

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

MÁIRA COSTA SANTOS BRAGA

ANÁLISE DA CINÉTICA ESPACIAL EM REATORES NUCLEARES UTILIZANDO O
MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Rio de Janeiro

2015

MÁIRA COSTA SANTOS BRAGA

ANÁLISE DA CINÉTICA ESPACIAL EM REATORES NUCLEARES UTILIZANDO O
MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciência e Tecnologia Nucleares.

Orientador: Profº. Dr. Zelmo Rodrigues de Lima

Orientador: Profº. Dr. Reinaldo Jaques Jospin

Rio de Janeiro

2015

BRAG Braga, Máira Costa Santos.

Análise da cinética espacial em reatores nucleares utilizando o método dos elementos finitos/ Máira Costa Santos Braga – Rio de Janeiro: CNEN/IEN, 2015.

xi, 109p. : il.. ; 31cm.

Orientadores: Zelmo Rodrigues de Lima e Reinaldo Jacques Jospin.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares) – Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2015.

1. Cinética Espacial. 2. Difusão de Nêutrons. 3. Método dos Elementos Finitos. 4. Nêutrons Precursors.

ANÁLISE DA CINÉTICA ESPACIAL EM REATORES NUCLEARES UTILIZANDO O
MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Máira Costa Santos Braga

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR DA
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA NUCLEARES.

Aprovados por:

Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D. Sc.

Prof. Reinaldo Jacques Jospin, D. Sc.

Prof. Rubens Souza dos Santos, M. Sc.

Prof. Adilson Costa da Silva, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JUNHO DE 2015

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores, os Dr. Zelmo Rodrigues de Lima e Dr. Reinaldo Jacques Jospin, pelo empenho e dedicação ao longo deste trabalho.

Ao professor Dr. Luiz Osório de Brito Aghina, pela dedicação, pelos ensinamentos que não podem ser encontrados em livros e por sempre acreditar e apoiar a realização deste trabalho.

Aos professores e colaboradores do PPGIEN, pelos ensinamentos transmitidos.

A todos os funcionários que trabalham no PPGIEN, ressaltando o profissionalismo, carinho e dedicação da secretária Cláudia Coelho.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro, concedendo a bolsa de estudos, permitindo a realização deste trabalho.

Aos meus pais, Elio e Maria Helena, pelo companheirismo, orações e apoio incondicional.

Ao meu irmão, Everton, pelas palavras de incentivo, companheirismo e pelo apoio na fase conclusiva deste trabalho.

Ao meu esposo, Alberto, sempre dedicado e determinado em me ajudar, criando as condições necessárias de tranquilidade para a elaboração deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho visa resolver numericamente as equações da cinética espacial unidimensional para dois grupos de energia e seis grupos de nêutrons precursores e dependência temporal dos parâmetros nucleares. Para resolver as equações da cinética espacial, aplica-se na discretização espacial o método dos elementos finitos e na discretização temporal, o método direto implícito de Euler. As concentrações de precursores são obtidas analiticamente, usando técnicas de integração. Uma vez estabelecida a solução das equações da cinética espacial, aplica-se essa solução a casos de referências para a validação da metodologia. Para o problema da difusão dinâmico e dependente do tempo é utilizado um modelo de reator tipo placa unidimensional com dois transientes: o primeiro com um aumento linear de 3% em 1 segundo na seção de choque de absorção e o segundo com uma diminuição linear de 1% em 1 segundo na seção de choque de absorção. As soluções numéricas desses problemas foram obtidas utilizando o módulo CINE desenvolvido no programa MEF, utilizando elementos finitos unidimensionais quadráticos. Essas soluções foram comparadas com as soluções apresentadas na literatura, utilizando o método de diferença finita. Com isso, foi possível verificar a capacidade e a precisão do método dos elementos finitos.

Palavras-chave: Cinética espacial, difusão de nêutrons, método dos elementos finitos, nêutrons precursores.

ABSTRACT

This research has the objective of solving numerically the spatial kinetic equations in one-dimension for two energy groups and six groups of precursors neutrons and time dependence of nuclear parameters. To solve the spatial kinetic equations, was applied the spatial discretization the finite element method and the time discretization the direct method with implicit Euler scheme. The precursor concentrations are obtained analytically using integration techniques. Once the solution of the equations of spatial kinetics, apply this solution to cases of references to validate the methodology. For the problem of dynamic, time-dependent diffusion is used a reactor type slab-dimensional with two transients: the first with a linear increase of 3% in 1 second in the cross section of absorption and the second with a linear decrease of 1 % in 1 second in the cross section of absorption. The numerical solutions of these problems were obtained using the CINE module developed in MEF program using finite element one-dimensional quadratic. These solutions were compared with the solutions presented in the literature, using the finite difference method. Thus, it was possible to verify the capacity and accuracy of the finite element method.

Keywords: finite element method, spatial kinetic, delayed neutron precursors, diffusion problem.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: A normal externa ao contorno Γ	16
Figura 2: Geometria do reator tipo placa com uma dimensão BSS – 6 (ANL-7416, 1977).	32
Figura 3: Discretização do reator tipo placa.....	32
Figura 4: Comparação do fluxo de nêutrons térmicos para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF (10, 20, 40, 80 e 120 elementos finitos) e o MDF.....	35
Figura 5: Comparação do fluxo de nêutrons rápido estacionário entre MEF e MDF.	36
Figura 6: Comparação do fluxo de nêutrons térmico estacionário entre MEF e MDF.	36
Figura 7: Comparação da concentração do precursor $l=1$ para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF (10, 20, 40, 80 e 120 elementos finitos) e o MDF(240 pontos).....	37
Figura 8: Comparação da concentração dos nêutrons precursores ($i=1, 2, 3, 4, 5$ e 6) para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF(80elementos finitos) e o MDF(240 pontos).	38
Figura 9: Comparação da evolução temporal dos fluxos de nêutrons rápidos obtidos pelo MEF (80 elementos finitos) e MDF(240 pontos).....	39
Figura 10: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons térmicos obtidos pelo MEF(80 elementos finitos) e pelo MDF(240 pontos).	39
Figura 11: Comparação da concentração dos precursores do grupo $l=1$ avaliados no tempo $t=0.0s$ e $t=2.0s$ para o MEF(80 elementos finitos) e o MDF(240 pontos).....	40
Figura 12: Comparação do fluxo de nêutrons térmicos entre o MEF, com elementos de tamanho variado, e o MDF.....	41
Figura 13: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons rápidos obtidos pelo MEF(80 elementos finitos) e pelo MDF(240 pontos) para o modelo bss-6-a2.....	42
Figura 14: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons térmicos obtidos pelo MEF(80 elementos finitos) e pelo MDF(240 pontos) para o modelo bss-6-a2.....	42
Figura 15: Elemento triangular linear com coordenadas de referências da transformação do Jacobiano.	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Constantes de grupo para 1-D ANL-BSS-6 (ANL-7416, 1977)	33
Tabela 2: Comparação do fator de criticalidade do reator k_{eff}	34
Tabela 3: Variáveis de entrada para o cálculo do parâmetro resíduo e o gradiente do fluxo...	89
Tabela 4: Variáveis de entrada para o procedimento de normalização.....	89
Tabela 5: Variáveis de entrada para o cálculo do parâmetro k_{eff}	90
Tabela 6: Variáveis de entrada do bloco COOR.....	90
Tabela 7: Variáveis de entrada do bloco PRND.....	91
Tabela 8: Variáveis de entrada do bloco PREL.....	91
Tabela 9: Variáveis de entrada do bloco ELEM.....	92
Tabela 10: Variáveis de entrada do bloco ELEM com $i_{el}<0$	92
Tabela 11: Variáveis de entrada do bloco DYNS.....	93
Tabela 12: Tabelas globais, locais e dos elementos do programa MEF.....	98

