

UM PROCEDIMENTO PARA CÁLCULO DE HOMOGENEIZAÇÃO DE ELEMENTOS
COMBUSTÍVEIS EM REATORES PWR

Augusto César Loçana Menezes

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

Aprovada por:

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph. D.

Prof. Ricardo Carvalho de Barros, Ph. D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO 2006

MENEZES, AUGUSTO CÉZAR LOÇANA
Um Procedimento para Cálculo de
Homogeneização de Elementos Combustíveis
em Reatores PWR [Rio de Janeiro] 2006
VIII, 64 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc.,
Engenharia Nuclear, 2006)
Dissertação – Universidade Federal do Rio
de Janeiro, COPPE
1. Neutrônica
I. COPPE/UFRJ II. Título (Série)

AGRADECIMENTOS

A Deus por estar sempre ao meu lado.

Ao professor Fernando Carvalho da Silva, pela paciência, orientação e amizade traçados ao longo desses três anos.

Ao professor Aquilino Senra Martinez pelo apoio dado ao longo desses três anos.

Aos funcionários que sempre colaboram em todos os momentos de necessidade.

Aos meus pais, Antônio e Lusia, pelo apoio incondicional e compreensão pelos momentos de ausência.

Aos meus sogros, Aldeny e Santinha, pelo apoio em todos os sentidos.

Agradeço especialmente a minha esposa Fernanda e ao meu filho Pedro, pela paciência, compreensão pelos momentos de ausência, apoio e pelo amor a mim demonstrado em todos os momentos.

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

UM PROCEDIMENTO PARA CÁLCULO DE HOMOGENEIZAÇÃO DE ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS EM REATORES PWR

Augusto Cezar Loçana Menezes

Março/2006

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva
Aquilino Senra Martinez

Departamento: Engenharia Nuclear

Os métodos de malha grossa, na Teoria de Transporte ou na Teoria da Difusão de Nêutrons, trabalham com domínios formados por grandes regiões nas quais os parâmetros nucleares são uniformes. No entanto, os núcleos de reatores do tipo PWR são compostos por elementos combustíveis heterogêneos, além de regiões como “baffle”, refletor, barril, etc. Sendo assim, o uso destes métodos de malha grossa requer a homogeneização espacial destas regiões heterogêneas.

Neste trabalho de dissertação foi desenvolvido um procedimento para cálculo de homogeneização de elementos combustíveis de reatores PWR, para uso em cálculos de difusão que utilizam o Método de Expansão Nodal (NEM), seguindo a Teoria de Equivalência Generalizada.

Os resultados da aplicação do procedimento de cálculo de homogeneização desenvolvido ao núcleo de um reator do tipo PWR mostraram consistência tanto na obtenção dos parâmetros nucleares médios como no cálculo dos fatores de descontinuidade. Além disso, os parâmetros nucleares médios, calculados usando duas diferentes geometrias espectrais (“único assembly” e “multiassemblies”), apresentaram boa precisão quando comparados com aqueles obtidos usando o cálculo global.

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

A PROCEDURE FOR THE CALCULATION OF HOMOGENIZATION FUEL
ELEMENTS IN PWR REACTORS

Augusto César Loçana Menezes

March / 2006

Advisors Fernando Carvalho da Silva
Aquilino Senra Martinez

Department: Nuclear Engineering

Coarse mesh methods in transport theory in neutron diffusion theory deal with large region domain where nuclear constants are uniform. However, PWR cores are formed by heterogeneous fuel elements and also by other regions like baffle, reflector, core barrel, etc. Because of that, in order to use coarse mesh methods, one needs to homogenize in space these heterogeneous regions.

In this thesis work, a procedure to homogenize PWR fuel elements was developed and was applied to diffusion theory calculation using the Nodal Expansion Method (NEM), according to the generalized Equivalency Theory.

Results of this procedure of homogenization applied to a PWR have shown consistency in obtaining average nuclear constants as well as in the calculation of discontinuity factor. Furthermore, the average nuclear constants calculated for two distinct spectral geometries (single and multiassembly) showed good accuracy when compared to results generated by “global” calculation.

ÍNDICE DO TEXTO

	Pág
DEDICATÓRIA	iii
AGRACECIMENTOS	iv
RESUMO	v
ABSTRACT	vi
ÍNDICE DO TEXTO	vii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA LINEAR DE TRAN- PORTES DE NÊUTRONS	4
2.1 – Introdução	4
2.2 – Equações constitutivas do Problema de Ordenadas Discretas Multigrupo Dis- cretizado no Espaço	6
2.3 – Solução Numérica do Problema de Ordenadas Discretas Multigrupo Discre - tizado no Espaço	10
2.3.1 Solução Numérica do Problema de Fonte Fixa	10
2.3.2 Solução Numérica Dominante de Problemas de	22
2.3.3 Etapas do Cálculo Numérico de Ordenadas Discretas e Algoritmo Itemizado	24
CAPÍTULO 3 – HOMOGENEIZAÇÃO E COLAPSAÇÃO	27
3.1 Homogeneização Espacial	28
3.1.1 Fluxo Médio na Região de Interesse	28
3.1.2 Seções de Choque Médias na Região de Interesse	28
3.1.3 Fluxos e Correntes Médias nas Faces da Região de Interesse	29
3.2 Colapso em Grupos de Energia	31
CAPÍTULO 4 – FATORES DE DESCONTINUIDADE	33
4.1 Definição dos Fatores de Descontinuidade	33
4.2 Cálculo dos Fatores de Descontinuidade	39

CAPÍTULO 5 – ANÁLISE DOS RESULTADOS	47
CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	61
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O projeto e análise do núcleo de reatores do tipo PWR necessitam do conhecimento extensivo das quantidades que influenciam a operação do reator. Portanto, as distribuições de densidade de potência, as eficácias das barras de controle, as margens de desligamento e as taxas de depleção isotópicas devem ser conhecidas através dos diversos ciclos de operação do reator. A habilidade para calcular tais quantidades, seja nos cálculos de otimização de recarga, seja nos cálculos de acompanhamento da operação de reatores, depende fortemente dos métodos empregados para prever a distribuição espacial e energética dos nêutrons no núcleo destes reatores. Muitas concessionárias de reatores nucleares do tipo PWR utilizam sistemas de cálculo [1,2] que usam a Teoria da Difusão a dois grupos de energia e métodos nodais de malha grossa para realizar tais cálculos.

Os métodos de malha grossa em cálculos globais de reatores nucleares, na Teoria de Transporte [3,4] ou na Teoria da Difusão [5-8] de Nêutrons, convencionalmente trabalham com domínios formados por grandes regiões nas quais os parâmetros nucleares são uniformes. No entanto, os núcleos de reatores do tipo PWR são compostos por elementos combustíveis heterogêneos, além de regiões como “baffle” e refletor, por exemplo. Sendo assim, o uso destes métodos de malha grossa requer a homogeneização espacial das regiões heterogêneas.

O problema de homogeneização de elementos combustíveis e de regiões compostas de “baffle” e refletor, em reatores do tipo PWR, tem sido tratado por vários autores, como se pode ver nas referências [9-12], que relatam que resultados satisfatórios têm sido obtidos.

Para a homogeneização de elementos combustíveis Henry *et al.* [13] obtiveram parâmetros nucleares efetivos, para a Teoria da Difusão, usando um método de matriz resposta. Ainda para a obtenção de parâmetros nucleares, para uso em cálculos de difusão, Koebke [14] definiu coeficientes de difusão dependentes de direção e fatores de heterogeneidade de fluxo, no que chamou de Teoria de Equivalência. Num outro trabalho Koebke [15] apresentou a Teoria de Equivalência Simplificada, na qual apenas um coeficiente de difusão, que é calculado iterativamente, e um único fator de heterogeneidade são definidos para cada região homogeneizada. Já Smith *et al.* [16] generalizaram a Teoria de Equivalência definindo os chamados fatores de descontinuidade, um para cada face da região homogeneizada, mas mantiveram a técnica convencional de homogeneização para o cálculo dos parâmetros nucleares. Na técnica convencional os parâmetros nucleares (coeficiente de difusão e seções de choque) são representados por médias ponderadas no fluxo heterogêneo da região a ser homogeneizada.

Outros trabalhos para homogeneização tanto de elementos combustíveis quanto de “baffle” e refletor, como para homogeneização até em nível célula, podiam ser citados, mas todos se apóiam nas teorias desenvolvidas por Koebke [15] e por Smith [16] que formam a base dos atuais Métodos Avançados de Homogeneização.

Então, adotando a Teoria de Equivalência Generalizada, foi desenvolvido neste trabalho de mestrado um procedimento para cálculo de homogeneização de elementos combustíveis de reatores PWR, para uso em cálculos de difusão que utilizam o Método de Expansão Nodal (NEM) [5,6]. O procedimento consiste basicamente das seguintes etapas: Primeiro são calculados, resolvendo um problema de autovalor, os fluxos angulares de nêutrons no domínio da geometria espectral [15] de interesse. Segundo, a partir dos fluxos angulares na região heterogênea a ser homogeneizada, são obtidos o fluxo de nêutrons no

interior da região, o fluxo médio na região, os fluxos de nêutrons e as correntes líquidas médios nas quatro faces da região e ainda as correntes líquidas nos quatro cantos desta mesma região. Terceiro, o fluxo de nêutrons, no interior da região a ser homogeneizada, é usado para calcular os parâmetros nucleares efetivos que representam a região homogeneizada, de acordo com a técnica convencional de homogeneização. Por fim, o autovalor do problema heterogêneo resolvido na primeira etapa, o fluxo médio, os fluxos e correntes médios nas faces e as correntes nos cantos da região homogeneizada, calculados na segunda etapa, mais os parâmetros nucleares obtidos na terceira etapa, são usados em um cálculo de fonte fixa, com discretização espacial segundo o NEM, para obter os fatores de descontinuidade da Teoria de Equivalência Generalizada.

No capítulo 2 é apresentado o método usado neste trabalho de dissertação para cálculo dos fluxos angulares de nêutrons no domínio das geometrias de interesse. No capítulo 3 são apresentadas as expressões para a homogeneização e colapso dos parâmetros nucleares. No capítulo 4 é dada a definição de fatores de descontinuidade, uma justificativa para seu uso em cálculos nodais de malha grossa e é mostrada a formulação para calculá-los usando o NEM. No capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos com a aplicação do procedimento de cálculo de homogeneização desenvolvido ao núcleo de um reator do tipo PWR. Por fim, no capítulo 6 são apresentadas as conclusões deste trabalho e também algumas sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA LINEAR DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS

2.1 Introdução

A teoria linear do transporte de nêutrons corresponde a uma descrição matemática aproximada da migração de nêutrons em um meio material [17]. Essa descrição aproximada envolve um conjunto de hipóteses simplificadoras à teoria do transporte de nêutrons, conduzindo a uma equação íntegro-diferencial linear que descreve a relação entre as taxas de interação dos nêutrons com o meio material definidas em um ponto do espaço de fase. Em função de uma descrição conveniente das interações dos nêutrons com o meio material, o espaço de fase usual é constituído pelo vetor-posição \vec{r} , pela energia cinética dos nêutrons no referencial laboratório E , pelo vetor direção da velocidade $\vec{\Omega}$ definido em uma esfera unitária e pelo tempo t . Para grande parte dos problemas de interesse, as hipóteses simplificadoras que conduzem à equação linear do transporte de nêutrons não violam os fenômenos de interação dominantes e, deste modo, a descrição matemática do transporte na forma linear pode ser considerada adequada à quantificação do fenômeno físico do transporte de nêutrons.

Em função da complexidade do problema linear do transporte de nêutrons, métodos determinísticos [17-19] são utilizados para a obtenção de aproximações convenientes ao problema linear original. A formulação de ordenadas discretas (S_N) para problemas multigrupo é uma das mais tradicionais aproximações ao problema linear do transporte de nêutrons [18,19]. Essa formulação é baseada na descrição matemática do transporte de nêutrons em um número fixo M de direções prescritas (ordenas discretas) e na utilização de

conjuntos de quadraturas angulares para a aproximação dos termos de fonte de espalhamento e de fissão. A aproximação multigrupo tem por base a definição de G intervalos contíguos de energia (grupos de energia) nos quais são estimados valores médios dos parâmetros físico-materiais e definidos os momentos energéticos do fluxo angular de nêutrons.

Portanto, a formulação de ordenadas discretas para problemas multigrupo, pode ser identificada como uma transformação do problema íntegro-diferencial linear do transporte de nêutrons, definido no espaço de fase original (sete variáveis independentes) em um sistema de $G \times M$ equações diferenciais parciais lineares definido em um espaço de fase constituído por quatro variáveis independentes, sendo três associadas à posição dos nêutrons e uma variável temporal.

Métodos numéricos desempenham papel fundamental no contexto de ordenadas discretas [18,19]. Esses métodos propiciam a obtenção de um sistema de equações lineares e algébricas cujas variáveis dependentes são momentos espaciais do fluxo angular de nêutrons definidos em um conjunto discreto do espaço de fase a quatro variáveis independentes, para as M direções discretas e para os G grupos de energia em um instante de tempo t . Esses momentos são definidos através da formulação matemática utilizada pelo método numérico, envolvendo equações de balanço espacial e temporal, que são obtidas pela integração analítica das equações S_N multigrupo, e equações auxiliares, que prescrevem relações adicionais entre esses momentos. As equações de balanço e as equações auxiliares constituem um sistema de equações lineares e algébricas compatível com a utilização de técnicas numéricas relativamente simples e eficientes, se comparadas ao esforço para o desenvolvimento de métodos para solução do sistema de $G \times M$ equações S_N multigrupo definidas em (\vec{r}, t) .

Na seção 2.2, são derivadas as equações constitutivas do problema S_N multigrupo discretizado no espaço. Na seção 2.3, são apresentados os métodos e as técnicas numéricas para a solução dos sistemas de equações constitutivas referentes ao problema de fonte fixa.

