{n1u}^{m} \\ c_{n2u}^{m} \\ \vdots \\ c_{ngu}^{m} \\ \vdots \\ c_{n(G-1)u}^{m} \\ c_{nGu}^{m} \end{bmatrix}, \text{ para } n = 3, \cdots 10.$$
(B.28)

E, as componentes de \tilde{s}_{ku}^m

$$s_{ku,g}^{m} \equiv \sum_{n=1}^{2} \left\{ \sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_{g}}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) c_{ng'u}^{m} - \left(\Sigma_{tg}^{m} c_{ngu}^{m} + \alpha_{ngu}^{m} \right) \right\} \theta_{k,n} .$$
 (B.29)

Antes de dar continuidade à identificação dos coeficientes c_{ngu}^m de ordens superiores ($n \ge 3$), cabe ressaltar que as funções-peso adotadas no presente estudo são as mesmas utilizadas no artigo de FINNEMANN *et al.* (1977), adotado como principal referência, que são: pesos momentos (k = n - 2) e Galerkin (k = n). A escolha do tipo de função-peso define a função-tentativa, $\hat{h}_k(v)$, que será usada no cálculo dos parâmetros $\theta_{k,n} \in \beta_{k,n}$ (Equações B.25.1 e B.25.2, respectivamente), de acordo com a ordem da expansão utilizada (N). Os resultados para esses dois parâmetros, $\theta_{k,n} \in \beta_{k,n}$, para expansões de até décima ordem (N=10), encontram-se nas Tabelas 2 e 3, respectivamente. Nessas tabelas observam-se relações entre coeficientes de ordens exclusivamente pares ou exclusivamente ímpares, sendo nulo o resultado para o cruzamento entre termos de distintas paridades. Sendo assim, tendo por referência a Equação (B.26), uma expansão de décima ordem (N=10) apresenta os seguintes padrões:

$$\mathbf{A}_{k3u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{3u}^{m} + \mathbf{A}_{k5u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{5u}^{m} + \mathbf{A}_{k7u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{7u}^{m} + \mathbf{A}_{k9u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{9u}^{m} = \tilde{\mathbf{s}}_{ku}^{m(1)}, \qquad (B.30.1)$$

e

$$\mathbf{A}_{k4u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{4u}^{m} + \mathbf{A}_{k6u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{6u}^{m} + \mathbf{A}_{k8u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{8u}^{m} + \mathbf{A}_{k10u}^{m} \tilde{\mathbf{c}}_{10u}^{m} = \tilde{\mathbf{s}}_{ku}^{m(2)}.$$
 (B.30.1)

Onde as componentes de $\tilde{s}_{ku}^{m(1)}$ e $\tilde{s}_{ku}^{m(2)}$ são definidas como,

$$s_{ku,g}^{m(1)} \equiv \left[\sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) c_{1g'u}^{m} - \left(\Sigma_{tg}^{m} c_{1gu}^{m} + \alpha_{1gu}^{m} \right) \right] \theta_{k,1} , \qquad (B.31.1)$$

e

$$s_{ku,g}^{m(2)} \equiv \left[\sum_{g'=1}^{G} \left(\Sigma_{gg'}^{m} + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \nu \Sigma_{fg'}^{m} \right) c_{2g'u}^{m} - \left(\Sigma_{tg}^{m} c_{2gu}^{m} + \alpha_{2gu}^{m} \right) \right] \theta_{k,2} .$$
(B.31.2)

 $g = 1, \cdots G.$

APÊNDICE C Descrições dos problemas

C.1. IAEA-2D





Figura 24: IAEA-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e 1º quadrante).

COMPOSIÇÃO

Materiais		g	$D_g(cm)$	$\Sigma_{ag}(cm^{-1})$	$\nu \Sigma_{fg}(cm^{-1})$	$\Sigma_{21}(cm^{-1})$
	EC1	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,080	0,135	
	EC2	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,085	0,135	
	EC2 + BC	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,130	0,135	
	Refletor	1	2,000	0,000	0,000	0,040
		2	0,300	0,010	0,000	

Tabela 6 – IAEA-2D – Dados nucleares.

 $\cdot \chi_1 = 1,0; \chi_2 = 0,0.$

- Buckling axial: $B_{z,g}^2 = 0.8 \times 10^{-4} cm^{-2}$, para todas as regiões e grupos de energia.
- Condições de contorno: Vácuo $\rightarrow J_g^{IN} = 0$. Corrente de entrada nula no contorno do núcleo.

• Condição de simetria: Reflexiva $\rightarrow \frac{\partial \phi_g}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Onde **n** é a direção normal à superfície.

EC: Elemento Combustível.

BC: Barra de Controle.



GEOMETRIA

Figura 25: LRABWR-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e 1° quadrante).

COMPOSIÇÃO

Materiais		g	$D_g(cm)$	$\Sigma_{ag}(cm^{-1})$	$\nu \Sigma_{fg}(cm^{-1})$	$\Sigma_{21}(cm^{-1})$
	EC1 + BC	1	1,2550	0,008252	0,004602	0,02533
		2	0,2110	0,100300	0,109100	
	EC1	1	1,2680	0,007181	0,004609	0,02767
		2	0,1902	0,070470	0,086750	
	EC2 + BC	1	1,2590	0,008002	0,004663	0,02617
		2	0,2091	0,083440	0,102100	
	EC2	1	1,2590	0,008002	0,004663	0,02617
		2	0,2091	0,073324	0,102100	
	Refletor	1	1,2570	0,0006034	0	0,04754
		2	0,1592	0,0191100	0	

Tabela 7 – LRABWR-2D – Dados nucleares.