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	1
2.	EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS DEPENDENTE DO TEMPO	6
2.1.	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS DEPENDENTE DO TEMPO	6
2.2.	EQUAÇÕES DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS MULTIGRUPO DEPENDENTE DO TEMPO	10
2.2.1.	Cinética de reatores nucleares.....	10
2.2.2.	A importância dos nêutrons atrasados nas equações da cinética	11
3.	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	18
3.1.	FORMULAÇÃO FRACA DA EQUAÇÃO DA CINÉTICA ESPACIAL.....	18
3.2.	APROXIMAÇÕES DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	19
3.3.	DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL	23
3.3.1.	Método direto utilizando o método de Euler implícito	23
3.3.2.	Solução analítica da equação da concentração dos precursores	26
3.3.2.1.	Sistema de equações para a solução numérica.	27
3.3.2.2.	Método SOR.....	29
4.	RESULTADOS NUMÉRICOS	31
4.1.	EXEMPLOS NUMÉRICOS UNIDIMENSIONAIS	31
4.1.1.	Comparação com a solução estacionária.....	33
4.1.2.	Comparação com a solução dependente do tempo	37
4.1.2.1.	Exemplo numérico BSS-6-A1	37
4.1.2.2.	Exemplo numérico BSS-6-A2	41
5.	CONCLUSÕES	43
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		45
APÊNDICE A. DIFUSÃO ESTACIONÁRIA DE NÊUTRONS		48
A.1.	O PROBLEMA DE DIFUSÃO ESTACIONÁRIA DE NÊUTRONS	48
A.1.1.	Para um grupo de energia	48
A.1.2.	Para dois grupos de energia	48
A.2.	FORMULAÇÃO INTEGRAL DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO ESTACIONÁRIA	51
A.2.1.	Formulação integral para dois grupos de energia.....	51

A.3.	SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS	51
A.3.1.	Aproximações das equações da difusão por elementos finitos	51
A.3.2.	Aproximação para duas dimensões	52
APÊNDICE B. DEFINIÇÕES DAS MATRIZES DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS DINÂMICO		56
APÊNDICE C. DESCRIÇÃO DO PROGRAMA MEF		61
C.1.	ASPECTOS GERAIS DO MEF	61
C.1.1.	Organizações do cálculo das matrizes elementares para integração numérica	63
C.2.	DESCRIÇÃO GERAL DO PROGRAMA MEF	64
C.2.1.	Possibilidades geral do MEF	64
C.2.3.	Tamanhos dos problemas	65
C.2.4.	Modularidade	67
C.2.5.	Etapas características do programa MEF	68
C.2.6.	Descrições dos blocos do MEF – organização geral	69
C.2.7.	Organização dos dados	69
C.2.7.1.	Blocos de leitura dos dados e blocos de execução:	70
C.2.8.	Funções e descrições dos sub-rotinas do bloco CINE	71
C.2.8.1.	Blcine	72
C.2.8.2.	Excine	72
C.2.8.3.	Ascine	73
C.2.9.	Dados de entrada do bloco CINE	89
C.2.10.	Dados de entrada do bloco COOR	90
C.2.11.	Dados de entrada do bloco PRND	91
C.2.12.	Dados de entrada do bloco PREL	91
C.2.13.	Dados de entrada do bloco ELEM	92
C.2.14.	Dados de entrada do bloco DYNS	93
C.2.15.	Descrição e listagem dos blocos funcionais do programa MEF	93
C.2.15.1.	Programa principal	93

1. INTRODUÇÃO

Um dos problemas centrais no desenvolvimento de um reator nuclear é o cálculo do tamanho e da composição do sistema, necessários para manter o reator crítico, ou seja, com a potência constante. Nos reatores nucleares, os mecanismos de produção de nêutrons são provenientes dos processos de fissão de nuclear, espalhamento de nêutrons para energia de interesse, bem como, nêutrons gerados por fontes externas. Já, os mecanismos de perdas de nêutrons estão relacionados a captura de nêutrons, espalhamento para energias diferentes da de interesse e fuga de nêutrons pelas regiões de contorno. (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976). Portanto, o estudo da população neutrônica em reatores é de grande interesse.

Este problema é tratado pela Teoria de Transporte de Nêutrons utilizando a equação integro-diferencial de Boltzmann (LEWIS e MILLER, 1984). Ela estuda a mudança dos nêutrons pelo meio material, e tem a sua distribuição no espaço, energia, direção e tempo. Portanto, é necessário um profundo conhecimento das características, propriedades e limitações associadas a seções de choque. (DUDERSTADT, 1979).

A equação fundamental que descreve o transporte de nêutrons é uma variante linear da equação de Boltzmann, facilmente deduzida a partir do princípio da conservação do número de nêutrons em um elemento de volume, de maneira semelhante a outros problemas clássicos como transporte de massa, condução de calor, etc.

Entretanto, a equação de transporte de nêutrons é de difícil solução em vista da complexidade das suas funções e dos números de variáveis que definem o problema, tais como espaço, dependência angular, energia dos nêutrons e tempo (\mathbf{r} , Ω , E, t). Na utilização desta equação no estudo, segundo (MAIA, 1979), o comportamento da população de nêutrons no interior do núcleo do reator nuclear, por exemplo, é impossível fazer uma formulação matemática explícita e fiel, devido a diversos fatores tais como: elementos constituintes, arranjo geométrico, perfil, dentre outros.

Tais fatores implicam em um alto grau de heterogeneidade. A energia dos nêutrons varia desde alguns MeV quando são emitidos durante a fissão até a ordem de fração de eV, quando entram em equilíbrio térmico com o meio. O grande número de isótopos com propriedades distintas que variam sua concentração no tempo e no espaço, variação das seções de choque com a energia, espalhamento anisotrópico e outros fatores (MAIA, 1979).

Desta maneira, encontrar soluções para a equação de transporte de nêutrons, somente é possível quando o sistema for simplificado ou idealizado, de tal maneira que se obtenha uma formulação matemática explícita. As simplificações e idealizações dos sistemas são feitas de

acordo com os interesses, com as soluções a serem objetivadas. Sendo assim, sob certas condições, pode-se considerar que as propriedades do sistema, em um determinado intervalo de tempo não se alteram (MAIA,1979).

Entretanto, para calcular as condições necessárias para atingir a criticalidade, utiliza-se a Teoria da Difusão de Nêutrons (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976). Nesse caso, a teoria da difusão de nêutrons recai em um problema de autovalor e de fonte fixa associado a equação de transporte de nêutrons. A teoria da difusão é uma aproximação para o termo de fuga de nêutrons.

Dentre os métodos utilizados pela Teoria de Transporte de Nêutrons para tratar o problema da dependência angular do fluxo de nêutrons, podemos destacar, o tratamento da variável angular pelo Método de Harmônicos Esféricos, também conhecido como aproximação P_N .

O método P_N foi desenvolvido detalhadamente por (MARK, 1957), que consiste, basicamente, na expansão de todos as funções angulares em termos de harmônicos esféricos.

Quanto à dependência energética da Equação de Transporte de Nêutrons, dois métodos podem ser utilizados (DUDERSTADT, 1979 e MAIA, 1979):

- a) Divide-se o intervalo de energia de interesse em um número finito de subintervalos, denominados grupos de energia. Os parâmetros nucleares são obtidos de tal forma que as taxas de reações são conservadas. A teoria que trata deste modelo é a Teoria de Multigrupo;
- b) Considera-se a energia como uma variável contínua e expande-se os termos dependentes em polinômios que tem o mesmo intervalo de definição, ou seja, de zero a infinito, como são os casos dos Polinômios de Laguerre, Tchebycheff, etc.

Quando esses dois métodos são aplicados à equação de transporte de nêutrons, as variáveis da energia são discretizadas.