2.2 Equações Constitutivas do Problema de Ordenadas Discretas Multigrupo Discretizado no Espaço.

As equações S_N multigrupo independentes do tempo definidas em um domínio bidimensional D , para geometria retangular e coordenadas Cartesianas, são da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{m,g}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \varphi_{m,g}(x, y) + \Sigma_{tg}(x, y) \varphi_{m,g}(x, y) = \\ = \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{4} \nu \Sigma_{fg'}(x, y) \left\{ \sum_{n=1}^M \omega_n \varphi_{n,g'}(x, y) \right\} + S_{m,g}(x, y) \quad ; \quad \text{para } m=1:M \text{ e } g=1:G, \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde $S_{m,g}(x, y)$ é o termo de fonte anisotrópica de espalhamento, M ($M = N(N+2)/2$) é o número de ordenadas discretas associado aos problemas com simetria polar e a um conjunto de quadratura angular de grau N com simetria de nível [18], (x, y) é um ponto do domínio bidimensional D e G é o número de grupos de energia. A notação utilizada na Eq. (2.1) é usual nas publicações especializadas [17-19]. A quantidade $\varphi_{m,g}(x, y)$ representa o fluxo angular de nêutrons, do grupo de energia g , que se deslocam na direção discreta (μ_m, η_m) no ponto (x, y) . O número ω_n representa o peso angular associado à direção (μ_m, η_m) . O parâmetro $\Sigma_{tg}(x, y)$ representa a seção de choque macroscópica total do grupo de energia g no ponto (x, y) , $\nu \Sigma_{fg'}(x, y)$ representa o produto do número médio de nêutrons gerados pela fissão causada por nêutrons do grupo de energia g pela seção de choque

macroscópica de fissão do grupo de energia g no ponto (x,y) . O parâmetro χ_g representa o espectro de fissão integrado no grupo de energia g e k_{eff} é o fator de multiplicação efetivo.

É apresentado a seguir, um método numérico determinístico que transforma o sistema de equações diferenciais parciais lineares de primeira ordem (2.1) em um sistema de equações lineares e algébricas cujas incógnitas são definidas em um conjunto discreto do espaço de fase bidimensional. Para tanto, é considerada uma grade de discretização espacial Ω definida no domínio bidimensional D . Essa grade é composta pela união de nodos retangulares contíguos $\Omega_{i,j}$. Cada nodo espacial $\Omega_{i,j}$ possui dimensões Δx_i e Δy_j definidas nas direções Cartesianas x e y , respectivamente. A fig. 2.1 mostra os elementos de definição de um nodo arbitrário pertencente à grade espacial Ω .

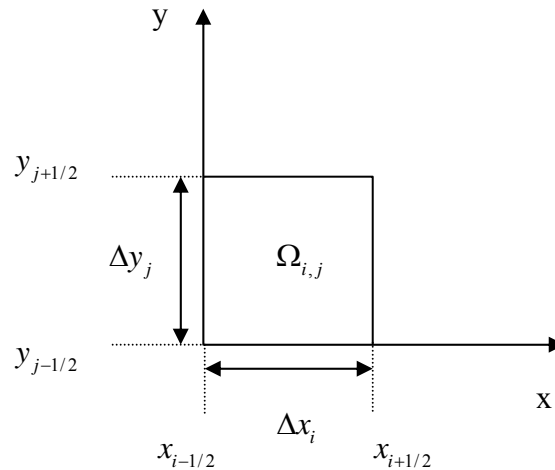


Figura 2.1 Elementos de definição de um nodo arbitrário $\Omega_{i,j}$

O conjunto discreto de definição é constituído pelas faces e áreas de todos os nodos espaciais pertencentes à grade de discretização espacial.

O método numérico utilizado neste trabalho é o tradicional método DD, cf. “Diamond Difference”, para problemas S_N multigrupo. Esse método numérico se

fundamenta em uma aproximação linear contínua para o fluxo angular de nêutrons, com desacoplamento angular e energético [18]. Para a obtenção das equações constitutivas do método numérico DD, a Eq. (2.1) é integrada em um nodo arbitrário $\Omega_{i,j}$, dividindo o resultado pela área do nodo. Como resultado obtêm-se as equações de balanço espacial para os momentos espaciais de ordem zero do fluxo angular de nêutrons, quais sejam,

$$\frac{\mu_m}{\Delta x_i} (\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} - \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}) + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} (\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} - \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}) + \sum_{ig}^{i,j} \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} = F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j} \quad , \quad (2.2)$$

onde

$$F_g^{i,j} \equiv \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{4} v \Sigma_{fg'}^{i,j} \left\{ \sum_{n=1}^M \omega_n \bar{\varphi}_{n,g'}^{i,j} \right\} \quad (2.3)$$

é a fonte média de fissão para o grupo de energia g , $S_{m,g}^{i,j}$ é a fonte anisotrópica média de espalhamento no nodo $\Omega_{i,j}$ e do grupo de energia g , $\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j}$ é o fluxo angular de nêutrons, do grupo de energia g , que se deslocam na direção discreta (μ_m, η_n) mediado nas faces $x_{i\pm 1/2}$; $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2}$ é o fluxo angular de nêutrons, do grupo de energia g , que se deslocam na direção discreta (μ_m, η_m) , mediado nas faces $y_{j\pm 1/2}$ e os parâmetros físico-materiais do nodo $\Omega_{i,j}$ são uniformes. A quantidade $\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j}$ é definida como o fluxo angular de nêutrons, do grupo de energia g , que se desloca na direção discreta (μ_m, η_m) mediado no nodo $\Omega_{i,j}$, i.e.,

$$\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} \equiv \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \varphi_{m,g}(x, y) dx dy \quad , \quad (2.4)$$

enquanto que

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j} \equiv \frac{1}{\Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \varphi_{m,g}(x_{i\pm 1/2}, y) dy$$

e

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2} \equiv \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi_{m,g}(x, y_{i\pm 1/2}) dx.$$

O sistema de equações (2.2) é constituído por $G \times M$ equações lineares e algébricas. O número de fluxos angulares médios de nêutrons em $\Omega_{i,j}$, $\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j}$, é igual ao número de direções discretas (M) vezes o número de grupos de energia (G), perfazendo um total de $G \times M$ fluxos angulares médios de nêutrons definidos em $\Omega_{i,j}$. Considerando que os fluxos angulares médios de nêutrons nas faces, $\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2}$, para as direções incidentes no nodo $\Omega_{i,j}$ são oriundos de fluxos angulares emergentes de nodos adjacentes ou oriundos de condições de contorno do problema S_N multigrupo, as incógnitas remanescentes são os fluxos angulares médios de nêutrons nas faces do nodo $\Omega_{i,j}$ para as direções discretas emergentes. Portanto, o número de incógnitas remanescentes é igual ao número de fluxos angulares médios de nêutrons nas faces para as direções emergentes do nodo $\Omega_{i,j}$. Para cada face tem-se $(G \times M)/2$ fluxos angulares emergentes, perfazendo um total de $2 \times G \times M$ incógnitas nas faces do nodo $\Omega_{i,j}$. Assim, o número total de incógnitas é igual a $3 \times G \times M$, caracterizando-se portanto um sistema indeterminado, pois o número de incógnitas ($3 \times G \times M$) é maior que o número de equações lineares e algébricas ($G \times M$).

O método numérico DD é caracterizado pela utilização de uma aproximação linear contínua para o fluxo angular de nêutrons mediado nas direções Cartesianas e pelo desacoplamento desse fluxo angular em direção discreta e grupo de energia [18]. Esse método numérico prescreve equações auxiliares da forma:

$$\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} \square \frac{1}{2} (\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} + \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}) \quad (2.5)$$

e

$$\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} \square \frac{1}{2} (\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}) ; \text{ para } m=1:M \text{ e } g = 1:G, \quad (2.6)$$

perfazendo um total de $2 \times G \times M$ equações auxiliares. Essas equações auxiliares são acrescidas às equações de balanço espacial, perfazendo um total de $3 \times G \times M$ equações lineares e algébricas nas $3 \times G \times M$ incógnitas, $\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j}$, $\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2}$. Estendendo-se essas considerações a todos os nodos definidos pela grade de discretização espacial Ω , obtêm-se as equações constitutivas do problema S_N multigrupo discretizado no espaço, perfazendo um total de $3 \times G \times M \times T$ equações lineares e algébricas, onde T é o número de nodos definido pela grade de discretização espacial Ω .

2.3 Solução Numérica do Problema de Ordenadas Discretas Multigrupo Discretizado no Espaço.

Nesta seção, são apresentados os métodos e os esquemas numéricos para a solução dos sistemas de equações constitutivas referentes ao problema de fonte fixa e também um algoritmo itemizado para o desenvolvimento de um código computacional de caráter específico.

2.3.1 Solução Numérica de Problema de Fonte Fixa.

O esquema iterativo utilizado neste trabalho para a convergência da solução numérica de problemas S_N multigrupo de fonte fixa é o tradicional método SI, cf. "source iteration" [17,18], onde, para uma varredura da grade de discretização espacial, são determinados os fluxos angulares médios de nêutrons nas faces dos nodos definidos pela

grade espacial e nas direções discretas emergentes do nodo, em função de estimativas da fonte média de fissão, da fonte anisotrópica média de espalhamento e de estimativas dos fluxos angulares de nêutrons nas faces dos nodos e nas correspondentes direções discretas incidentes no nodo.

Para compreensão da dinâmica de cálculo dos fluxos angulares emergentes, precisa-se definir o conceito de varredura da grade de discretização espacial para problemas bidimensionais. Tomando como referência o sistema de quadrantes e orientações cardeais ilustrado na fig 2.2, definem-se os quatro sentidos de percurso da grade de discretização espacial, a saber: SO→NE; SE→NO; NE → SO e NO→SE.

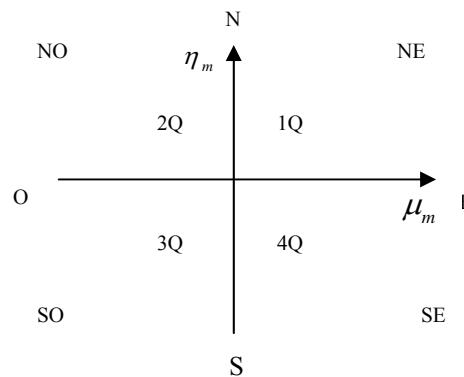


Figura 2.2 Definição dos quadrantes e orientações cardeais.

A cada um desses sentidos de percurso está associado o cálculo dos fluxos angulares emergentes em um correspondente quadrante. Para essa ordenação dos sentidos de percurso, são calculados os fluxos angulares emergentes em 1Q, 2Q, 3Q e 4Q respectivamente, para todos os nodos definidos pela grade de discretização espacial. Cada sentido de percurso é sempre efetuado fixando-se a linha e percorrendo-se as colunas de forma tal que o nodo de partida se situa na primeira ou na última linha da grade de

discretização espacial e na extremidade associada à primeira orientação cardinal de definição do sentido de percurso. A fig 2.3 mostra uma grade de discretização espacial arbitrária e os nodos de partida para cada sentido de percurso. Estabelecidos esses conceitos, é definida uma varredura da grade de discretização espacial como o conjunto de cálculos numéricos de transporte que fornecem as estimativas dos fluxos angulares emergentes do nodo para uma varredura da grade de discretização espacial.

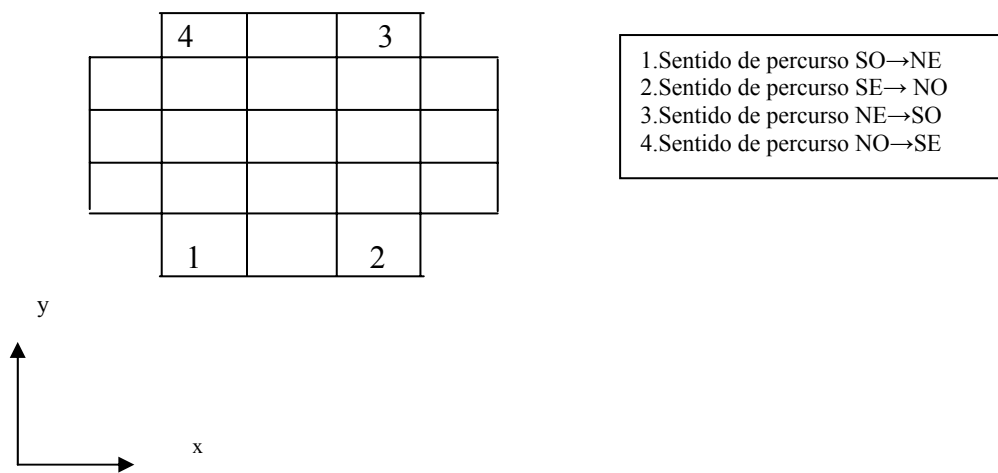


Figura 2.3 Nodos de partida para uma grade de discretização arbitrária.

São utilizados esse conceito de varredura de transporte e as equações constitutivas do método numérico DD para determinar as equações de varredura da grade de discretização espacial para o método iterativo SI. É considerado cada sentido de percurso e estabelecida uma associação conveniente entre as equações de balanço espacial e as equações auxiliares DD.

1) Sentido SO→NE

A este sentido de percurso está relacionado o cálculo dos fluxos angulares no quadrante 1Q. Tomando um nodo arbitrário da grade espacial, tem-se a configuração mostrada na fig 2.4.

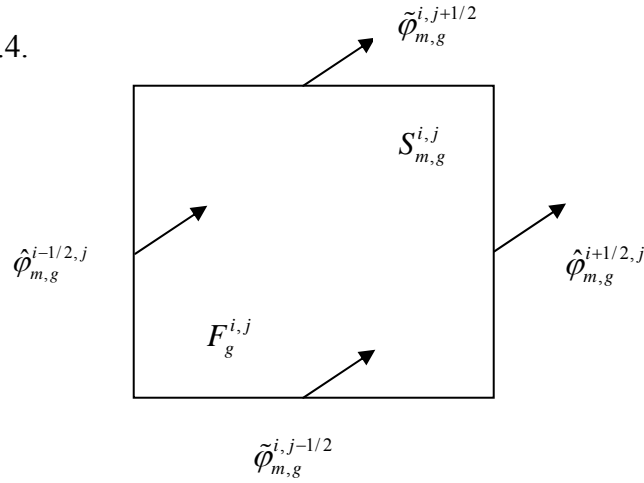


Figura 2.4 - Nodo arbitrário com os fluxos no sentido SO → NE (quadrante 1Q).