 $\cdot \chi_1 = 1,0; \chi_2 = 0,0.$

- Buckling axial: $B_{z,g}^2 = 1,0 \times 10^{-4} cm^{-2}$, para todas as regiões e grupos de energia.
- Condições de contorno: Fluxo nulo $\rightarrow \phi_g = 0$.

• Condição de simetria: Reflexiva $\rightarrow \frac{\partial \phi_g}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Onde **n** é a direção normal à superfície.

EC: Elemento Combustível.

BC: Barra de Controle.



GEOMETRIA

Figura 26: BIBLIS-2D – Vistas de topo (núcleo inteiro e 1° quadrante).

COMPOSIÇÃO

Materiais		g	$D_g(cm)$	$\Sigma_{ag}(cm^{-1})$	$\nu \Sigma_{fg}(cm^{-1})$	$\Sigma_{21}(cm^{-1})$
	1	1	1,4360	0,0095042	0,0058708	0,017754
		2	0,3635	0,0750580	0,0960670	
	2	1	1,4366	0,0096785	0,0061908	0,017621
		2	0,3636	0,0784360	0,1035800	
	3	1	1,3200	0,0026562	0,0	0,023106
		2	0,2772	0,0715960	0,0	
	4	1	1,4389	0,0103630	0,0074527	0,017101
		2	0,3638	0,0914080	0,1323600	
	5	1	1,4381	0,0100030	0,0061908	0,017290
		2	0,3665	0,0848280	0,1035800	
	6	1	1,4385	0,0101320	0,0064285	0,017192
		2	0,3665	0,0873140	0,1091100	
	7	1	1,4389	0,0101650	0,0061908	0,017125
		2	0,3679	0,0880240	0,1035800	
	8	1	1,4393	0,0102940	0,0064285	0,017027
		2	0,3680	0,0905100	0,1091100	

Tabela 8 – BIBLIS-2D – Dados nucleares.

 $\cdot \chi_1 = 1,0; \chi_2 = 0,0.$

• Condições de contorno: Vácuo $\rightarrow J_g^{IN} = 0$. Corrente de entrada nula no contorno do núcleo.

• Condição de simetria: Reflexiva $\rightarrow \frac{\partial \phi_g}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Onde **n** é a direção normal à superfície.



GEOMETRIA

Figura 27: IAEA-3D – Vistas de topo e frontal.



Figura 28: IAEA-3D – Vista de topo em diferentes planos ($1^{\underline{0}}$ quadrante).

COMPOSIÇÃO

Materiais		g	$D_g(cm)$	$\Sigma_{ag}(cm^{-1})$	$\nu \Sigma_{fg}(cm^{-1})$	$\Sigma_{21}(cm^{-1})$
	EC1	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,080	0,135	
	EC2	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,085	0,135	
	EC2 + BC	1	1,500	0,010	0,000	0,020
		2	0,400	0,130	0,135	
H	Refletor	1	2,000	0,000	0,000	0,040
		2	0,300	0,010	0,000	
Refletor + BC	Refletor +	1	2,000	0,000	0,000	0,040
	2	0,300	0,055	0,000		

Tabela 9 – IAEA-3D – Dados nucleares.

- $\cdot \chi_1 = 1,0; \chi_2 = 0,0.$
- Condições de contorno: Vácuo $\rightarrow J_g^{IN} = 0$. Corrente de entrada nula no contorno do núcleo.

• Condição de simetria: Reflexiva $\rightarrow \frac{\partial \phi_g}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Onde **n** é a direção normal à superfície.

EC: Elemento Combustível.

BC: Barra de Controle.

C.5. LRABWR-3D



GEOMETRIA



¢,

Figura 29: LRABWR-3D – Vistas de topo e frontal.

COMPOSIÇÃO

Materiais		g	$D_g(cm)$	$\Sigma_{ag}(cm^{-1})$	$\nu \Sigma_{fg}(cm^{-1})$	$\Sigma_{21}(cm^{-1})$
	EC1 + BC	1	1,2550	0,008252	0,004602	0,02533
		2	0,2110	0,100300	0,109100	
	EC1	1	1,2680	0,007181	0,004609	0,02767
		2	0,1902	0,070470	0,086750	
	EC2 + BC	1	1,2590	0,008002	0,004663	0,02617
		2	0,2091	0,083440	0,102100	
	EC2	1	1,2590	0,008002	0,004663	0,02617
		2	0,2091	0,073324	0,102100	
	Refletor	1	1,2570	0,0006034	0	0,04754
		2	0,1592	0,0191100	0	

Tabela 10 - LRABWR-3D - Dados nucleares.

 $\cdot \chi_1 = 1,0; \chi_2 = 0,0.$

• Condições de contorno: Fluxo nulo $\rightarrow \phi_g = 0$.

• Condição de simetria: Reflexiva $\rightarrow \frac{\partial \phi_g}{\partial \mathbf{n}} = 0$. Onde **n** é a direção normal à superfície.

EC: Elemento Combustível.

BC: Barra de Controle.