Quanto ao fato do espalhamento exibir o caráter de ser anisotrópico, é necessário expandir a dependência angular das seções de choque em Polinômios de Legendre. Assim, truncando a série no termo correspondente à ordem zero, tem-se o modelo de espalhamento isotrópico e truncando o termo de ordem um, tem-se o modelo de espalhamento linearmente anisotrópico.

Os primeiros métodos de aplicação a ser desenvolvido foram baseados em uma versão simplificada da teoria de transporte; conhecida como teoria da difusão de nêutrons

(LAMARSH, 1966). Esta versão simplifica o cálculo da variação espacial da distribuição neutrônica, ignorando a sua dependência angular. Porém, com estas simplificações, a teoria não oferece bons resultados para pontos situados próximos às fontes e fronteiras físicas, não podendo ser aplicada em pequenos sistemas, como células, nos quais os cálculos precisos são fundamentais.

Com a utilização das soluções numéricas geradas por aproximações e métodos numéricos de discretização, a equação de transporte de nêutrons tem as suas variáveis independentes, angulares e energéticas simplificadas, possibilitando assim, desenvolver um sistema de equações lineares e as suas soluções numéricas requerem uma discretização nas variáveis do espaço e do tempo (MAIA, 1979).

As equações da cinética espacial, na formulação de grupo de energia têm sido aceitas pela maioria dos pesquisadores em Física de Reatores, como a melhor aproximação para a simulação do comportamento dos nêutrons em um reator nuclear. Vários métodos têm sido desenvolvidos por muitos pesquisados para encontrar uma solução numérica para as equações da cinética espacial, já que não se tem conhecimento de uma solução analítica completa dessas equações (PETERSEN, 2011).

Os principais métodos desenvolvidos para resolver as equações da cinética espacial de nêutrons (STACEY, 1969) e (SUTTON e AVILES, 1996) os Métodos Diretos (métodos que apresentam dependência espacial) e os Métodos Indiretos (métodos que definem à priori a dependência das variáveis no tempo). Entretanto, nesse trabalho, os métodos indiretos não são abordados.

Para obter a discretização espacial da equação da concentração dos precursores e a equação de difusão de nêutrons dependente do tempo, são utilizados principalmente o método das diferenças finitas (MDF) ou o método dos elementos finitos (MEF) (SUTTON e AVILES, 1996).

O interesse de se comparar os resultados obtidos entre o método das diferenças finitas e o método dos elementos finitos a reatores heterogêneos motivou diversas publicações de trabalhos abordando os problemas e as vantagens de cada método. Entre as principais conclusões pode-se citar que o método dos elementos finitos, em muitos casos, permite a obtenção de resultados com números menores de equações e consequentemente com um tempo menor de processamento.

Este trabalho visa resolver numericamente as equações da cinética espacial a uma dimensão com dependência temporal dos parâmetros nucleares e utilizando dois grupos de energia e seis grupos de nêutrons precursores.

Para resolver as equações da cinética espacial a uma dimensão, aplica-se o método dos elementos finitos na discretização espacial. Na resolução temporal do problema de difusão dinâmica é utilizado o método direto implícito de Euler. A solução para a concentração de precursores é obtida por uma integração analítica.

A validação da metodologia empregada na solução das equações da cinética espacial é estabelecida pela comparação de resultados obtidos nesse trabalho com os obtidos pela literatura. Nos testes utilizamos um modelo de reator tipo placa, a uma dimensão e com dois transientes. O primeiro denominado BSS-6-A1 sofre um aumento de 3% em um segundo na sua seção de choque de absorção e o segundo denominado BSS-6-A2 sofre uma redução de 1% também em um segundo na sua seção de choque de absorção. As soluções numéricas obtidas pelo módulo CINE do programa MEF são comparadas as soluções de referência. Com isso, foi possível verificar a capacidade e a precisão do método dos elementos finitos. A seguir, será feita uma breve descrição do conteúdo de cada capítulo.

O segundo capítulo descreve a resolução da equação de transporte na forma integro diferencial e apresenta derivações dependente do tempo e da energia. Aplicando vários métodos de aproximações, dentre eles, a aproximação da difusão, obtém-se a solução da equação da difusão de nêutrons dependente do tempo e da equação da concentração dos precursores. Discutiremos também o formalismo multigrupo das equações da difusão neutrônica, considerando as equações das concentrações dos precursores.

No terceiro capítulo, abordam-se as soluções numéricas da equação da cinética espacial para dois grupos de energia e seis grupos da concentração dos nêutrons precursores, discretizada espacialmente pelo método dos elementos finitos. Pela integração analítica da equação da concentração de precursores, pela utilização do método de Galerkin para a função teste (w) e pela interpolação das variáveis do problema por funções definidas em subdomínios, obtém-se a solução das equações da cinética espacial, na forma matricial, onde foi utilizado o método direto implícito de Euler, na variação temporal. Para resolver o sistema de equações foi utilizado o método iterativo Successive Over-Relaxation (SOR). Para o tempo inicial ($t=0$), são assumidos os valores dos fluxos obtidos no regime estacionário.

No quarto capítulo, são apresentados os resultados dos dois exemplos numéricos que abordam o problema da difusão unidimensional, nos regimes estacionário e transiente, e são estabelecidas comparações entre resultados obtidos, tanto na distribuição espacial do fluxo de nêutrons quanto no fator de multiplicação efetivo de nêutrons, com os resultados obtidos na literatura utilizando o método das diferenças finitas. Para os dois modelos de reatores tipo placa, o BSS-6-A1 e o BSS-6-A2 foram utilizados no módulo CINE do programa MEF para

discretizações com elementos finitos unidimensionais quadráticos com um número variado de elementos no intuito de aferir a precisão do método.

No quinto capítulo, apresentam-se as conclusões e as perspectivas para os trabalhos futuros. No apêndice A, mostra-se o problema da difusão estacionária de nêutrons. No apêndice B, apresentam-se as formas matriciais das equações da solução analítica. No apêndice C são apresentadas as descrições e as definições do programa MEF.

2. EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS DEPENDENTE DO TEMPO

2.1. EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS DEPENDENTE DO TEMPO

O comportamento dos nêutrons no reator nuclear é adequadamente descrito pela equação de transporte de nêutrons dependente do tempo para fluxo angular com o balanço das partículas no espaço de fases (\mathbf{r}, Ω, E, t) (SUTTON e AVILES, 1996):

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{V(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \\
 &= -\Omega \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) - \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \\
 &+ \int d\Omega' \int dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E, t) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E', t) \\
 &+ (1 - \beta) \frac{\chi_0(E)}{4\pi} \int dE' \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \int d\Omega' \psi(\mathbf{r}, \Omega', E', t) \\
 &+ \sum_{i=1}^I \lambda_i \frac{\chi_i(E)}{4\pi} c_i(\mathbf{r}, t)
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

As concentrações de precursores satisfazem a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i c_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \int dE \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E, t) \int d\Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t), \quad i = 1, \dots, I. \tag{2.2}$$

sendo,

$\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)$: seção de choque macroscópica total;

$\psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$: fluxo angular do nêutron;

$\Sigma_s(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E, t) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E', t)$: seção de choque macroscópica de transferência, que descreve a probabilidade que uma partícula com uma energia inicial E' e direção Ω' sofra uma colisão em \mathbf{r} no tempo t , resultando em mudança de direção e energia;

$\nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)$: seção de choque macroscópica de fissão, assumida como isotrópica;

$\chi_0(E)$: distribuição de energia dos nêutrons de fissão (espectro), assumida isotrópica;

- $\chi_i(E)$: espectro para cada I da família de precursores i (espectro de nêutrons atrasados);
 $c_i(\mathbf{r}, t)$: i -ésimo termo da concentração dos nêutrons precursores;
 $\lambda_i(\mathbf{r}, t)$: i -ésimo termo da constante de decaimento;
 β_i : i -ésimo termo da fração dos nêutrons atrasados;
 $\nu(E)$: número médio de nêutrons liberados por fissão induzidas por nêutrons com energia E ;
 $(1 - \beta)$: fração de fissão de nêutrons prontos;
 $\Omega = \mathbf{v}/v$: direção do movimento do nêutron.