Para este sentido do percurso, os fluxos angulares emergentes são $\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$ para $g=1:G$, $\mu_m > 0$ e $\eta_m > 0$. Portanto, são associadas convenientemente as equações auxiliares DD às equações de balanço espacial para obterem-se esses fluxos angulares emergentes em um esquema SI.

a) Para a determinação de $\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j}$ com: $\mu_m > 0$, $\eta_m > 0$ e $g=1:G$.

Neste caso, são utilizadas as equações auxiliares para a substituição dos fluxos angulares médios no nodo $\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j}$ e para a eliminação dos fluxos angulares emergentes na face norte do nodo, $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$. Da Eq (2.6), obtêm-se que

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} = 2\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} - \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} \quad (2.7)$$

Substituindo a Eq. (2.5) na equação acima e a equação resultante, juntamente com a Eq. (2.5), na equação de balanço espacial (2.2), obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\mu_m}{\Delta x_i} (\hat{\phi}_{m,g}^{j+1/2,j} - \hat{\phi}_{m,g}^{j-1/2,j}) + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} (\hat{\phi}_{m,g}^{i+1/2,j} + \hat{\phi}_{m,g}^{i-1/2,j} - 2\tilde{\phi}_{m,g}^{i,j-1/2}) + \\ & + \frac{\sum_{t,g}^{i,j}}{2} (\hat{\phi}_{m,g}^{j+1/2,j} + \hat{\phi}_{m,g}^{j-1/2,j}) = F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j} ; \text{ para } \mu_m > 0, \eta_m > 0 \quad e \quad g=1:G. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Agrupando os termos em $\hat{\phi}_{m,g}^{i+1/2,j}$ e $\hat{\phi}_{m,g}^{i-1/2,j}$ tem-se:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\sum_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\phi}_{m,g}^{i+1/2,j} - \left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} - \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\sum_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\phi}_{m,g}^{i-1/2,j} - \\ & - \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \tilde{\phi}_{m,g}^{i,j-1/2} = F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j} . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Expressando este resultado para os fluxos angulares emergentes $\hat{\phi}_{m,g}^{i+1/2,j}$, obtêm-se, para $\mu_m > 0, \eta_m > 0$ e $g = 1:G$,

$$\hat{\phi}_{m,g}^{i+1/2,j} = \frac{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} - \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\sum_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\phi}_{m,g}^{i-1/2,j} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \tilde{\phi}_{m,g}^{i,j-1/2} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\sum_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.10)$$

determinando-se deste modo a equação de varredura de primeiro quadrante para os fluxos angulares médios emergentes do nodo $\Omega_{i,j}$ na face leste (2.10).

b) Para determinação de $\tilde{\phi}_{m,g}^{i,j+1/2}$ com $\mu_m > 0, \eta_m > 0, g=1:G$.

Neste caso, são utilizadas as equações auxiliares para a substituição dos fluxos angulares médios no nodo $\bar{\varphi}_{m,g}^{ij}$ e para a eliminação dos fluxos angulares emergentes na face leste do nodo $\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j}$. Da Eq. (2.5), obtêm-se que

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} = 2\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j} - \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} . \quad (2.11)$$

Substituindo a Eq.(2.6) na equação acima e a equação resultante, juntamente com a Eq. (2.6), na equação de balanço espacial (2.2), obtêm-se :

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{\Delta x_i} (\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} - 2\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}) + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} (\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} - \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}) + \\ + \frac{\sum_{tg}^{i,j}}{2} (\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}) = F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j} \end{aligned} ; \text{ para } \mu_m > 0, \eta_m > 0, g = 1:G. \quad (2.12)$$

Agrupando-se os termos em $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}$ tem-se:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\sum_{tg}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} - \left(-\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\sum_{tg}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} - \\ - \frac{2\mu_m}{\Delta x_i} \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} = F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Expressando este resultado em termos dos fluxos angulares emergentes $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$, obtêm-se para $\mu_m > 0, \eta_m > 0$ e $g = 1:G$,

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} = \frac{\left(-\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\sum_{tg}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} + \frac{2\mu_m}{\Delta x_i} \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\sum_{tg}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.14)$$

determinando-se deste modo a equação de varredura de primeiro quadrante para os fluxos angulares médios emergentes do nodo $\Omega_{i,j}$ na face norte .

As Eqs. (2.10) e (2.14) são utilizadas para a obtenção dos fluxos angulares emergentes no primeiro quadrante. Para este sentido de percurso, o nodo de partida é o primeiro nodo da primeira linha da grade de discretização espacial (fig 2.3). Fixando-se sucessivamente as linhas e percorrendo-se as colunas, obtêm-se, através da condição de continuidade dos fluxos angulares nas faces, os valores atualizados dos fluxos angulares emergentes para todos os nodos da grade espacial, para todas as direções discretas ($\mu_m > 0$, $\eta_m > 0$) e para todos os grupos de energia.

Em total analogia ao sentido de percurso SO→NE, obtêm-se as equações de varredura para os outros sentidos de percurso, como segue.

2) Sentido SE→NO

A este sentido de percurso está relacionado o cálculo dos fluxos angulares emergentes no quadrante 2Q. Tomando um nodo arbitrário da grade espacial, tem-se a configuração mostrada na fig. 2.5.

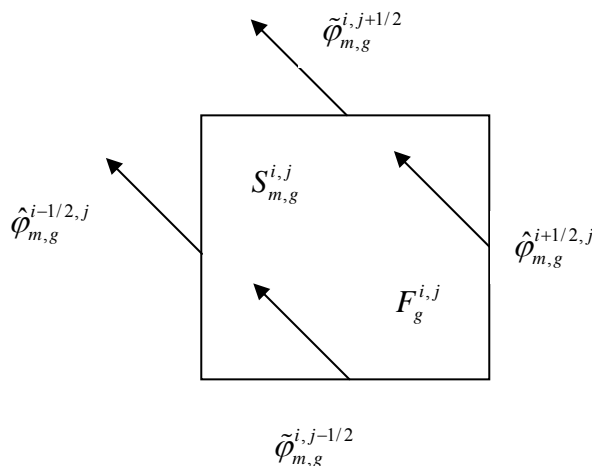


Figura 2.5 Nodo arbitrário com os fluxos no sentido SE→NO (quadrante 2Q)

Para este sentido de percurso, os fluxos angulares emergentes são $\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$ para $g=1:G$, $\mu_m < 0$ e $\eta_m > 0$, cujas equações de varredura são, respectivamente,

a) Para a determinação de $\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}$ com $\mu_m < 0$, $\eta_m > 0$ e $g = 1:G$.

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} = \frac{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} - \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.15)$$

b) Para a determinação de $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2}$

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} = \frac{\left(-\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} + \frac{2|\mu_m|}{\Delta x_i} \hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.16)$$

3) Sentido NE→SO

A este sentido de percurso está relacionado o cálculo dos fluxos angulares emergentes no quadrante 3Q. Tomando um nodo arbitrário da grade espacial, tem-se a configuração mostrada na fig.2.6.

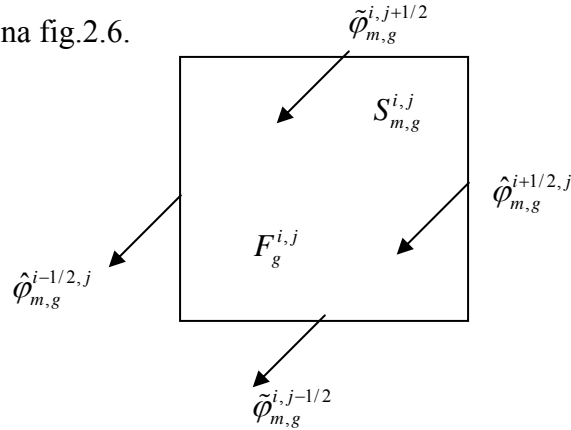


Figura 2.6 Nodo arbitrário com os fluxos no sentido NE → SO (quadrante 3Q)

Para este sentido de percurso, os fluxos angulares emergentes são $\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}$; para $g = 1$: G , $\mu_m < 0$ e $\eta_m < 0$, cujas equações de varredura são respectivamente,

a) Para a determinação de $\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j}$ com $\mu_m < 0$ e $\eta_m < 0$ e $g = 1$: G .

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} = \frac{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} - \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} + \frac{2|\eta_m|}{\Delta y_j} \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.17)$$

b) Para a determinação de $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}$ com $\mu_m < 0$ e $\eta_m < 0$ e $g = 1$: G .

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} = \frac{\left(-\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + \frac{2|\mu_m|}{\Delta x_i} \hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{|\mu_m|}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.18)$$

4) Sentido NO → SE.

A esse sentido de percurso está relacionado o cálculo dos fluxos angulares emergentes no quadrante 4Q. Tomando um nodo arbitrário de grade espacial, tem-se a configuração mostrada na fig. 2.7.

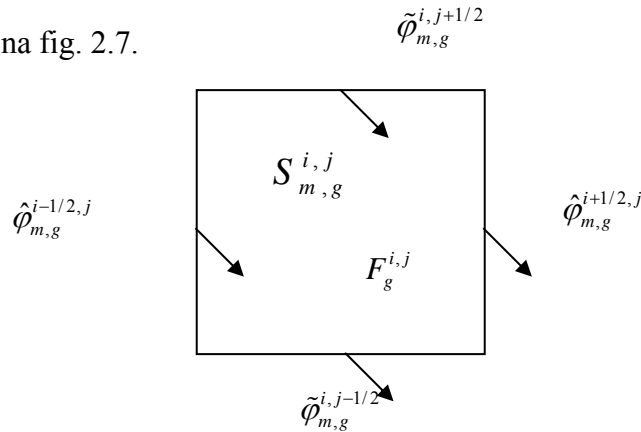


Figura 2.7 - Nodo arbitrário com os fluxos no sentido NO → SE (quadrante 4Q)

Para este sentido de percurso, os fluxos angulares emergentes são $\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j}$ e $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}$ para $g = 1 : G$, $\mu_m > 0$ e $\eta_m < 0$, cujas equações de varredura são, respectivamente,

a) Para a determinação de $\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j}$ com $\mu_m > 0$, $\eta_m < 0$ e $g = 1 : G$.

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} = \frac{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} - \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} + \frac{2|\eta_m|}{\Delta y_j} \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.19)$$

b) Para a determinação de $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2}$ com $\mu_m > 0$, $\eta_m < 0$ e $g = 1 : G$.

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} = \frac{\left(-\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} - \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right) \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} + \frac{2\mu_m}{\Delta x_i} \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} + F_g^{i,j} + S_{m,g}^{i,j}}{\left(\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{|\eta_m|}{\Delta y_j} + \frac{\Sigma_{t,g}^{i,j}}{2} \right)} \quad (2.20)$$

As equações de varredura do método numérico SI fornecem as estimativas dos fluxos angulares médios de nêutrons nas faces dos nodos definidos pela grade de discretização espacial e nas direções discretas emergentes dos nodos, para todos os grupos de energia. Para cada varredura de transporte e cada grupo de energia, são resolvidas essas equações tomando-se estimativas das fontes angulares de espalhamento, dos fluxos angulares médios nas faces dos nodos e nas direções incidentes nos nodos que correspondem aos fluxos emergentes no esquema SI e os valores da fonte média de fissão.

Os fluxos angulares incidentes são obtidos através de condições de continuidade dos fluxos angulares médios nas faces ou através das condições de contorno do problema de ordenadas discretas. As fontes de espalhamento são recalculadas para toda varredura de transporte utilizando-se os fluxos angulares médios nas faces e as equações auxiliares DD para a determinação dos fluxos angulares médios nos nodos definidos pela grade de discretização espacial.

A seguir são apresentados dois tipos de condições de contorno para o fluxo angular de nêutrons em problemas de ordenadas discretas multigrupo. A Fig 2.8 mostra um nodo espacial com uma indicação dos tipos de condições utilizadas neste trabalho:

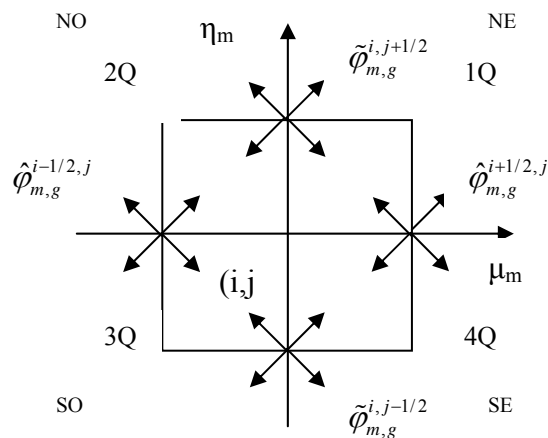


Figura 2.8 Indicação dos tipos de condições de contorno em problemas S_N multigrupo.

1) Condição de contorno do tipo vácuo.

1.a) face norte

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2} = 0 ; \text{ para } \eta_m < 0.$$

1.b) face sul

$$\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2} = 0 ; \text{ para } \eta_m > 0.$$

1.c) face oeste

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j} = 0 ; \text{ para } \mu_m > 0.$$

1.d) face leste

$$\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j} = 0 ; \text{ para } \mu_m < 0.$$

2) Condição de contorno do tipo reflexivo especular (1/2 ou 1/4 do domínio D).

2.a) faces norte e sul

Neste caso, $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2}$; para o par (μ_m, η_m) é posto igual a $\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j\pm 1/2}$; para o par $(\mu_m, -\eta_m)$.

2.b) faces leste e oeste

Neste caso, $\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j}$; para o par (μ_m, η_m) é posto igual a $\hat{\varphi}_{m,g}^{i\pm 1/2,j}$; para o par $(-\mu_m, \eta_m)$.

Para uma iteração do método SI, i.e., G varreduras de transporte, calculam-se os fluxos escalares em todas as faces nos nodos definidos pela grade de discretização espacial e comparam-se esses fluxos com os obtidos na iteração anterior. Essa comparação deve satisfazer um critério de convergência. O critério de convergência requer à norma máxima discreta do vetor desvio relativo percentual para os fluxos escalares de grupo nas faces dos nodos entre duas estimativas consecutivas um valor inferior a um número convergente.

2.3.2-Solução Numérica Dominante de Problemas de Autovalor.

O método numérico utilizado para a determinação da solução numérica dominante de problemas de autovalor S_N multigrupo é o tradicional método de potência [20], largamente empregado em problemas de autovalor na teoria de difusão. Esse método iterativo utiliza as propriedades positivas do espectro de autovalores do operador S_N multigrupo de forma a determinar a solução dominante e unicamente não-negativa dessa classe de problemas. A dinâmica de cálculo é fundamentada na obtenção de subseqüentes estimativas da solução numérica dominante (fluxo e autovalor) através das iterações de potência. Estas iterações podem ser compactamente expressas por

$$\begin{aligned} & \frac{\mu_m}{\Delta x_i} \left(\hat{\varphi}_{m,g}^{i+1/2,j,(p+1)} - \hat{\varphi}_{m,g}^{i-1/2,j,(p+1)} \right) + \frac{\eta_m}{\Delta y_j} \left(\tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j+1/2,(p+1)} - \tilde{\varphi}_{m,g}^{i,j-1/2,(p+1)} \right) + \sum_{t,g}^{i,j} \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p+1)} = \\ & = S_{m,g}^{i,j,(p+1)} + F_g^{i,j,(p)} ; \quad m = 1 : M \quad e \quad g = 1 : G. \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde:

$$F_g^{i,j,(p)} \equiv \frac{\chi_g}{k_{eff}^{(p)}} \sum_{g'=1}^G \frac{1}{4} \nu_{fg'}^{i,j} \left\{ \sum_{n=1}^M \omega_n \bar{\varphi}_{n,g'}^{i,j,(p)} \right\}. \quad (2.22)$$

Em função de uma estimativa de iteração de potência (p) para a fonte média de fissão, determina-se uma estimativa da solução numérica dominante para $\bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p+1)}$ através do método numérico descritos na subseção anterior. Estimativas do autovalor fundamental podem ser obtidas através da preservação das taxas de fissão, i.e.,

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_{eff}^{(p+1)}} \sum_{i,j} \left(\sum_{g=1}^G \nu_{fg}^{i,j} \left\{ \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p+1)} \right\} \right) \Delta x_i \Delta y_j &= \\ &= \frac{1}{k_{eff}^{(p)}} \sum_{i,j} \left(\sum_{g=1}^G \nu_{fg}^{i,j} \left\{ \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p)} \right\} \right) \Delta x_i \Delta y_j \quad , \end{aligned} \quad (2.23)$$

de onde obtêm-se que

$$k_{eff}^{(p+1)} = k_{eff}^{(p)} \frac{\sum_{i,j} \left(\sum_{g=1}^G \nu_{fg}^{i,j} \left\{ \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p+1)} \right\} \right) \Delta x_i \Delta y_j}{\sum_{i,j} \left(\sum_{g=1}^G \nu_{fg}^{i,j} \left\{ \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\varphi}_{m,g}^{i,j,(p)} \right\} \right) \Delta x_i \Delta y_j} \quad . \quad (2.24)$$

Para uma iteração de potência, calculam-se os fluxos escalares de grupo em todas as faces dos nodos definidos pela grade de discretização espacial e determina-se uma estimativa do autovalor dominante. Essas estimativas são comparadas com as obtidas na iteração de potência anterior e devem satisfazer critérios de convergência. O critério de

convergência para o autovalor dominante requer ao desvio relativo percentual entre duas estimativas consecutivas um valor inferior a um número de convergência. O critério de convergência para a autofunção numérica dominante requer à norma máxima discreta do vetor desvio relativo percentual para os fluxos escalares de grupo nas faces dos nodos entre duas iterações de potência consecutivas um valor inferior a um número de convergência.

2.3.3. Etapas do Cálculo Numérico de Ordenadas Discretas e Algoritmo Itemizado.

Nesta subseção é apresentado um algoritmo itemizado com as etapas do cálculo numérico de ordenadas discretas com as principais características do programa computacional desenvolvido. Este algoritmo itemizado e simplificado permite a opção para a solução numérica de uma ou outra classe de problemas de ordenadas discretas tratada neste trabalho.

1. Leitura dos parâmetros de entrada não-indexados.
2. Cálculo dos ponteiros associados aos parâmetros de entrada indexados.
3. Leitura dos parâmetros de entrada indexados.
4. Cálculo dos ponteiros associados às variáveis indexadas.
5. Inicialização das variáveis indexadas.
6. Bloco de iterações internas (problema de fonte fixa).

- 6.1. Execução das varreduras de transporte.
- 6.2. Cálculo de estimativas dos fluxos escalares de grupo nas interfaces dos nodos.
- 6.3. Teste de convergência. Caso positivo, vá para 7.
- 6.4. Cálculo de estimativas das fontes anisotrópicas de espalhamento.

- 6.5. Vá para 6.1.
7. Cálculo de estimativas das fontes de fissão nos nodos.
8. Cálculo de estimativa do autovalor dominante.
9. Teste de convergência para o autovalor. Caso positivo e exclusivo, vá para 12.
10. Teste de convergência para os fluxos escalares de grupo nas interfaces dos nodos (iteração de potência). Caso positivo, vá para 12.
11. Vá para 7.

12. Cálculo da distribuição da densidade média de potência, fluxo médio no nodo, fluxo médio nas faces, corrente média nas faces e corrente média nos cantos.
13. Gravação em arquivos dos resultados finais de interesse.
14. Fim.

Baseado neste algoritmo itemizado e simplificado, foi desenvolvido um programa computacional de caráter específico para a solução numérica de problemas de ordenadas discretas multigrupo definidos em um domínio bidimensional, geometria retangular e coordenadas Cartesianas. Foram considerados problemas S_N multigrupo que consideram a fonte anisotrópica de espalhamento com aproximação até P_3 e que utilizam conjuntos de

quadraturas angulares pares com simetria de nível [17]. O programa desenvolvido apresenta opções para os esquemas iterativos interno e externo, opções para os tipos de condições de contorno condicionadas e à escolha do tipo de simetria geométrico-angular.

CAPÍTULO 3

HOMOGENEIZAÇÃO E COLAPSAÇÃO

Neste capítulo são apresentadas expressões para cálculo das médias dos parâmetros nucleares (seções de choque, coeficiente de difusão, fluxos de nêutrons e correntes líquidas), decorrentes da homogeneização espacial de uma região de interesse. Também são apresentadas as expressões dos parâmetros nucleares médios, colapsados em grupos de energia.

Para o processo de homogeneização espacial é usada a distribuição de fluxo de nêutrons, na região a ser homogeneizada, obtida através da solução numérica da equação de transporte de nêutrons, de acordo com o método apresentado no capítulo 2.

Na fig. 3.1, onde estão representados elementos combustíveis com suas respectivas células homogeneizadas (combustível, buraco d'água e barra de controle) e as regiões do baffle e refletor, também estão indicadas as posições iniciais (x_l^m e y_l^k) e finais (x_r^m e y_r^k) que delimitam uma região (k,m) a ser homogeneizada, no caso, exemplo, um elemento combustível.

Cabe ressaltar que o fluxo de nêutrons, solução da equação de transporte, é um valor médio em cada uma das células (i, j) da configuração usada nos cálculos de fluxo.

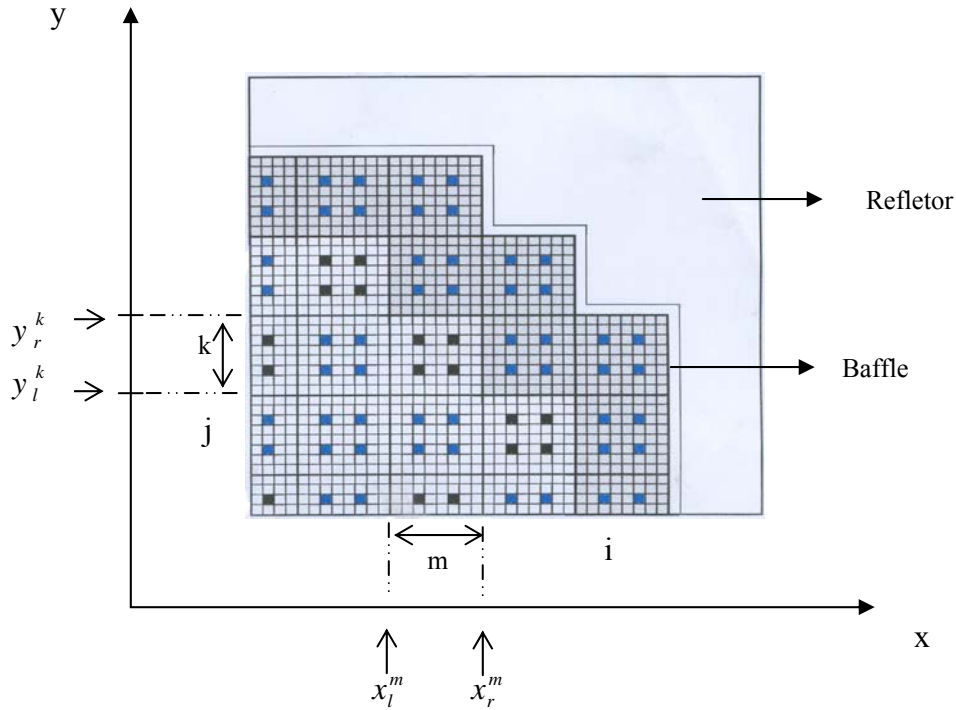


Fig. 3.1 Representação de ¼ de núcleo (Global) heterogêneo

3.1 Homogeneização Espacial

Para a homogeneização espacial de uma região de interesse, na configuração usada no cálculo da distribuição do fluxo de nêutrons, como por exemplo, a região (k,m) da fig. 3.1, foi adotado o método convencional de homogeneização [21]. Neste método as seções de choque são médias ponderadas no fluxo de nêutrons, com integrais na área da região a ser homogeneizada. Sendo assim, as seguintes expressões decorrem do processo de homogeneização.

3.1.1 Fluxo Médio na Região de Interesse

O fluxo médio na região (k,m) é uma simples média na área desta região, ou seja,

$$\bar{\phi}_g^{k,m} \equiv \frac{\int_{x_l^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} \phi_g(x, y) dx dy}{\int_{x_l^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} dx dy} = \frac{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \phi_g(x, y) dx dy}{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dx dy} = \frac{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \bar{\phi}_g^{i,j} \Delta x_i \Delta y_j}{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \Delta x_i \Delta y_j}, \quad (3.1)$$

onde $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ e $\Delta y_j = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$ são as dimensões da célula (i,j) nas direções x e y, respectivamente, enquanto que

$$\bar{\phi}_g^{i,j} \equiv \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \phi_g(x, y) dx dy, \quad (3.2)$$

com $\bar{\phi}_g^{i,j}$ obtido da solução da equação de transporte de nêutrons, usando o método apresentado no capítulo 2.

3.1.2 Seções de Choque Médias na Região de Interesse

Como mencionado anteriormente, as seções de choque médias são obtidas, no processo de homogeneização espacial, através de médias ponderadas no fluxo de nêutrons, da seguinte forma:

$$\bar{\Sigma}_{xg}^{k,m} \equiv \frac{\int_{x_i^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} \Sigma_{xg}(x, y) \phi_g(x, y) dx dy}{\int_{x_i^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} \phi_g(x, y) dx dy} = \frac{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \Sigma_{xg}^{tipo(i,j)} \bar{\phi}_g^{i,j} \Delta x_i \Delta y_j}{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \bar{\phi}_g^{i,j} \Delta x_i \Delta y_j}, \quad (3.3)$$

onde tipo(i, j) é o tipo (combustível, buraco d'água ou barra de controle) da célula (i, j), enquanto que Σ_{xg} representa Σ_{ag} , $\nu \Sigma_{fg}$ ou Σ_{trg} .

E ainda, para a seção de choque de espalhamento,

$$\bar{\Sigma}_{gg'}^{k,m} \equiv \frac{\int_{x_i^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, y) \phi_{g'}(x, y) dx dy}{\int_{x_i^m}^{x_r^m} \int_{y_l^k}^{y_r^k} \phi_{g'}(x, y) dx dy} = \frac{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \Sigma_s^{g' \rightarrow g; tipo(i,j)} \bar{\phi}_{g'}^{i,j} \Delta x_i \Delta y_j}{\sum_{i \in m} \sum_{j \in k} \bar{\phi}_{g'}^{i,j} \Delta x_i \Delta y_j}, \quad (3.4)$$

3.1.3 Fluxos e Correntes Médias nas Faces da Região de Interesse

As expressões para os fluxos médios ($\bar{\psi}_{gus}^{k,m}$) e correntes médias ($\bar{J}_{gus}^{k,m}$) nas faces (l, esquerda em x e abaixo em y e r, direita em x e acima em y) da região (k,m) são simples médias ao longo dessas faces, como se segue,

$$\bar{\psi}_{gxs}^{k,m} \equiv \frac{\int_{y_l^k}^{y_r^k} \phi_g(x_s^m, y) dy}{\int_{y_l^k}^{y_r^k} dy} = \frac{\sum_{j \in k} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \phi_g(x_s^m, y) dy}{\sum_{j \in k} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy} = \frac{\sum_{j \in k} \phi_g^{i \pm 1/2, j} \Delta y_j}{\sum_{j \in k} \Delta y_j}, \quad (3.5)$$

onde $x_s^m = x_l^m$ ou x_r^m , enquanto que

$$\phi_g^{i \pm 1/2, j} \equiv \frac{1}{\Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \phi_g(x_s^m, y) dy ; \text{ com } x_s^m = \begin{cases} i-1/2 & \text{se } s=l \\ i+1/2 & \text{se } s=r \end{cases} \quad (3.6)$$

são os fluxos médios nas faces, das células (i, j), que compõem a face em x_s^m da região

(k,m).

$$\bar{\psi}_{gys}^{k,m} \equiv \frac{\int_{x_l^m}^{x_r^m} \phi_g(x, y_s^k) dx}{\int_{x_l^m}^{x_r^m} dx} = \frac{\sum_{i \in m} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi_g(x, y_s^k) dx}{\sum_{i \in m} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx} = \frac{\sum_{i \in m} \phi_g^{i, j \pm 1/2} \Delta x_i}{\sum_{i \in m} \Delta x_i} \quad (3.7)$$

onde $y_s^k = y_l^k$ ou y_r^k , enquanto que

$$\phi_g^{i, j \pm 1/2} = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi_g(x, y_s^k) dx ; \text{ com } y_s^k = \begin{cases} j-1/2 & \text{se } s=l \\ j+1/2 & \text{se } s=r \end{cases} \quad (3.8)$$

são os fluxos médios nas faces, das células (i,j), que compõem a face em y_s^k da região

(k,m).

$$\bar{J}_{gxs}^{k,m} \equiv \frac{\int_{y_l^k}^{y_r^k} J_g(x_s^m, y) dy}{\int_{y_l^k}^{y_r^k} dy} = \frac{\sum_{j \in k} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} J_g(x_s^m, y) dy}{\sum_{j \in k} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy} = \frac{\sum_{j \in k} J_g^{i \pm 1/2, j} \Delta y_j}{\sum_{j \in k} \Delta y_j}, \quad (3.9)$$

onde as correntes médias nas faces das células (i,j), que compõem a face em x_s^m da região (k,m), são assim definidas:

$$J_g^{i\pm 1/2,j} \equiv \frac{1}{\Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} J_g(x_s^m, y) dy ; \text{ com } x_s^m = \begin{cases} i-1/2 & \text{se } s=l \\ i+1/2 & \text{se } s=r \end{cases} . \quad (3.10)$$

$$\bar{J}_{gys}^{k,m} \equiv \frac{\int_{x_l^m}^{x_r^m} J_g(x, y_s^k) dx}{\int_{x_l^m}^{x_r^m} dx} = \frac{\sum_{i \in m} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} J_g(x, y_s^k) dx}{\sum_{i \in m} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx} = \frac{\sum_{i \in m} J_g^{i,j\pm 1/2} \Delta x_i}{\sum_{i \in m} \Delta x_i} , \quad (3.11)$$

onde as correntes médias nas faces das células (i,j), que compõem a face em y_s^m da região (k, m), são assim definidas:

$$J_g^{i,j\pm 1/2} \equiv \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} J_g(x, y_s^k) dx ; \text{ com } y_s^k = \begin{cases} j-1/2 & \text{se } s=l \\ j+1/2 & \text{se } s=r \end{cases} . \quad (3.12)$$

Cabe ressaltar que os fluxos e as correntes médias nas faces das células (i,j) também são obtidas à partir da solução da equação de transporte de nêutrons, usando o método apresentado no capítulo 2, para cálculo do fluxo angular de nêutrons.