As soluções numéricas das equações de transporte dependente do tempo e de precursores para os problemas das cinéticas de reatores de interesse prático são difíceis de obtenção, então, aplica-se os métodos de aproximação. Neste tópico, é abordado o método de aproximação da equação de transporte de nêutrons dependente do tempo e equação da difusão dependente do tempo. As derivações da equação da difusão a partir da equação de transporte de nêutrons são descritas em detalhes em (HENRY, 1972 e 1975) e (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

Segundo (SUTTON e AVILES, 1996), são definidos o fluxo escalar e a corrente líquida como zero e os momentos angular, respectivamente, do fluxo angular:

$$\phi = \int d\Omega \psi \quad \mathbf{J} = \int d\Omega \Omega \psi \quad (2.3)$$

Integrando as equações (2.1) sobre a variável angular, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V(E)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, t) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t) \\
 &+ \int dE' \Sigma_S(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\mathbf{r}, E', t) \\
 &+ (1 - \beta) \chi_0(E) \int dE' \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) \\
 &+ \sum_{i=1}^I \lambda_i \chi_i(E) c_i(\mathbf{r}, t)
 \end{aligned} \quad (2.4)$$

As equações dos precursores podem ser escritas em termos do fluxo escalar:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i c_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \int dE v \Sigma_f(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t), i = 1, \dots, I. \quad (2.5)$$

As equações (2.4) e (2.5) são exatas e para resolvê-las assume-se o fluxo angular como linearmente anisotrópico em relação a variável angular, resultando numa equação conhecida como aproximação P_N com fraca dependência angular como abordado por (CASE e ZWEIFEL, 1967) ou (HENRY, 1972):

$$\psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \approx \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E, t) + 3\Omega \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)] \quad (2.6)$$

Multiplicando a equação (2.1) por Ω e integrando na variável angular obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V(E)} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) + \nabla \int \Omega \Omega \psi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) d\Omega + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) \\ = \int_0^\infty \Sigma_{s1}(r, E' \rightarrow E, t) \mathbf{J}(r, E', t) dE' \end{aligned} \quad (2.7a)$$

O termo de fissão é nulo pois assume-se que o termo: $\frac{1}{V(E)} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$, seja muito menor que as taxas de reação.

Usando a aproximação P₁ para resolver a integral,

$$\nabla \int \Omega \Omega \left(\frac{1}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, t, E) + \frac{3}{4\pi} \Omega \mathbf{J}(\mathbf{r}, t, E) \right) d\Omega = \nabla \left(\frac{1}{3} \phi(\mathbf{r}, t, E) \right) \quad (2.7b)$$

O grupo de equações (2.4) e (2.7a) são referentes às equações P₁ dependente do tempo. Eliminando as variáveis da energia continua em favor da formulação do grupo de energia, conforme pode ser visto em (HENRY, 1975) ou (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976), as formas multigrupo das equações (2.4) e (2.5) são deduzidas segundo (SUTTON e AVILES, 1996) da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\mathbf{r}, t) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}^g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_r^g(\mathbf{r}, t) \phi^g(\mathbf{r}, t) \\
&+ \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{gg'}(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta) \chi_0^g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'}(\mathbf{r}, t) \phi^{g'}(\mathbf{r}, t) \\
&+ \sum_{i=1}^I \lambda_i \chi_i^g c_i(\mathbf{r}, t), \quad g = 1, \dots, G,
\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i c_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'}(\mathbf{r}, t) \phi^{g'}(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, \dots, I, \tag{2.9}$$

Ignorando a complicação do grupo da velocidade V^g da equação (2.8) que deveria ter as suas funções na posição \mathbf{r} e no tempo t . É introduzido um grupo de seção de choque de transporte Σ_{tr}^g , quando é definido na forma integral:

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \left[\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) - \int dE' \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E', t) \right] \tag{2.10}$$

Logo, a equação (2.10) pode ser igualada por:

$$\Sigma_{tr}^g(\mathbf{r}, t) \mathbf{J}^g(\mathbf{r}, t) \tag{2.11}$$

Segundo (SUTTON e AVILES, 1996) em (HENRY, 1972) são apresentados discursos de aproximações inerentes a esta substituição. Fazendo a anulação do termo envolvido na derivação do tempo do fluxo da corrente na equação (2.7). Isto é geralmente uma excelente aproximação para prática de problemas de cinéticas de reatores (WEINBERG e WIGNER, 1958). A forma do grupo da equação (2.7), depois de todas essas aproximações, pode ser escrita como:

$$\frac{1}{3} \nabla \phi^g(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{tr}^g(\mathbf{r}, t) \mathbf{J}^g(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{2.12}$$

Para definir o coeficiente da difusão do grupo g $D^g = 1/(3\Sigma_{tr}^g)$, pode se reescrever a equação (2.12), obtendo assim, a Lei de Fick:

$$\mathbf{J}^g(\mathbf{r}, t) = -D^g(\mathbf{r}, t)\nabla\phi^g(\mathbf{r}, t) \quad (2.13)$$

Fazendo as junções das equações (2.8) e (2.13) ela apresentará a forma da equação P₁ da equação da difusão dependente do tempo. Substituindo a equação (2.13) na equação (2.8) vem:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V^g} \frac{\partial}{\partial t} \phi^g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D^g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi^g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_r^g(\mathbf{r}, t) \phi^g(\mathbf{r}, t) \\ &+ \sum_{g' \neq g} \Sigma_s^{gg'}(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta)\chi_0^g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\mathbf{r}, t) \phi^{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \sum_{i=1}^I \lambda_i \chi_i^g c_i(\mathbf{r}, t), \quad g = 1, \dots, G. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Esta é a equação da difusão de nêutrons multigrupo dependente do tempo que acoplada com a equação (2.9) para concentração de precursores, constituem as equações da cinética espacial. Apesar das aproximações usadas nas derivações destas equações, será assumido que elas descrevem adequadamente o comportamento da dependência do tempo para o fluxo de nêutrons nos reatores nucleares.

2.2. EQUAÇÕES DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS MULTIGRUPO DEPENDENTE DO TEMPO

2.2.1. Cinética de reatores nucleares

Para um reator nuclear operar em um nível constante, a taxa de produção via fissão de nêutrons deverá ser balanceada pela perda via absorção ou fuga de nêutrons. Neste caso a potência permanece constante, que é a condição de operação de um reator nuclear. Essa condição é conhecida como o estado crítico de um reator. Algum desvio dessa condição de balanço resultará em uma dependência temporal da população de nêutrons e, consequentemente, uma variação temporal da potência do reator. Ao estudo do comportamento de um reator cuja densidade ou fluxo variam com o tempo, chama-se de cinética de reator (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

Deve-se reconhecer que as mudanças no comportamento da população neutrônica, muitas vezes, não estão sob o controle do operador do reator. Em alguns casos, isso dependerá da composição do núcleo, que dependerá também de outras variáveis que não estão diretamente acessíveis ao controle, tais como a temperatura do combustível ou refrigerante. Entretanto, essas variáveis dependem, por sua vez, do nível de potência do reator e, consequentemente, do fluxo de nêutrons (PETERSEN, 2011). O estudo dessas causas intrínsecas do comportamento da população de nêutrons é chamado de Dinâmica de Reator Nuclear. (STACEY, 1969). Neste trabalho, dá – se ênfase à cinética de reator nuclear, mais especificamente às variações do fluxo de nêutrons em função do tempo, ou seja, o comportamento transitório do fluxo de nêutrons devido a mudanças nos parâmetros nucleares (seção de choque de absorção) para pequenos intervalos de tempo.