3.2 Colapso em Grupos de Energia.

As expressões para os parâmetros nucleares (seções de choque, coeficientes de difusão, fluxos de nêutrons e correntes) colapsados em grupos de energia são as seguintes:

- Para o fluxo de nêutrons:

$$\bar{\phi}_G^{k,m} \equiv \sum_{g \in G} \bar{\phi}_g^{k,m} , \quad (3.13)$$

$$\bar{\psi}_{Gxs}^{k,m} \equiv \sum_{g \in G} \bar{\psi}_{gxs}^{k,m} \quad ; \quad \text{para } s = l, r \quad (3.14)$$

e

$$\bar{\psi}_{Gys}^{k,m} \equiv \sum_{g \in G} \bar{\psi}_{gys}^{k,m} \quad ; \quad \text{para } s = l, r \quad (3.15)$$

- Para as correntes líquidas:

$$\bar{J}_{Gxs}^{k,m} \equiv \sum_{g \in G} \bar{J}_{gxs}^{k,m} \quad ; \quad \text{para } s = l, r \quad (3.16)$$

e

$$\bar{J}_{Gys}^{k,m} \equiv \sum_{g \in G} \bar{J}_{gys}^{k,m} \quad ; \quad \text{para } s = l, r. \quad (3.17)$$

- Para as seções de choque:

$$\bar{\Sigma}_{xG}^{k,m} \equiv \frac{\sum_{g \in G} \bar{\Sigma}_{xg}^{k,m} \bar{\phi}_g^{k,m}}{\bar{\phi}_G^{k,m}} \quad , \quad (3.18)$$

com $\bar{\Sigma}_{xg}$ representando Σ_{ag} , $\nu \Sigma_{fg}$ ou Σ_{rg} . E para a seção de choque de espalhamento

$$\bar{\Sigma}_{GG'}^{k,m} \equiv \frac{\sum_{g' \in G'} \sum_{g \in G} \bar{\Sigma}_{GG'}^{k,m} \bar{\phi}_{g'}^{k,m}}{\bar{\phi}_{G'}^{k,m}} \quad . \quad (3.19)$$

Cabe ressaltar que o coeficiente de difusão médio na região (k,m), para o grupo G, é definido usando a seção de choque macroscópica de transporte no grupo G, ou seja,

$$\bar{D}_G^{k,m} \equiv \frac{1}{3\bar{\Sigma}_{trG}^{k,m}} \quad . \quad (3.20)$$

Observa-se, ainda, que os parâmetros definidos neste capítulo são usados para o cálculo dos fatores de descontinuidade, em cada uma das faces da região (k,m), conforme a metodologia apresentada no próximo capítulo.

CAPÍTULO 4

FATORES DE DESCONTINUIDADE

Neste capítulo é apresentada a definição dos fatores de descontinuidade [9,22], é dada uma justificativa para o uso destes fatores nos métodos nodais modernos e mostrado o modo de calculá-los. Para o cálculo dos fatores de descontinuidade tomou-se como base, neste trabalho de dissertação, o Método de Expansão Nodal (NEM) [6,24], do qual pode-se obter os fluxos médios nas faces das regiões homogeneizadas.

Cabe ressaltar que os parâmetros nucleares médios nas regiões homogeneizadas (seções de choque, coeficientes de difusão, fluxos de nêutrons e correntes líquidas), usados na formulação apresentada neste capítulo, são aqueles obtidos com a metodologia apresentada no capítulo 3.

4.1 Definição dos Fatores de Descontinuidade

Nos cálculos globais de reatores nucleares, muitos métodos nodais partem da equação da continuidade de nêutrons. Então, para núcleos com elementos combustíveis heterogêneos conforme mostrado na figura 3.1, a equação da continuidade [23] para problemas bidimensionais, em geometria cartesiana e para dois grupos de energia, pode ser assim escrita:

$$\begin{aligned} \sum_{u=x,y} \frac{\partial}{\partial u} J_{gu}^{het}(x,y) + \sum_{ig}^{het}(x,y) \phi_g^{het}(x,y) &= \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \sum_{fg'}^{het}(x,y) \phi_{g'}^{het}(x,y) + \\ &+ \sum_{g'=1}^2 \sum_{gg'}^{het}(x,y) \phi_{g'}^{het}(x,y) \end{aligned} \quad (4.1)$$

Integrando a equação (4.1) na área de uma região n, por exemplo a região (k,m) indicada na figura 3.1, obtém-se que:

$$\sum_{u=x,y} \frac{1}{a_u^n} (\bar{J}_{gur}^n - \bar{J}_{gul}^n) + \bar{\Sigma}_{tg}^n \bar{\phi}_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n \quad (4.2)$$

onde:

$$\bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n} \int_{x_l^n}^{x_r^n} \int_{y_l^n}^{y_r^n} \phi_g^{het}(x, y) dx dy, \quad (4.3)$$

$$\bar{\Sigma}_{xg}^n \bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n} \int_{x_l^n}^{x_r^n} \int_{y_l^n}^{y_r^n} \Sigma_{xg}^{het}(x, y) \phi_g^{het}(x, y) dx dy, \quad (4.4)$$

$$\bar{J}_{gus}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} \int_{v_l^n}^{v_r^n} J_{gu}^{het}(u_s^n, v) dv, \text{ para } u = x, y \text{ e } s = l, r, \quad (4.5)$$

enquanto que $a_u^n \equiv u_r^n - u_l^n$. Observa-se que $\bar{\Sigma}_{xg}^n$ (com $\Sigma_{xg} = \Sigma_{tg} + \nu \Sigma_{fg}$ ou Σ_{gg}), $\bar{\phi}_g^n$ e \bar{J}_{gus}^n são os mesmos parâmetros definidos no capítulo 3.

Mas para núcleos com elementos combustíveis homogeneizados, a equação da continuidade de nêutrons para problemas bidimensionais, em geometria cartesiana e para dois grupos de energia, pode ser assim escrita:

$$\begin{aligned} & \sum_{u=x,y} \frac{\partial}{\partial u} J_{gu}^{hom}(x, y) + \Sigma_{tg}^{hom}(x, y) \phi_g^{hom}(x, y) = \\ & = \frac{1}{\hat{k}_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^{hom}(x, y) \phi_{g'}^{hom}(x, y) + \sum_{g'=1}^2 \Sigma_{gg'}^{hom}(x, y) \phi_{g'}^{hom}(x, y) \end{aligned} \quad (4.6)$$

com $\Sigma_{xg}^{hom}(x, y) = \hat{\Sigma}_{xg}^n$; para (x, y) pertencente a região n.

Integrando a equação (4.6) na área da região n, obtém-se que

$$\sum_{u=x,y} \frac{1}{a_u^n} (\hat{J}_{gur}^n - \hat{J}_{gul}^n) + \hat{\Sigma}_{tg}^n \hat{\phi}_g^n = \frac{1}{\hat{k}_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \hat{\Sigma}_{fg'}^n \hat{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \hat{\Sigma}_{gg'}^n \hat{\phi}_{g'}^n \quad (4.7)$$

onde:

$$\hat{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n} \int_{x_i^n}^{x_r^n} \int_{y_i^n}^{y_r^n} \phi_g^{\text{hom}}(x, y) dx dy \quad (4.8)$$

e

$$\hat{J}_{gus}^n \equiv \hat{J}_{gu}^n(u_s^u) ; \text{ para } u = x, y \text{ e } s = 1, r \quad (4.9)$$

com

$$\hat{J}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} \int_{v_i^n}^{v_r^n} J_{gu}^{\text{hom}}(u, v) dv . \quad (4.10)$$

Para que a equação (4.7), conforme exige a Teoria da Equivalência [22], reproduza os mesmos resultados da equação (4.2), ou seja, para se ter

i) $\hat{k}_{eff} = k_{eff}$

ii) $\hat{\phi}_g^n = \bar{\phi}_g^n$

iii) $\hat{J}_{gus}^n = \bar{J}_{gus}^n$

é preciso que os parâmetros $\hat{\Sigma}_{xg}^n$ também sejam iguais às seções de choque médias $\bar{\Sigma}_{xg}^n$, preservando assim as taxas de reações, uma vez que ter-se-ia

$$\hat{\Sigma}_{xg}^n \hat{\phi}_g^n a_x^n a_y^n = \int_{x_l^n}^{x_r^n} \int_{y_l^n}^{y_r^n} \Sigma_{xg}^{het}(x, y) \phi_g^{het}(x, y) dx dy.$$

No entanto, o acoplamento entre $J_{gu}^{hom}(x, y)$ e $\phi_g^{hom}(x, y)$ é feito através da Lei de Fick, qual seja,

$$J_{gu}^{hom}(x, y) = -D_g(x, y) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g^{hom}(x, y) ; \text{ para } u = x, y . \quad (4.11)$$

Usando, então, a equação (4.11) na equação (4.10), obtém-se que

$$\hat{J}_{gu}^n(u) \equiv -D_{gu}^n(u) \frac{d}{du} \hat{\psi}_{gu}^n(u) , \quad (4.12)$$

com

$$\hat{\psi}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} \int_{v_l^n}^{v_r^n} \phi_g^{hom}(u, v) dv . \quad (4.13)$$

Uma equação que governa para a função $\hat{\psi}_{gu}^n(u)$ pode ser obtida integrando-se a equação (4.6), na direção transversal à direção u , e fazendo-se uso da equação (4.12), o que resulta em

$$\begin{aligned} -\frac{d}{du} \left(D_g^n(u) \frac{d}{du} \hat{\psi}_{gu}^n(u) \right) + \hat{\Sigma}_{tg}^n \hat{\psi}_{gu}^n(u) &= \frac{1}{\hat{k}_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \hat{\Sigma}_{fg'}^n \hat{\psi}_{g'u}^n(u) + \\ + \sum_{g'=1}^2 \Sigma_{gg'}^n \hat{\psi}_{g'u}^n(u) - \hat{L}_{gu}^n(u) \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde $\hat{L}_{gu}^n(u)$, o termo de fuga transversal à direção u , é assim definido:

$$\hat{L}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} \int_{v_l^n}^{v_r^n} \frac{\partial}{\partial v} J_{gv}^{\text{hom}}(u, v) dv. \quad (4.15)$$

Mas, de acordo com as equações (4.8) e (4.13), observa-se que

$$\frac{1}{a_u^n} \int_{u_l^n}^{u_r^n} \hat{\psi}_{gu}^n(u) du = \frac{1}{a_u^n a_v^n} \int_{u_l^n}^{u_r^n} \int_{v_l^n}^{v_r^n} \phi_g^{\text{hom}}(u, v) dudv \equiv \hat{\phi}_g^n, \quad (4.16)$$

logo, da integração da equação (4.14) em u e fazendo uso da equação (4.16), segue que

$$\begin{aligned} & - \left(D_{gur}^n \frac{d}{du} \hat{\psi}_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_l^n} - D_{gul}^n \frac{d}{du} \hat{\psi}_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_r^n} \right) / a_u^n + \hat{\Sigma}_{tg}^n \hat{\phi}_g^n = \\ & = \frac{1}{\hat{k}_{eff}^n} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \hat{\Sigma}_{fg'}^n \hat{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \hat{\Sigma}_{gg'}^n \hat{\phi}_{g'}^n - (\hat{J}_{gvr}^n - \hat{J}_{gvl}^n) / a_v^n, \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde $D_{gus}^n \equiv D_g^n(u_s^n)$.