2.2.2. A importância dos nêutrons atrasados nas equações da cinética

Segundo (PETERSEN, 2011), a fissão dá origem a fragmentos que são elementos com menor número de massa do que o núcleo original. Alguns desses fragmentos são instáveis e nos processos de decaimento eles emitem nêutrons. Tais nêutrons que são emitidos após o processo da fissão são chamados de nêutrons atrasados e os núcleos que os emitem são chamados de precursores de nêutrons atrasados

Os nêutrons atrasados não têm as mesmas propriedades que os nêutrons prontos produzidos diretamente da fissão. A energia média dos nêutrons prontos é muito maior do que a energia média dos nêutrons atrasados (STACEY, 1974). O fato dos nêutrons atrasados serem gerados com energias mais baixas tem dois impactos significantes na maneira que eles procedem no ciclo de vida do nêutron. Primeiramente, os nêutrons atrasados têm uma probabilidade muito menor de causar fissões rápidas do que os nêutrons prontos, devido ao fato de que sua energia média está abaixo do mínimo requerido para a ocorrência de fissão em reatores rápidos. Em segundo lugar, os nêutrons atrasados têm uma probabilidade menor de fuga do núcleo, porque eles são gerados com energias mais baixas e, por isso, viajam distâncias mais curtas do que os nêutrons rápidos (PETERSEN, 2011).

Para obter o balanceamento dos nêutrons em um reator nuclear, as equações multigrupo da cinética espacial para g grupos de energia e I nêutrons precursores atrasados (HENRY, 1975) e (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976), são:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V^g} \frac{\partial \phi^g}{\partial t}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D^g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi^g(\mathbf{r}, t) \\
&\quad - \Sigma_t^g \phi^g(\mathbf{r}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \phi^{g'}(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + (1 - \beta_{eff}) \chi_0^g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'}(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^I \lambda_i \chi_i^g C_i(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + s^g \quad g = 1, \dots, G
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Sabe-se que a variação temporal da concentração dos precursores é dada pela produção do precursor pela fissão e pela perda causada pelo decaimento.

Os nêutrons produzidos pelo grupo i , podem ser contabilizados da seguinte forma: multiplicando a taxa de produção de nêutrons na fissão pela fração de nêutrons atrasados.

A equação de balanço que representa a variação temporal da concentração de precursores é dada por:

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_f^g(\mathbf{r}, t) \phi^g(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad i = 1, \dots, I \tag{2.16}$$

onde:

$\phi^g(\mathbf{r}, t)$: fluxo de nêutrons do grupo g na posição \mathbf{r} e tempo t .

$C_i(\mathbf{r}, t)$: concentração de precursores de nêutrons no grupo i , na posição \mathbf{r} e tempo t .

V^g : velocidade do nêutrons do grupo g .

$D^g(\mathbf{r}, t)$: coeficiente de difusão do grupo g , na posição \mathbf{r} e tempo t

$\Sigma_r^g(\mathbf{r}, t)$: seção de choque de remoção do grupo g , na posição \mathbf{r} e tempo t .

$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}, t)$: seção de choque de espalhamento do grupo g' para o grupo g , na posição \mathbf{r} e tempo t .

Σ_t^g : seção de choque macroscópica total do grupo g .

$\nu \Sigma_f^g$: seção de choque macroscópica de fissão do grupo g , multiplicado pelo número médio de nêutrons emitidos na fissão não depende de (\mathbf{r}, t) .

Σ_a^g : seção de choque macroscópica de absorção do grupo g .

Σ_c^g : seção de choque macroscópica de captura do grupo g .

$\Sigma_s^{g \rightarrow g'}$: seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g para g' .

β_{eff} : fração efetiva total de nêutrons atrasados.

χ_0^g : espectro de nêutrons prontos do grupo g .

χ_i^g : espectro de nêutrons atrasados do grupo g .

ν : número de fissão de nêutrons.

λ_i : constante de decaimento do grupo i de precursores.

β_i : fração de nêutrons atrasados do grupo i .

s^g : fonte externa de nêutrons do grupo g .

$(1 - \beta_{eff})$: fração de fissão de nêutrons emitidas como nêutrons prontos.

Usando as equações da cinética espacial, podemos estabilizar os mecanismos de produção e perda de nêutrons através do cálculo da potência do reator. Assim de que a potência permanece constante, a quantidade de nêutrons gerados é igual a quantidade de nêutrons absorvidos. O desequilíbrio da população de nêutrons pode resultar no desligamento do reator, caso mais nêutrons sejam absorvidos do que gerados. Caso contrário, pode resultar em um aumento de potência que comprometerá a estrutura e funcionamento do reator (PETERSEN, 2011).

E as relações das seções de choque são definidas (DUDERSTADT, 1976) como:

$$\Sigma_t^g = \Sigma_a^g + \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \quad (2.17)$$

$$\Sigma_a^g = \Sigma_f^g + \Sigma_c^g \quad (2.18)$$

$$\Sigma_R^g \equiv \Sigma_a^g + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq 1}}^G \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \quad (2.19)$$

As seções de choque de remoção (Σ_R^g) caracterizam a probabilidade que o nêutron tem de ser removido do grupo g por absorção e/ou espalhamento para o grupo g' .

No caso de dois grupos de energia, considera-se nulo o espalhamento com ganho de energia. Portanto, para a seção de choque de remoção do grupo térmico resulta:

$$\Sigma_R^2 = \Sigma_a^2 + \Sigma_s^{2 \rightarrow 1} = \Sigma_a^2 \quad (2.20)$$

Escrevendo as equações da cinética de multigrupo com a utilização da variável $\mathbf{u}(x,t)$, teremos um campo vetorial $\mathbf{q}(x,y) = (q_x, q_y)$, é dado pelo produto do coeficiente de difusão \mathbf{D} pelo gradiente da função do fluxo de nêutrons $\mathbf{u}(x,t)$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}\nabla\mathbf{u}, \quad (2.21)$$

Sendo $\mathbf{Q}(x,y)$ a fonte ou sumidouro da quantidade envolvida. O balanço dos fluxos de nêutrons resulta:

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = \mathbf{Q}(x, y), \quad (2.22)$$

Substituindo a equação (2.21) na equação (2.22), obtém-se a equação de Poisson

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\mathbf{u}) + \mathbf{Q} = 0. \quad (2.23)$$

Que deve ser satisfeita em todo domínio.

Aplicando a equação de Poisson (equação 2.23) na equação (2.15) teremos os sistemas de equações da cinética de multigrupo representado por um sistema parabólico segundo (GROSSMAN e HENNART,2007) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla\mathbf{u}) + \mathbf{Q}\mathbf{u} = 0. \quad (2.24)$$

Onde:

$\mathbf{u}(x, t)$: vetor coluna constituído pelas variáveis representando o fluxo de nêutrons e a concentração dos precursores:

$$\mathbf{u} = \{\phi_1, \dots, \phi_G, C_1, \dots, C_I\}^T = \{\Phi \ C\}_{[(G+I)x(G+I)]} \quad (2.25)$$

\mathbf{D} : matriz diagonal dos coeficientes de difusão:

$$\mathbf{D} = diag[v_1 D_1, \dots, v_G D_G, 0, \dots, 0]_{[(G+I) \times (G+I)]}^T \quad (2.26)$$

E \mathbf{Q} : bloco matriz:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{\Gamma} \\ \mathbf{B} & \mathbf{\Lambda} \end{bmatrix}_{[(G+I) \times (G+I)]} \quad (2.27)$$

No qual:

\mathbf{H} : matriz de absorção, espalhamento e seções de choque de fissão

$$\mathbf{H} = +v_{g'} \Sigma_a^{g'} \delta_{gg'} - (1 - \delta_{gg'}) v_g \Sigma_s^{g \rightarrow g'} - (1 - \beta_{eff}) v_g \chi_0^g v \Sigma_f^{g'} \quad [G \times G] \quad (2.28)$$

$$\text{Onde } \begin{cases} \delta_{gg'} = 1, \text{ se } g = g' \\ \delta_{gg'} = 0, \text{ se } g \neq g' \end{cases}$$

$\mathbf{\Gamma}$ e \mathbf{B} são as matrizes dos nêutrons precursores

$$\mathbf{\Gamma} = v_g \chi_i^g \lambda_i \quad [G \times I] \quad (2.29)$$

$$\mathbf{B} = \beta_i v \Sigma_f^g \quad [I \times G] \quad (2.30)$$

$\mathbf{\Lambda}$: matriz diagonal de decaimento

$$\mathbf{\Lambda} = -diag[\lambda_1, \dots, \lambda_I]^T \quad [I \times I] \quad (2.31)$$

\mathbf{S} : vetor coluna do grupo da fonte externa

$$\mathbf{s} = [v_1 s_1, \dots, v_G s_G, 0, \dots, 0]_{[(G+I)]}^T = 0 \quad (2.32)$$

As condições de contorno:

$$\nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{Q} = 0 \text{ em } \Omega \quad (2.33)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0 \text{ em } \Gamma_u \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x})}{\partial \bar{\mathbf{n}}} = 0 \text{ em } \Gamma_q \quad (2.35)$$

Para porção Γ_u : fluxo zero ou condições de Dirichlet de contorno $\Gamma = \bar{\Omega} - \Omega$.

E para Γ_q : Condições Newmann ou de corrente zero.

Onde: $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_q$ e $\Gamma_u \cap \Gamma_q = \emptyset$ e $\bar{\mathbf{n}}$ é a normal para Γ_q .

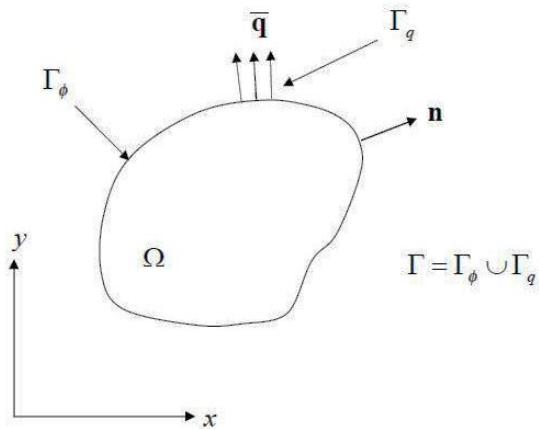


Figura 1: A normal externa ao contorno Γ (RIBEIRO, 2004).

Conforme a descrição apresentada no anexo A, o método utilizado na obtenção da solução analítica das equações da cinética espacial é o método dos elementos finitos (MEF), bem como os principais motivos de sua implementação são (GROSSMAN e HENNART, 2007):

- A formulação do problema da condição do contorno é chamada de “fraca” ou forma variacional, que pode ser obtido diretamente da equação original ou de alguma forma equivalente;
- A discretização dada pelo domínio aproximado Ω^e , que é a união da partes geometricamente simples ou elementos, por exemplo, retangulares e triangulares em problemas com duas dimensões;
- A formulação e solução do problema algébrico linear resultante da expansão dos coeficientes pela aplicação do passo, utiliza a formulação fraca do passo. Na aproximação

discreta, os coeficientes resultantes pela aproximação de Galerkin no espaço do passo satisfaz um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Resumidamente, a aplicação do método dos elementos finitos, consiste em diferentes métodos numéricos que aproximam a solução de problemas de valor de fronteira descritos tanto por equações diferenciais ordinárias quanto por equações diferenciais parciais através da subdivisão da geometria do problema em elementos menores, chamados de elementos finitos, nos quais a aproximação da solução exata pode ser obtida por interpolação de uma solução aproximada.

3. SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

3.1. FORMULAÇÃO FRACA DA EQUAÇÃO DA CINÉTICA ESPACIAL.

Para obter a formulação fraca da equação da cinética espacial, utiliza-se a equação (2.24) definida no domínio Ω juntamente com as condições de contorno definidas em Γ pelas equações (2.34) e (2.35).

A obtenção da formulação fraca é realizada multiplicando-se a equação (2.24) por uma função peso w e integrando sobre todo domínio Ω .

$$w = \{w_1(x), w_2(x), \dots, w_n(x)\}, \quad (3.1)$$

onde $w_n(x)$ é uma função contínua definida no domínio Ω .

Deste modo a equação (2.24) na forma integral pode ser escrita por:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} + \mathbf{Q} \mathbf{u} \right) \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0. \quad (3.2)$$

Aplicando-se a derivação por partes explicitada abaixo:

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{w} d\Omega, \quad (3.3)$$

Onde, o primeiro termo do lado da esquerda da igualdade na equação (3.3) pode ser transformado em uma condição de contorno:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{D} \mathbf{w} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma. \quad (3.4)$$

Substituindo a equação (3.4) em (3.3), tem-se:

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{D} \mathbf{w} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{w} d\Omega. \quad (3.5)$$

Substituindo a equação (3.5) na equação (3.2), obtém-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \mathbf{w} d\Omega - \left(\int_{\Gamma} \mathbf{D} \mathbf{w} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{w} d\Omega \right) + \int_{\Omega} \mathbf{Q} \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0. \quad (3.6)$$

Utilizando as condições de contorno definidas nas equações (2.34) e (2.35) que equivalem a dizer que o fluxo é nulo no contorno Γ_u e que a corrente é nula na direção normal ao contorno Γ_q :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{D} \mathbf{w} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma = 0. \quad (3.7)$$

Logo, a equação (3.2) pode ser reescrita na forma:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla + \mathbf{Q} \mathbf{u} \right) \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.8)$$

3.2. APROXIMAÇÕES DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.

A geração de soluções aproximadas para a equação (2.24) é obtida pela substituição de \mathbf{u} , por funções básicas definidas em um subdomínio Ω^e tal que $\Omega = \sum \Omega^e$. Uma condição necessária para a definição dessas funções básicas é que essas funções tenham as mesmas propriedades de diferenciabilidade e continuidade da função \mathbf{u} , caso contrário poderá haver dificuldades em obter a solução da equação (CORREIA FILHO, 1981).

O método dos elementos finitos propicia a definição dessas funções básicas com as quais se pode aproximar tanto a geometria assim como todas as variáveis que definem o problema em questão: o fluxo de nêutrons, concentração de precursores, etc. Portanto, pode-se, aproximar a geometria pelo método dos elementos finitos da seguinte forma:

$$[\mathbf{x}]_l^e = \sum_{i=1}^m N_i([\mathbf{x}]_l^e)_i \quad (3.9)$$

A utilização do método de Galerkin, que preconiza a utilização da mesma função de interpolação para a função peso \mathbf{w} e a função do fluxo de nêutron \mathbf{u} , resulta:

$$\mathbf{u}_l^e = \sum_{i=1}^m N_i([\mathbf{u}]_l^e)_i \quad (3.10)$$

$$\mathbf{w}_l^e = \sum_{i=1}^m N_i([\mathbf{w}]_l^e)_i \quad (3.11)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_l^e = \sum_{i=1}^m N_i([\dot{\mathbf{u}}]_l^e)_i \quad (3.12)$$

Onde \mathbf{u}_l^e é a componente l do vetor \mathbf{u} ; N_i é a função de interpolação associada ao nó i e elemento e . Ambos são definidos no subdomínio Ω^e . Supondo que esse subdomínio é representado por um elemento quadrático unidimensional com 3 nós ($m=3$), as coordenadas do sistema podem ser representadas pelas seguintes formas matriciais:

$$\mathbf{N} = \{N_i \quad N_j \quad N_k\} \quad (3.13)$$

$$x_i^e = \mathbf{N} \begin{Bmatrix} ([\mathbf{x}]_l^e)_i \\ ([\mathbf{x}]_l^e)_j \\ ([\mathbf{x}]_l^e)_k \end{Bmatrix} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{u}_i^e = \mathbf{N} \begin{Bmatrix} ([\mathbf{u}]_l^e)_i \\ ([\mathbf{u}]_l^e)_j \\ ([\mathbf{u}]_l^e)_k \end{Bmatrix} \quad (3.15)$$

$$\mathbf{w}_i^e = \mathbf{N} \begin{Bmatrix} ([\mathbf{w}]_l^e)_i \\ ([\mathbf{w}]_l^e)_j \\ ([\mathbf{w}]_l^e)_k \end{Bmatrix} \quad (3.16)$$

Onde i, j e k são os nós do elemento finito em questão.