Para que a exigência da Teoria de Equivalência seja mantida, ou seja, a equação (4.17) também reproduza a mesma solução da equação (4.2), k_{eff}^n e $\bar{\phi}_g^n$, deve-se ter

$\hat{\Sigma}_{xg}^n = \bar{\Sigma}_{xg}^n$, $\hat{J}_{gvs}^n = \bar{J}_{gvs}^n$ e ainda

$$D_{gus}^n = - \frac{\bar{J}_{gus}^n}{\frac{d}{du} \bar{\psi}_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_s^n}} \quad (4.18)$$

com

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} \int_{v_l^n}^{v_r^n} \phi_g^{het}(u, v) dv. \quad (4.19)$$

Como conseqüência disto, segue das equações (4.3), (4.16) e (4.19) que

$$\frac{1}{a_u^n} \int_{u_l^n}^{u_r^n} \hat{\psi}_g^n(u) du \equiv \hat{\phi}_g^n = \bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{a_u^n} \int_{u_l^n}^{u_r^n} \bar{\psi}_g^n(u) du. \quad (4.20)$$

Mas, na prática, $D_g(x, y)$ na equação (4.11) é feito igual a um valor constante \bar{D}_g^n

, para (x, y) pertencente à região n , como por exemplo, $\bar{D}_g^n = \frac{1}{3\bar{\Sigma}_{trg}^n}$, onde:

$$\bar{\Sigma}_{trg}^n \equiv \frac{\int_{x_l^n}^{x_r^n} \int_{y_l^n}^{y_r^n} \Sigma_{trg}^{het}(x, y) \phi_g^{het}(x, y) dx dy}{\int_{x_l^n}^{x_r^n} \int_{y_l^n}^{y_r^n} \phi_g^{het}(x, y) dx dy}.$$

Sendo assim, tanto $D_g^n(u)$ quanto D_{gus}^n são iguais a \bar{D}_g^n ; para $u = x, y$ e $s = l, r$. Isto implica que a razão definida na equação (4.18) seja a mesma para todas as faces da região n , o que não ocorre, por exemplo, se a região n for um elemento combustível com uma das faces voltada para o refletor. Sendo assim, mesmo que $\hat{\Sigma}_{xg}^n = \bar{\Sigma}_{xg}^n$, $\hat{k}_{eff} = k_{eff}$ e $J_{gv}^{het}(u, v)$ seja usado na equação (4.15), no lugar de $J_{gv}^{hom}(u, v)$, para calcular $\hat{L}_{gu}^n(u)$, a solução da equação (4.14), com $D_g^n(u) = \bar{D}_g^n$ e continuidade de fluxo nas interfaces entre diferentes regiões, como por exemplo,

$$\hat{\psi}_{gur}^n = \hat{\psi}_{gul}^{n+1} \quad (4.21)$$

não é possível mais preservar a igualdade da equação (4.20), e, conseqüentemente, não atende a Teoria da Equivalência.

Então, com o objetivo de manter a igualdade da equação (4.20), apenas a condição de continuidade de fluxo nas interfaces entre diferentes regiões é relaxada [9], na solução da equação (4.14), e para tal, define-se fatores de descontinuidade f_{gus}^n de modo que:

$$f_{gus}^n \hat{\psi}_{gus}^n = \bar{\psi}_{gus}^n \quad (4.22)$$

Com isso, a condição de continuidade de fluxo, conforme está na equação (4.21), que continua mantida para $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$, mas torna-se, para $\hat{\psi}_{gu}^n(u)$, da seguinte forma:

$$f_{gur}^n \hat{\psi}_{gur}^n = f_{gul}^{n+1} \hat{\psi}_{gul}^{n+1} \quad (4.23)$$

Fatores de descontinuidade, obtidos através da equação (4.22) e parâmetros $\bar{\Sigma}_{xg}^n$ e \bar{D}_g^n , calculados com a metodologia apresentada no capítulo 3, quando usados em cálculos nodais de núcleos com elementos combustíveis homogeneizados, fazem com que os resultados destes cálculos reproduzam k_{eff} , $\bar{\phi}_g^n$ e \bar{J}_{gus}^n do cálculo do núcleo com elementos combustíveis heterogêneos.

Na próxima seção é apresentada a metodologia usada no cálculo dos fluxos $\hat{\psi}_{gus}^n$ e, conseqüentemente, dos fatores de descontinuidade, de acordo com a equação (4.22).

4.2 Cálculo dos Fatores de Descontinuidade.

Uma vez conhecidos os resultados de algum cálculo com elementos combustíveis heterogêneos, é possível obter através do chamado problema de um único nodo (por

exemplo, um elemento combustível homogeneizado), os fluxos (homogêneos) médios nas faces deste nodo ($\hat{\psi}_{gus}^n$; $u = x, y$ e $s = l, r$) e, conseqüentemente, os respectivos fatores de descontinuidade (f_{gus}^n).

Então, dados o fluxo médio no nodo ($\bar{\phi}_g^n$), os fluxos ($\bar{\psi}_{gus}^n$) e correntes líquidas (\bar{J}_{gus}^n) médios nas faces do nodo, as correntes líquidas nos quatro cantos do nodo ($J_{gu}^n(x_l, y_s)$ e $J_{gu}^n(x_r, y_s)$; $s = l, r$ e $u = x, y$), os parâmetros nucleares médios caracterizando este nodo ($\bar{D}_g^n, \bar{\Sigma}_{tg}^n, \nu \bar{\Sigma}_{fg}^n$ e $\bar{\Sigma}_{gg}^n$) e o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}), todos decorrentes do cálculo heterogêneo, um método nodal pode ser usado para calcular $\hat{\psi}_{gus}^n$.

Neste trabalho de dissertação adotou-se o Método de Expansão Nodal (NEM) [8,9] para resolver a equação da difusão integrada transversalmente, que governa $\hat{\psi}_{gu}^n(u)$, qual seja,

$$\begin{aligned}
 -\bar{D}_g^n \frac{d^2}{du^2} \hat{\psi}_{gu}^n(u) + \bar{\Sigma}_{tg}^n \hat{\psi}_{gu}^n(u) &= \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \hat{\psi}_{g'u}^n(u) + \\
 + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \hat{\psi}_{g'}^n(u) - \hat{L}_{gu}^n(u) &
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

onde $\hat{\psi}_{gu}^n(u)$ e $\hat{L}_{gu}^n(u)$, segundo o método NEM, são expansões polinomiais da seguinte forma:

$$\hat{\psi}_{gu}^n(u) = \bar{\phi}_g^n + \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \tag{4.25}$$

e

$$\hat{L}_{gu}^n(u) = \bar{L}_{gu}^n + \sum_{k=1}^2 \alpha_{kgu}^n h_k(u/a_u^n), \quad (4.26)$$

com

$$h_1(\xi) = 2\xi - 1$$

$$h_2(\xi) = 6\xi(1 - \xi) - 1$$

$$h_3(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(2\xi - 1)$$

e

$$h_4(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(5\xi^2 - 5\xi + 1),$$

sendo $\xi \equiv u/a_u^n$ para $u = x, y$.

Os coeficientes da expansão de $\hat{L}_{gu}^n(u)$ são obtidos a partir dos resultados do cálculo heterogêneo, da seguinte forma:

$$\bar{L}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n} (\bar{J}_{gvr}^n - J_{gvl}^n); v \neq u \text{ e } u = x, y, \quad (4.27)$$

$$\alpha_{1gu}^n = \frac{1}{2} (L_{gur}^n - L_{gul}^n) \quad (4.28)$$

e

$$\alpha_{2gu}^n = \bar{L}_{gu}^n - \frac{1}{2}(L_{gur}^n + L_{gul}^n), \quad (4.29)$$

com

$$L_{gus}^n \equiv \frac{1}{\alpha_v^n} \left[J_{gv}^n(u_s^n, v_r^n) - J_{gv}^n(u_s^n, v_l^n) \right]; \quad v \neq u \quad \text{e} \quad u = x, y, \quad (4.30)$$

onde $u_s^n = 0$ para $s = 1$ $u_s^n = a_u^n$ para $s = r$.

Já os coeficientes da expansão de $\hat{\psi}_{gu}^n(u)$ são obtidos através de um processo iterativo, uma vez que estes coeficientes são calculados em função de $\hat{\psi}_{gus}^n$ da seguinte forma:

$$c_{1gu}^n = \frac{1}{2}(\hat{\psi}_{gur}^n - \hat{\psi}_{gul}^n) \quad (4.31)$$

e

$$c_{2gu}^n = \bar{\phi}_g^n - \frac{1}{2}(\hat{\psi}_{gur}^n + \hat{\psi}_{gul}^n); \quad u = x, y, \quad (4.32)$$

enquanto que os coeficientes c_{3gu}^n e c_{4gu}^n são calculados substituindo as equações (4.25) e (4.26) na equação (4.24) e usando uma técnica de resíduos ponderados, donde obtém-se, para $k = 3$ e 4 :

$$c_{k1u}^n = (b_{22,u}^n s_{1u}^n - b_{12,u}^n s_{2u}^n) / B_u^n \quad (4.33)$$

e

$$c_{k2u}^n = (b_{11,u}^n s_{2u}^n - b_{21,u}^n s_{1u}^n) / B_u^n, \quad (4.34)$$

onde

$$B_u^n \equiv b_{11,u}^n b_{22,u}^n - b_{12,u}^n b_{21,u}^n, \quad (4.35)$$

com

$$b_{gg,u}^n \equiv d_{gu}^n + \frac{1}{5} \beta_{gg}^n; \quad g = 1, 2, \quad (4.36)$$

$$b_{gg',u}^n \equiv -\frac{1}{5} \beta_{gg'}^n; \quad g' \neq g \text{ e } g = 1, 2 \quad (4.37)$$

e

$$s_{gu}^n \equiv \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \sqrt{\bar{\Sigma}_{fg'}^n} c_{1g'u}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n c_{1g'u}^n - \bar{\Sigma}_{tg}^n c_{1gu}^n - \alpha_{1gu}^n \right), \quad (4.38)$$

para o cálculo de c_{3gu}^n e

$$b_{gg,u}^n \equiv d_{gu}^n + \frac{3}{35} \beta_{gg}^n; \quad g = 1, 2, \quad (4.39)$$

$$b_{gg',u}^n \equiv -\frac{3}{35} \beta_{gg'}^n; \quad g' \neq g \text{ e } g = 1, 2 \quad (4.40)$$

e

$$s_{gu}^n \equiv \frac{1}{5} (\bar{\Sigma}_{tg}^n c_{2gu}^n + \alpha_{2gu}^n - \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \bar{\Sigma}_{fg'}^n c_{2g'u}^n - \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n c_{2g'u}^n), \quad (4.41)$$

para o cálculo de c_{4gu}^n , sendo:

$$\beta_{gg}^n \equiv \bar{\Sigma}_{tg}^n - (\bar{\Sigma}_{gg}^n + \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg}^n); \quad g = 1, 2, \quad (4.42)$$

$$\beta_{gg'}^n \equiv \bar{\Sigma}_{gg'}^n + \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg'}^n; \quad g' = g \text{ e } g = 1, 2 \quad (4.43)$$

e

$$d_{gu}^n \equiv 12 \bar{D}_g^n / (a_u^n)^2; \quad u = x, y \quad (4.44)$$

Mas o método NEM [6] trabalha com correntes parciais ($\hat{J}_{gus}^{\pm n}$), das quais, segundo a aproximação da difusão, obtém-se que

$$\hat{\psi}_{gus}^n = 2(\hat{J}_{gus}^{+n} + \hat{J}_{gus}^{-n}); \quad s = l, r \text{ e } u = x, y. \quad (4.45)$$

Além disso, o método NEM faz uso da Lei de Fick, qual seja,

$$\hat{J}_{gus}^{+n} - \hat{J}_{gus}^{-n} = -\bar{D}_g^n \frac{d}{du} \hat{\psi}_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_s^n},$$

que juntamente com as equações (4.25), (4.31), (4.32) e (4.45), fornece as correntes parciais de saída do nodo (\hat{J}_{gul}^{-n} e \hat{J}_{gur}^{+n}) em função das correntes parciais de entrada no nodo

(\hat{J}_{gul}^{+n} e \hat{J}_{gur}^{-n}), ou seja,

$$\hat{J}_{gul}^{-n} = A_{0gu}^n (\bar{\phi}_g^n + c_{4gu}^n) + A_{1gu}^n \hat{J}_{gul}^{+n} + A_{2gu}^n \hat{J}_{gur}^{-n} - A_{3gu}^n c_{3gu}^n \quad (4.46)$$

e

$$\hat{J}_{gur}^{+n} = A_{0gu}^n (\bar{\phi}_g^n + c_{4gu}^n) + A_{2gu}^n \hat{J}_{gul}^{+n} + A_{1gu}^n \hat{J}_{gur}^{-n} + A_{3gu}^n c_{3gu}^n, \quad (4.47)$$

com

$$A_{0gu}^n \equiv 6(\bar{D}_g^n / a_u^n) / (1 + 12(\bar{D}_g^n / a_u^n)), \quad (4.48)$$

$$A_{1gu}^n \equiv (1 - 48(\bar{D}_g^n / a_u^n)^2) / (\{1 + 12(\bar{D}_g^n / a_u^n)\} \{1 + 4(\bar{D}_g^n / a_u^n)\}), \quad (4.49)$$

$$A_{2gu}^n \equiv -8(\bar{D}_g^n / a_u^n) / (\{1 + 12(\bar{D}_g^n / a_u^n)\} \{1 + 4(\bar{D}_g^n / a_u^n)\}) \quad (4.50)$$

e

$$A_{3gu}^n \equiv 6(\bar{D}_g^n / a_u^n) / (1 + 4(\bar{D}_g^n / a_u^n)). \quad (4.51)$$

Já que as correntes parciais de entrada são obtidas de tal modo a preservar as correntes líquidas do cálculo heterogêneo, ou seja,

$$\hat{J}_{gul}^{+n} = \hat{J}_{gul}^{-n} + \bar{J}_{gul}^n \quad (4.52)$$

e

$$\hat{J}_{gur}^{-n} = \hat{J}_{gur}^{+n} - \bar{J}_{gur}^n. \quad (4.53)$$

Com esse conjunto de equações é possível escrever um processo iterativo para obter $\hat{\psi}_{gus}^n$ e, conseqüentemente, os fatores de descontinuidade, conforme descrito a seguir.

- 1) Inicializa-se $\hat{\psi}_{gus}^n$ e as correntes parciais de saída do nodo.
- 2) Calculam-se os coeficientes A_{kgu}^n ; $k = 0, 3$, de acordo com as equações (4.48-51).
- 3) Calculam-se $\beta_{gg'}^n$, e d_{gu}^n ; $g' = 1, 2$ e $g = 1, 2$, de acordo com as equações (4.42-44).
- 4) Calculam-se $\bar{L}_{gu}^n, L_{gus}^n$ e α_{kgu}^n ; $k = 1, 2$, de acordo com as equações (4.27-30).
- 5) Atualizam-se as correntes parciais de entrada no nodo, de acordo com as equações (4.51) e (4.52).
- 6) Calcula-se $\hat{\psi}_{gus}^n$, de acordo com a equação (4.45).
- 7) Testa-se a convergência em $\hat{\psi}_{gus}^n$.