Agrupando todas as variáveis nodais na variável \mathbf{u}_n , isto é, o fluxo de nêutrons e a concentração dos nêutrons atrasados, o vetor \mathbf{u} pode ser representado por:

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\mathbf{u}_n \quad (3.17)$$

Onde a matriz \mathbf{N} é constituída pelas funções de interpolação das variáveis do problema e pode ser colocada na seguinte forma:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \mathbf{N}^G & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}^I \end{bmatrix}_{(G+I) \times 3(G+I)} \quad (3.18)$$

Sendo que, \mathbf{N}^G e \mathbf{N}^I , apresentam as seguintes formas matriciais:

$$\mathbf{N}^G = \begin{bmatrix} N_1^1 & N_2^1 & N_3^1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N_1^2 & N_2^2 & N_3^2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & N_1^G & N_2^G & N_3^G \end{bmatrix}_{G \times (3 \times G)} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{N}^I = \begin{bmatrix} N_1^1 & N_2^1 & N_3^1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N_1^2 & N_2^2 & N_3^2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & N_1^I & N_2^I & N_3^I \end{bmatrix}_{I \times (3 \times I)} \quad (3.20)$$

O gradiente do vetor das variáveis \mathbf{u} pode ser aproximado pela relação:

$$\nabla \mathbf{u} = \nabla \mathbf{N}^I \mathbf{u}_n \quad (3.20a)$$

Onde o gradiente das funções de interpolação $\nabla \mathbf{N}^I$ é definido por:

$$\nabla N^I = \begin{bmatrix} N_{1,x}^1 & N_{2,x}^1 & N_{3,x}^1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ N_{1,y}^1 & N_{2,y}^1 & N_{3,y}^1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N_{1,x}^2 & N_{2,y}^2 & N_{3,z}^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N_{1,y}^2 & N_{2,y}^2 & N_{3,y}^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & N_{1,x}^G & N_{2,x}^G & N_{3,x}^G \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & N_{1,y}^G & N_{2,y}^G & N_{3,y}^G \end{bmatrix}_{6x(3xG)} \quad (3.21)$$

O vetor \mathbf{u}_n tem como componentes as variáveis nodais do problema:

$$\mathbf{u}_n = \{\phi_1^1 \quad \phi_2^1 \quad \phi_3^1 \quad \phi_1^2 \quad \phi_2^2 \quad \phi_3^2 \quad \dots \quad \phi_3^G \quad C_1^1 \quad C_2^1 \quad C_3^1 \quad \dots \quad C_3^1\}_{3x(G+I)} \quad (3.22)$$

E pode ser representado na forma sintética:

$$\mathbf{u}_n = \{\Phi \quad \mathbf{C}\}_{3x(G+I)} \quad (3.23)$$

Substituindo as aproximações definidas nas equações (3.17) e (3.20a) na equação (3.8), a qual representa a equação da formulação integral do problema de difusão neutrônica dependente do tempo, obtém-se uma forma aproximada desse problema:

$$\sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega^e} (\mathbf{N}^T \mathbf{N} \dot{\mathbf{u}}_n + \nabla N^T \cdot \mathbf{D} \nabla N \mathbf{u}_n + \mathbf{N}^T \mathbf{Q} \mathbf{N} \mathbf{u}_n) \cdot \mathbf{w} d\Omega^e = 0 \quad (3.24)$$

Colocando-se a equação (3.24) em sua forma matricial, resulta:

$$\mathbf{A} \dot{\mathbf{u}} + (\mathbf{D} + \mathbf{Q}) \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (3.25)$$

Ou ainda:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}^G & 0 \\ 0 & \mathbf{A}^I \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\Phi} \\ \mathbf{C} \end{Bmatrix} + \left(\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{D}}^G & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{\Gamma} \\ \mathbf{B} & \mathbf{\Lambda} \end{bmatrix} \right) \begin{Bmatrix} \Phi \\ \mathbf{C} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (3.26)$$

Onde os termos das matrizes têm as seguintes representações:

$$\mathbf{A}^G = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^G \cdot \mathbf{N}^G d\Omega^e \quad (3.27)$$

$$\mathbf{A}^I = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^I \cdot \mathbf{N}^I d\Omega^e \quad (3.28)$$

$$\mathbf{D}^G = \int_{\Omega^e} \nabla \mathbf{N}^G \cdot \bar{\mathbf{D}} \nabla \mathbf{N}^G d\Omega^e \quad (3.29)$$

$$\mathbf{H} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^G \cdot \bar{\mathbf{H}} \mathbf{N}^G d\Omega^e \quad (3.30)$$

$$\mathbf{\Gamma} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^G \cdot \bar{\mathbf{\Gamma}} \mathbf{N}^I d\Omega^e \quad (3.31)$$

$$\mathbf{B} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^I \cdot \bar{\mathbf{B}} \mathbf{N}^G d\Omega^e \quad (3.32)$$

$$\mathbf{\Lambda} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^I \cdot \bar{\mathbf{\Lambda}} \mathbf{N}^I d\Omega^e \quad (3.33)$$

$$\mathbf{s}^G = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^G \cdot \bar{\mathbf{s}} d\Omega^e = 0 \quad (3.34)$$

Essas matrizes, são ditas matrizes elementares por serem definidas no subdomínio Ω^e , são integradas numericamente pelo método de Gauss. Os símbolos G representam os grupos de energia dos nêutrons prontos e I os grupos da concentração dos precursores

3.3. DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL

3.3.1. Método direto utilizando o método de Euler implícito

Demonstra-se que o esquema implícito do método de Euler é incondicionalmente estável com respeito a discretização temporal (NAKAMURA, 1977). Isto consequentemente

permite utilizar passos de tempo (Δt) maiores na solução do problema. Contudo, a escolha do intervalo de tempo (Δt) depende também da magnitude das mudanças impostas nos parâmetros. Essas mudanças podem ser introduzidas na solução da equação. A evolução das propriedades, definidas pelo termo a esquerda da equação (3.35), no decorrer tempo requer um cálculo iterativo em cada intervalo de tempo. É possível notar que o esquema implícito é mais complexo de ser utilizado que o esquema explícito, pois o primeiro requer a inversão do sistema de matrizes em cada intervalo de tempo (Δt).