Se não houver convergência, então:

- 8) Calcula-se c_{kgu}^n ; $k = 1, 2$, de acordo com as equações (4.31) e (4.32).
- 9) Calcula-se c_{kgu}^n ; $k = 3, 4$, de acordo com as equações (4.33 - 41).
- 10) Calcula-se as correntes parciais de saída do nodo, de acordo com as equações (4.46) e (4.47).
- 11) Retorna-se ao item 5.

Se houver convergência então:

- 12) Termina-se o processo iterativo de cálculo de $\hat{\psi}_{gus}^n$ e
- 13) Calcula-se f_{gus}^n , a partir da equação (4.22).

CAPÍTULO 5

APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados e analisados os resultados dos cálculos da homogeneização baseados nos procedimentos desenvolvidos neste trabalho.

O núcleo do reator para o qual se deseja homogeneizar os elementos combustíveis e as regiões compostas do “baffle” mais o refletor é mostrado na fig. 5.1. Os elementos combustíveis que compõem este núcleo possuem dimensão $12 \times 12 \text{ cm}^2$ e são formados por uma malha de 8×8 células com $1,5 \times 1,5 \text{ cm}^2$ de dimensão cada célula.

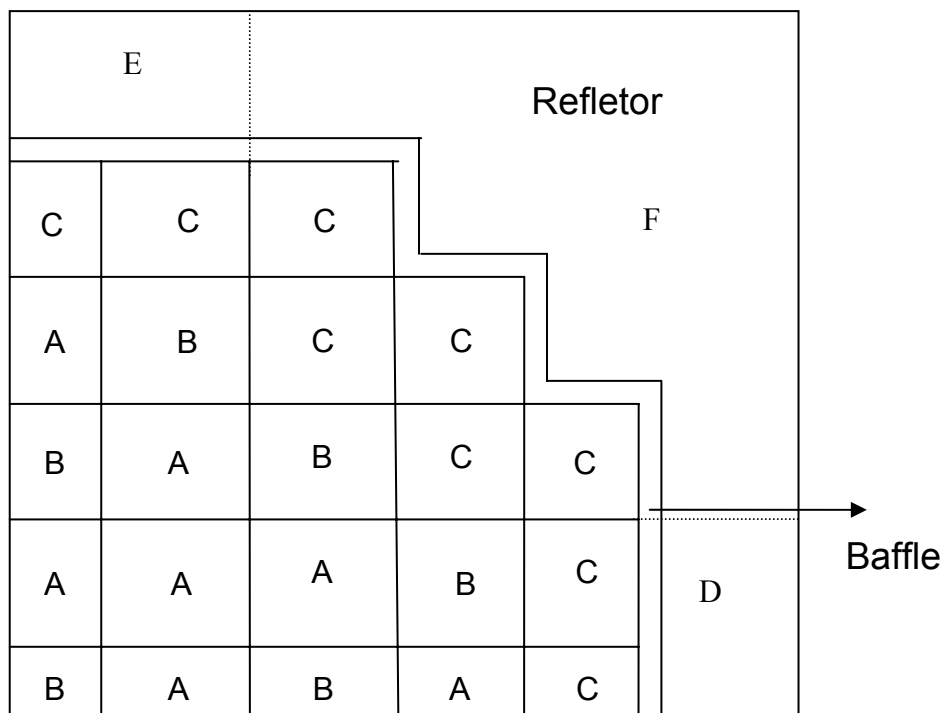


Figura 5.1 – Núcleo do Reator Heterogêneo

Os três diferentes tipos de elementos combustíveis do núcleo são mostrados na fig. 5.2, onde A representa o elemento combustível de baixo enriquecimento, com buraco de água, B representa o elemento combustível de baixo enriquecimento, com barra de controle, e C representa o elemento combustível de alto enriquecimento, com buraco de água.

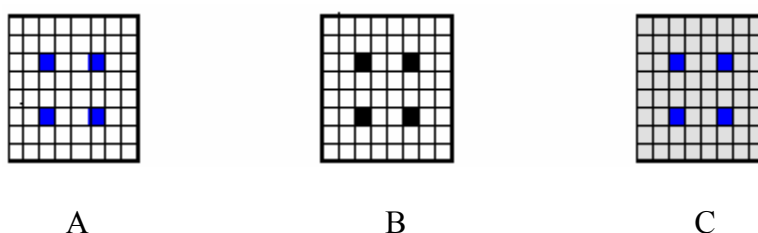


Figura 5.2 – Diferentes tipos de elementos combustíveis.

Os parâmetros nucleares das células que compõem os elementos combustíveis (combustíveis de alto e de baixo enriquecimento, buraco de água e barra de controle), do “baffle” e do refletor são apresentados na tabela 5.1.

Os cálculos de homogeneização, usando o procedimento desenvolvido neste trabalho, foram feitos tanto para geometrias espectrais [6] de um único elemento combustível (os chamados cálculos de “único assembly”) quanto para geometrias espectrais com mais de um elemento combustível (os chamados cálculos de “multiassembly”).

Já os cálculos de homogeneização, usando os resultados dos cálculos globais para 1/4 de núcleo, foram utilizados como dados de referência. Estes cálculos globais foram realizados para as configurações do núcleo com e sem barras de controle inseridas, mas somente o caso com barras de controle será apresentado.

Tabela 5.1 – Parâmetros Nucleares

Tipo de célula	g	$\Sigma_{tg} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\nu\Sigma_{fg} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\gamma\Sigma_{fg} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+1} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
Combustível de baixo enriquecimento	1	0.1282051	0.008120	0.002900	0.063305	0.061000
	2	0.3030303	0.000600	0.000250	0.239780	0.061000
	3	0.3968254	0.007919	0.003300	0.312525	0.061999
	4	0.9523810	0.088799	0.003799	0.882381	–
Combustível de alto enriquecimento	1	0.1282051	0.008120	0.002900	0.063305	0.061000
	2	0.3030303	0.000696	0.000290	0.239740	0.061000
	3	0.3968254	0.009119	0.003799	0.313025	0.061000
	4	0.9523810	0.124800	0.055199	0.866380	–
Buraco de água	1	0.1010101	–	–	0.022770	0.078000
	2	0.2777778	–	–	0.177761	0.100000
	3	0.4694836	–	–	0.368983	0.098999
	4	1.282051	–	–	1.255051	–
Barra de controle	1	0.1388889	–	–	0.065188	0.071999
	2	0.3030303	–	–	0.240330	0.055000
	3	0.5291005	–	–	0.381100	0.048999
	4	1.587302	–	–	1.047302	–
Baffle	1	0.1851852	–	–	0.181585	0.002600
	2	0.3546099	–	–	0.350439	0.003400
	3	0.8771930	–	–	0.865892	0.003100
	4	0.9259259	–	–	0.815925	–
Refletor	1	0.1282051	–	–	0.043855	0.083999
	2	0.2380952	–	–	0.128069	0.110000
	3	0.3968254	–	–	0.265525	0.130000
	4	1.388889	–	–	1.360889	–

Os cálculos de transporte de “único assembly” foram feitos para as três geometrias espectrais mostradas na fig. 5.2, utilizando-se S_4 , malha 3x3 em cada célula que compõe o

elemento combustível e condição de corrente líquida nula em todo o contorno do elemento combustível.

Para os cálculos de “multiassembly” o núcleo que está sendo usado nos permite a formação de 22 geometrias espectrais e na fig. 5.3 é mostrada uma dessas geometrias (composta apenas por elementos combustíveis). Observa-se que a condição de contorno para este problema é de corrente líquida nula em todas as faces da geometria espectral.

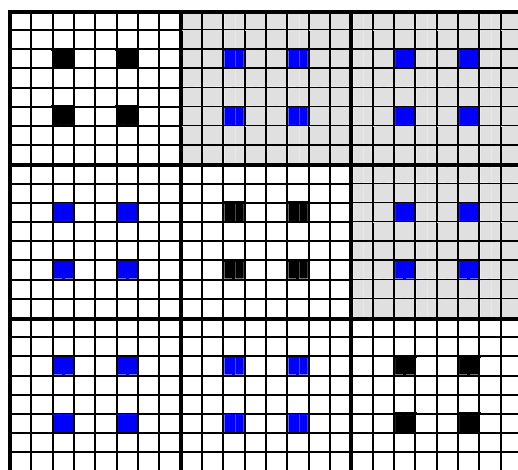


Figura 5.3 – Geometria espectral para cálculo de “multiassembly”.

Um outro exemplo de geometria espectral é mostrado na fig. 5.4. Nesta geometria, composta de elementos combustíveis, “baffle” e refletor, as condições de contorno são do tipo vácuo na face direita e corrente líquida nula nas demais faces.

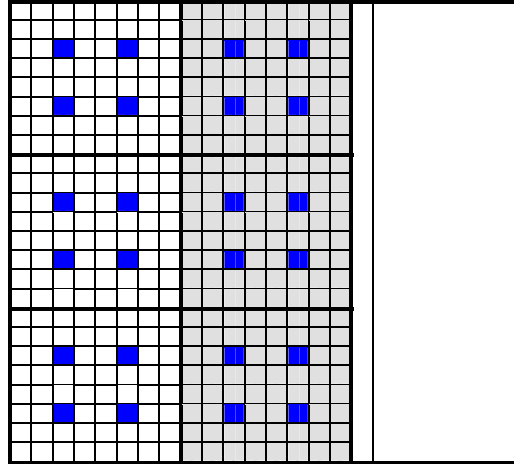


Figura 5.4 – Outra geometria espectral para cálculo de “multiassembly”.

Os cálculos de “multiassembly” são feitos com o intuito de melhorar as condições de contorno dos elementos combustíveis que estão sendo homogeneizados, em relação ao cálculo de “único assembly” para o qual a condição de contorno é de corrente líquida nula. Por isso, a homogeneização usando os cálculos de “multiassembly” é do elemento combustível que se encontra no centro da geometria espectral.

Para a homogeneização das regiões compostas por “baffle” mais refletor, os cálculos de “multiassembly” devem ser realizados obrigatoriamente, pois cálculo de “único assembly” não se aplica neste caso. No caso do reator utilizado neste trabalho, três geometrias espectrais foram escolhidas para a homogeneização de “baffle” mais refletor. Uma delas é mostrada na fig. 5.4 e representa as regiões D e E indicadas na fig. 5.1. A terceira geometria espectral representa a região F, também indicada na fig. 5.1, e é mostrada na fig. 5.5.

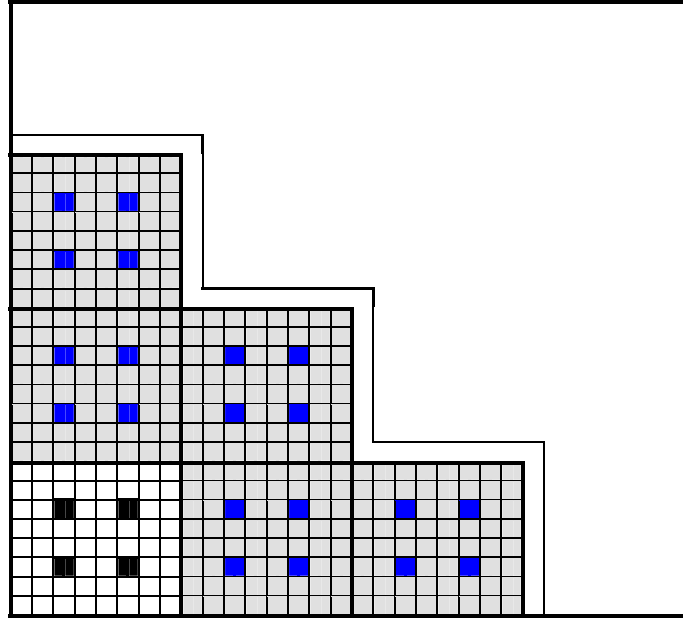


Figura 5.5 – Geometria para Homogeneização do “Baffle” mais Refletor.

Observa-se que as condições de contorno para o problema da fig. 5.5 são vácuo nas faces superior e direita e corrente líquida nula nas faces inferior e esquerda.

Da mesma forma que para os cálculos de “único assembly”, nos cálculos de “multiassembly” realizados foram usados S_4 , malha 3x3 em cada célula dos elementos combustíveis e para o “baffle” e o refletor malhas com as mesmas dimensões que aquelas das células dos elementos combustíveis. Ou seja, em todos os cálculos de transporte realizados (globais, “único assembly” e “multiassembly”) a malha foi uniforme nas duas dimensões, com $\Delta_x = \Delta_y = 0,5 \text{ cm}$.

Para efeito de comparação dos resultados obtidos, foram utilizadas as seguintes expressões para os desvios relativos percentuais (DP):

$$DP_1 = \frac{Assembly - Global}{Global} \times 100\%$$

Σ_{a2}	D_2			0,07	0,03	DP1	
				0,03	0,02	DP2	
tipo do EC				C			
$v\Sigma_{f2}$				0,10			
				0,06	0,03	0,05	0,02
				0,03	0,01	0,04	0,00
		B		C		C	
				-0,06	0,10	0,08	
				0,01	0,05	0,01	
		0,05	0,03	0,09	0,05	0,30	-0,04
		0,01	0,00	0,01	0,01	-0,09	0,01
		A		A		B	
						0,04	0,02
						0,01	0,00
		0,08		0,16		-0,06	0,07
		0,01		0,02		0,02	0,01
0,65	-0,07	0,07	0,04	0,62	-0,07	0,13	0,07
-0,13	0,01	0,02	0,01	-0,07	0,01	0,02	0,01
B		A		B		A	
						0,01	0,01
						-0,02	-0,01
						C	
						0,02	
						-0,03	

Figura 5.7 – Desvios Relativos Percentuais para o Grupo 2

Dos resultados apresentados na fig. 5.6, nota-se que os maiores desvios, em relação aos valores de referência, são para as seções de choque de espalhamento dos elementos combustíveis do tipo B, tanto para geometria espectral de “único assembly” quanto para geometria espectral de “multiassembly”. Os coeficientes de difusão, também para este tipo de elemento combustível, apresentam menores desvios para geometria espectral de “único assembly” do que para a geometria de “multiassembly”, o mesmo acontecendo para a seção de choque de espalhamento, com exceção do terceiro elemento combustível da primeira linha da fig. 5.6.

Para todos os elementos combustíveis do tipo C os desvios relativos percentuais foram menores para geometria espectral “multiassembly”.

Para este núcleo que possui barras de controle inseridas, os resultados obtidos, tanto para o grupo 1 quanto para o grupo 2, foram bastante interessantes, mostrando uma boa concordância entre os valores obtidos com as diferentes geometrias espectrais e aqueles obtidos usando os cálculos globais.

Σ_{a1}	D_1				1,39	-0,92	DP1		
	tipo do EC				-0,01	0,01	DP2		
						C			
Σ_{21}	$v\Sigma_{f1}$				2,22	-0,39			
					-0,02	0,00			
				0,62	0,24	1,97	-0,86	1,38	-0,95
				1,08	-0,44	0,90	-0,37	-0,58	0,24
			A			C		C	
				0,94	0,07	2,92	0,24	2,23	-0,47
				1,63	0,08	1,36	0,14	-0,87	-0,09
		0,58	-0,24	0,58	-0,24	0,65	-0,26	1,67	-0,92
		0,58	-0,24	0,74	-0,30	1,24	-0,52	-0,03	0,01
		A		A		A		C	
		0,88	0,05	0,87	0,05	1,00	0,05	2,61	-0,15
		0,88	0,05	1,12	0,07	1,88	0,08	-0,05	-0,00
0,58	-0,24	0,58	-0,24	0,58	-0,24	0,62	-0,25	1,67	-0,97
0,58	-0,24	0,58	-0,24	0,58	-0,24	1,08	-0,45	-0,37	0,15
A		A		A		A		C	
0,88	0,05	0,88	0,05	0,88	0,05	0,94	0,05	2,61	-0,15
0,88	0,05	0,88	0,05	0,88	0,05	1,64	0,08	-0,56	-0,06

Figura 5.8 – Desvios Relativos Percentuais para o Grupo 1

Σ_{a2}	D_2					0,03	0,02	DP1	
	tipo do EC					0,02	0,01	DP2	
								C	
						0,05			
						0,04			
				0,07	0,03	-0,03	-0,01	0,02	0,01
				0,02	0,01	0,02	0,01	-0,01	-0,00
				A				C	C
				0,11		-0,04		0,03	
				0,03		0,02		-0,01	
		0,02	0,01	0,02	0,01	0,07	0,03	-0,02	-0,01
		0,02	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01	0,00	-0,00
		A		A		A		C	
		0,03		0,03		0,12		-0,03	
		0,03		0,03		0,03		-0,00	
0,02	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01	0,05	0,02	-0,03	-0,01
0,02	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01	-0,01	-0,01
A		A		A		A		C	
0,03		0,03		0,03		0,08		-0,04	
0,03		0,03		0,03		0,03		-0,02	

Figura 5.9 – Desvios Relativos Percentuais para o Grupo 2

Dos resultados apresentados na fig. 5.8, nota-se que os maiores desvios, assim como para o núcleo com barra de controle, são para as seções de choque de espalhamento, porém, nesse caso, esses valores são dos elementos combustíveis do tipo C, tanto para geometria espectral de “único assembly” quanto para geometria espectral de “multiassembly”.

Os elementos combustíveis do tipo C apresentam também uma melhora nos resultados para a geometria multiassembly em relação à geometria de “único assembly”, já os elementos combustíveis do tipo A apresentam melhores resultados para geometrias de “único assembly” ou valores iguais para DP1 e DP2 quanto apresentam vizinhanças com a

mesma configuração. Os melhores resultados, entre os parâmetros nucleares, são das seções de choque de fissão, independente do tipo de elemento combustível.

Para o grupo 2, como apresentado na fig. 5.9, os resultados são excelentes, assim como para o núcleo com barra de controle.

Para a homogeneização das regiões com baffle mais refletor, os resultados obtidos são mostrados na tabela 5.2, para a região D (que é simétrica à região E e estão indicadas na fig. 5.1). e na tabela 5.3, para a região F (também indicada na fig. 5.1).

Observa-se que os resultados para a homogeneização das regiões compostas de baffle mais refletor seguem o mesmo padrão que aqueles obtidos para a homogeneização dos elementos combustíveis. Neste caso, como para os elementos combustíveis da periferia, os cálculos de “multiassembly” apresentaram um desempenho igualmente interessante do ponto de vista dos desvios relativos percentuais que são bem baixos, como para os resultados apresentados na fig. 5.6. A seção de choque de absorção do grupo 1, para a região D, é a que apresenta maior desvio relativo percentual. E, mais uma vez, os desvios para os parâmetros do grupo 2 são menores que para o grupo 1.

**Tabela 5.2 – Parâmetros Nucleares do Baffle + Refletor Homogeneizados
(Região D)**

PARÂMETRO NUCLEAR	GLOBAL	MULTIASSEMBLY	DP
Σ_{a1}	0.001279	0.001264	-1.17
Σ_{a2}	0.036401	0.036253	-0.41
D_1	1.055875	1.060772	0.46
D_2	0.248486	0.248331	-0.06
Σ_s	0.031087	0.031120	0.11

**Tabela 5.3 – Parâmetros Nucleares do Baffle + Refletor Homogeneizados
(Região F)**

PARÂMETRO NUCLEAR	GLOBAL	MULTIASSEMBLY	DP
Σ_{a1}	0.001071	0.001072	0.07
Σ_{a2}	0.032851	0.032771	-0.24
D_1	1.115014	1.114059	-0.08
D_2	0.244828	0.244747	-0.03
Σ_s	0.034899	0.034967	0.19

Para a geometria espectral mostrada na fig. 5.5 (região F), os resultados apresentados na tabela 5.3 mostram que há uma diminuição nos desvios relativos percentuais, quando comparados com os resultados para a região D (mostrados na tabela 5.2). Isto pode ser explicado devido à geometria espectral usada se tornar mais próxima da configuração usada no cálculo global.

Nas tabelas 5.4, 5.5 e 5.6 são apresentados os fatores de descontinuidade, calculados de acordo com a metodologia apresentada no capítulo 4, para os três elementos combustíveis destacados nas figuras 5.6 e 5.7, que são dos tipos A (combustível de baixo enriquecimento com buraco de água), B (combustível de baixo enriquecimento com barra de controle) e C (combustível de alto enriquecimento com buraco de água), respectivamente.

Embora não faça sentido comparar os valores dos fatores de descontinuidade calculados usando as geometrias espectrais de “único assembly” e de “multiassembly” com aqueles obtidos usando os resultados do cálculo global, verifica-se que existe consistência nos valores obtidos, principalmente para o caso dos cálculos com geometria espectral de “multiassembly”.

Tabela 5.4 – Fatores de Descontinuidade para Elemento Combustível Tipo A.

Grupo de energia (g)	GLOBAL	MULTIASSEMBLY	ÚNICO ASSEMBLY
1	0,981	0,995	1,004
	1,018	1,000	1,004
	0,993	1,007	1,004
	1,008	0,994	1,004
2	0,906	0,933	0,963
	0,923	0,940	0,963
	0,944	0,972	0,963
	0,954	0,965	0,963

Tabela 5.5 – Fatores de Descontinuidade para Elemento Combustível Tipo B.

Grupo de energia (g)	GLOBAL	MULTIASSEMBLY	ÚNICO ASSEMBLY
1	0,989	0,947	1,015
	1,045	1,000	1,015
	1,010	1,007	1,015
	1,026	0,994	1,015
2	1,038	0,933	1,129
	1,042	0,940	1,129
	1,087	0,972	1,129
	1,091	0,965	1,129

Tabela 5.6 – Fatores de Descontinuidade para Elemento Combustível Tipo C.

Grupo de energia (g)	GLOBAL	MULTIASSEMBLY	ÚNICO ASSEMBLY
1	0,943	1,034	1,004
	1,114	1,007	1,004
	0,976	1,034	1,004
	1,021	1,007	1,004
2	0,820	1,141	0,950
	0,800	1,124	0,950
	0,880	1,141	0,950
	0,880	1,124	0,950

A comprovação final de qual tipo de geometria espectral utilizar, ou seja, que conjunto de dados nucleares médios e fatores de descontinuidade usar, deve ser dada com a utilização destes conjuntos de parâmetros em um cálculo global usando o método NEM para resolver a equação da difusão de nêutrons.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os resultados alcançados para os cálculos dos parâmetros nucleares, usando as geometrias de “único assembly” e de “multiassembly”, foram muito bons, tanto para o núcleo com barra quanto para o núcleo sem barra, ambos calculados nos dois grupos de energia, apresentando desvios relativos percentuais da ordem de 1 % na maioria dos cálculos, com um desvio maior para a seção de choque de espalhamento.

Para o núcleo com barra, observa-se que para os elementos combustíveis da periferia do núcleo (elementos do tipo C), os cálculos de “multiassembly” melhoraram em muito os valores dos parâmetros nucleares médios. Tirando os elementos da periferia e as seções de choque de espalhamento, os resultados para os cálculos de “único assembly” são relativamente bons.

No núcleo sem barra de controle os resultados encontrados foram melhores do que no núcleo com barra, tanto na configuração “único assembly” quanto na “multiassembly”, e com comportamento parecido para o combustível tipo C, quanto ao combustível tipo A, observa-se um melhor desempenho para configuração “único assembly”.

Quanto aos fatores de descontinuidade, apesar não ter sentido a comparação com aqueles obtidos usando os resultados do cálculo global, verifica-se consistência nos valores obtidos.

Como sugestões para trabalhos futuros recomenda-se: aplicação deste procedimento a um núcleo de reator PWR comercial; uso de parâmetros nucleares de célula considerando espalhamento com anisotropia, já que o programa de cálculo de transporte permite expansão até P_3 ; utilização de métodos de malha média para realizar os cálculos de

transporte, com a intenção de diminuir o tempo de computação do cálculo dos fluxos angulares; e a utilização dos parâmetros nucleares médios e os fatores de descontinuidade, obtidos com procedimento de cálculo de homogeneização aqui desenvolvido, em um cálculo global usando o método NEM.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BURTAK, F., HAASE, A. H., VAN DE VELDE, A., SAV95 – The New Siemens Code System for PWR Nuclear Core Design. Proceedings Jahrestagung Kerntechnik (1996) p.3.
- [2] LIU, Y. S., et al. ANC: “A Westinghouse Advanced Nodal Computer Code”, WCAP-10965, September 1986.
- [3] BARROS, R.C., LARSEN, E. W., “Spectral nodal Method”, Nucl. Sci. Eng. v. 104, pp. 199, 1990.
- [4] ALVES FLHO, H., 1999. Um Método espectro-nodal Para Problemas de Autovalor na Teoria de Transporte de Nêutrons segundo a Formulação de Ordenadas Discretas. Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [5] FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F. And WAGNER, M.R. ”Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations”, Atomkernenergie, Vol. 30, pp 123-127.
- [6] SILVA, F.C., MARTINEZ, A.S., “Aceleração do Método Nodal NEM Usando Diferenças Finitas de Malha Grossa”, VI EMC – Friburgo, RJ-Brasil, Dezembro, 2003.
- [7] MONTAGNINI, B., SORAPERRA, P., TRENTA VIZI, C., “A Well-Balanced Coarse-Mesh Flux Expansion Method”, Ann. Nucl. Energy, Vol 21, No. 1, pp. 45-53, 1994.
- [8] CHAO, Y. A., 2000. Coarse Mesh Finite Difference Methods and Applications, Proc. International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium (PHYSOR 2000), 7-12 May 2000, Pittsburgh, Pennsylvania, IX.D. [CD-ROM].
- [9] SMITH, K. S., “Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis”, Progress in Nuclear Energy, Vol. 17, N° 3, p. 303-335, 1986.
- [10] TRKOV, A., RAVNIK, M., 1994. “Effective Diffusion Homogenization of cross sections for pressurized water reactor core calculations”. Nucl. Sci. Eng. 116, 86.
- [11] YAMAMOTO, AKYO., KITAMURA, Y., YAMANE, Y., 2004. “Cell homogenization methods for pin-by-pin core calculations tested in slab geometry”. Annals of Nuclear Energy 31,825-847.
- [12] HETZELT, L., WINTER, H-J., “Generalization of Equivalent Reflector Model for the Siemens Standard Core Design Procedures”. Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications – Madrid – Spain, September, 1999.
- [13] HENRY, A. F., WORLEY B. A., and MORSHED, “Spatial Homogenization of Diffusion Theory Parameters”, Proc. Specialists Mtg. Homogenization Methods in

Reactor Physics, Lugano, Switzerland, November 13-15, 1978, IAEA-TECDOC-231, International Atomic Energy Agency (1978).

[14] KOEBKE, K., 1978. "A New Approach to Homogenization and Group Condensation, IAEA Technical Committee Meeting on Homogenization Methods in Reactor Physics, Lugano, 13-15 Nov 1978.

[15] KOEBKE, K., "Advances in homogenization and dehomogenization", International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Vol. 2, p. 59, Munich, 1981.

[16] SMITH, K., HENRY A. F. and LORENTZ, R. A., 1980. "The Determination of Homogenized Diffusion Theory Parameters for Coarse Mesh Nodal Analysis". Proceedings of the Conference on Advances in Reactor Physics And Shielding, p. 294.

[17] DUDERSTADT, J.J, HAMILTON, L.J. "Transport Theory", John Wiley & Sons, Inc., 1979.

[18] LEWIS, E.E. and MILLER, W.F.Jr., "Computational Methods of Neutron Transport", John Wiley & Sons, New York, 1984.

[19] ALCOUFFE, R.E. and O'DELL, R.D., "Transport Calculations for Nuclear Reactors", CRC Handbook of Nuclear Reactors Calculations, Volume 1, CRC Press Inc, Florida, 1986.

[20] NAKAMURA, S., "Computational Methods in Engineering and Science", John Wiley & Sons, New York, 1977.

[21] CHENG, A. Y., HENRY A. F. and HOXIE C. L. "A Method for Determining Equivalent Homogenized Parameters", International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Vol. 2, pp. 3, Munich, 1981.

[22] KOEBKE, K., "Advances in homogenization and dehomogenization", International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Vol. 2, p. 59, Munich, 1981.

[23] DUDERSTADT, J.J., HAMILTON, L.J. "Nuclear Reactor Analysis", John Wiley & Sons, Inc., 1976.