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} = f(\mathbf{u}_{t+\Delta t}, t + \Delta t) \quad (3.35)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} = \frac{\mathbf{u}_{t+\Delta t} - \mathbf{u}_t}{\Delta t} \quad (3.36)$$

Substituindo as equações (3.35) e (3.36) na equação da cinética espacial apresentada na forma matricial pela equação (3.25):

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} + (\mathbf{D} + \mathbf{Q})\mathbf{u}_{t+\Delta t} = 0 \quad (3.37)$$

$$\mathbf{A}\frac{\mathbf{u}_{t+\Delta t} - \mathbf{u}_t}{\Delta t} + (\mathbf{D} + \mathbf{Q})\mathbf{u}_{t+\Delta t} = 0 \quad (3.38)$$

Portanto, o sistema de equações, levando em consideração a composição do vetor \mathbf{u} pode ser apresentada na seguinte maneira:

$$\left(\frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} + \mathbf{D}^G + \mathbf{H} \right) \Phi_{t+\Delta t} = \frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} \Phi_t - \mathbf{G} \mathbf{C}_{t+\Delta t} \quad (3.39)$$

$$\left(\frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} + \mathbf{L} \right) \mathbf{C}_{t+\Delta t} = \frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} \mathbf{C}_t + \mathbf{B} \Phi_{t+\Delta t} \quad (3.40)$$

O fluxo inicial obtido pelo problema estacionário é representado pela seguinte equação:

$$(\mathbf{D}^G + \mathbf{H})\Phi_{t+\Delta t} = 0 \quad (3.41)$$

Este problema apresentado na equação (3.41) pode ainda ser colocado na forma de um problema de cálculo de autovalores e autovetores definido abaixo:

$$(\mathbf{D}^G + \mathbf{H}_a - \mathbf{H}_s)\Phi = \Lambda \mathbf{H}_f \Phi \quad (3.42)$$

O autovalor Λ é uma constante que mantém a igualdade entre os mecanismos de produção e perda de nêutrons no reator.

Com as condições iniciais obtidas pela solução da equação (3.42) e com as equações (3.39) e (3.40) é possível calcular a evolução de $\Phi_{t+\Delta t}$ (fluxo de nêutrons transiente) e $\mathbf{C}_{t+\Delta t}$ (concentração dos precursores dos nêutrons atrasados). De uma forma simplificada, essas equações podem ser colocadas na seguinte forma:

$$\mathbf{K}^G \Phi_{t+\Delta t} = \mathbf{F}^G \quad (3.43)$$

$$\mathbf{M}^I \mathbf{C}_{t+\Delta t} = \mathbf{R}^I \quad (3.44)$$

onde:

$$\mathbf{K}^G = \frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} + \mathbf{D}^G + \mathbf{H} \quad (3.45)$$

$$\mathbf{F}^G = \frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} \Phi_t - \mathbf{\Gamma} \mathbf{C}_{t+\Delta t} \quad (3.46)$$

$$\mathbf{M}^I = \frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} + \Lambda \quad (3.47)$$

$$\mathbf{R}^I = \frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} \mathbf{C}_t + \bar{\mathbf{B}} \Phi_{t+\Delta t} \quad (3.48)$$

Colocando em evidência a concentração dos nêutrons atrasado $\mathbf{C}_{t+\Delta t}$ na equação (3.40) resulta:

$$\mathbf{C}_{t+\Delta t} = \left(\frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} + \Lambda \right)^{-1} \left[\frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} \mathbf{C}_t + B \Phi_{t+\Delta t} \right] \quad (3.49)$$

E substituindo a equação (3.49) na equação (3.39), obtém-se a seguinte equação:

$$\left[\frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} + \mathbf{D}^G + \mathbf{H} + \Gamma \left(\frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} + \Lambda \right)^{-1} B \right] \Phi_{t+\Delta t} = -\Gamma \left(\frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} + \Lambda \right)^{-1} \frac{\mathbf{A}^I}{\Delta t} \mathbf{C}_t + \frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} \Phi_t \quad (3.50)$$

Onde \mathbf{C}_t e Φ_t podem ser obtidos pela solução estacionária da equação da difusão de nêutrons.

3.3.2. Solução analítica da equação da concentração dos precursores

As constantes de tempo associadas aos grupos energéticos do fluxo de nêutrons, segundo (SUTTON e AVILES, 1996) são muito pequenas e inversamente proporcionais a velocidade do grupo de nêutrons ($1/ V^g$), enquanto que as constantes de tempo associadas as concentrações dos nêutrons precursores tendem a ser muito maiores e diretamente proporcional as constantes de decaimento associadas a cada grupo de precursores de nêutrons atrasados (λ_i). Esta observação conduziu a se adotar uma suposição simplificada e frequentemente utilizada nos códigos da teoria da difusão espaço – tempo que reduz o tamanho do sistema linear a ser resolvido sem afetar a precisão da solução

A simplificação é alcançada por meio da utilização da integração analítica das equações de precursores de nêutrons atrasados dependente do tempo. Assumindo uma variação linear da fonte de fissão em cada passo de tempo discretizado. Realizando essa integração analítica, a solução da equação (2.16) é, segundo (SUTTON e AVILES, 1996) dada por:

$$\begin{aligned} C_i(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= e^{-\lambda_i \Delta t} C_i(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{\beta_i}{\lambda_i} \left[\frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} - e^{-\lambda_i \Delta t} \right] \sum_{g=1}^G v \Sigma_f^{g'}(\mathbf{r}, t) \phi^{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &- \frac{\beta_i}{\lambda_i} \left[\frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} - 1 \right] \sum_{g=1}^G v \Sigma_f^{g'}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \phi^{g'}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Esta expressão da solução analítica da concentração dos precursores, segundo (SUTTON e AVILES, 1996), pode ser substituída em vários esquemas de integração numérica que tem as variáveis $C_i(r, t + \Delta t)$ desconhecidas, reduzindo o sistema de equações a um em que as variáveis a serem calculadas nos novos passos de tempo ($t + \Delta t$) serão apenas as relativas aos fluxos de nêutrons. Então, um sistema com N pontos de malha espacial, G grupos de nêutrons e I grupos de precursores de nêutrons atrasados totalizando $N \times (G + I)$ variáveis pode ser reduzido显著mente a um sistema com $N \times G$ variáveis desconhecidas. Uma vez que o novo fluxos de nêutrons foi determinado para o tempo ($t + \Delta t$), usando o esquema de solução analítica da equação (3.51), os precursores podem ser eficientemente atualizados. Este método tem sido implementado com sucesso em vários códigos de transientes neutrônicos, dentre eles, o programa MEF desse trabalho (DHATT e TOUZOT, 1981)

Usando as matrizes definidas no Apêndice B a solução numérica do sistema é apresentada da seguinte forma:

$$\left(\frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} + \mathbf{D}^G + \mathbf{H} - \Gamma \mathbf{P}_{t+\Delta t} \right) \Phi_{t+\Delta t} = -\Gamma \mathbf{T}_t \mathbf{C}_t + \left(\frac{\mathbf{A}^G}{\Delta t} - \Gamma \mathbf{P}_t \right) \Phi_t \quad (3.52)$$

No qual, $\Phi_{t+\Delta t}$ é a solução da equação da difusão no instante $t + \Delta t$, Φ_t é a solução da equação da difusão no instante anterior, G o número de grupos de energia dos nêutrons.

Usando dois grupos de energia e colocando a equação (3.52) em sua forma matricial resulta:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \frac{A^1}{\Delta t} + D^1 + H_a^1 - H_f^1 - \Gamma^1 P_{t+\Delta t}^1 & -\Gamma^1 P_{t+\Delta t}^2 - H_f^2 \\ -\Gamma^2 P_{t+\Delta t}^1 + H_s^{1 \rightarrow 2} & \frac{A^2}{\Delta t} + D^2 + H_a^2 - \Gamma^2 P_{t+\Delta t}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_{t+\Delta t}^1 \\ \Phi_{t+\Delta t}^2 \end{Bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{A^1}{\Delta t} - \Gamma^1 P_t^1 & -\Gamma^1 P_t^2 \\ -\Gamma^2 P_t^1 & \frac{A^2}{\Delta t} - \Gamma^2 P_t^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_t^1 \\ \Phi_t^2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \Gamma^1 \\ \Gamma^2 \end{bmatrix} T_t C_t \end{aligned} \quad (3.53)$$

3.3.2.1. Sistema de equações para a solução numérica.

Assim, o sistema de equações (3.53) que representa a difusão dependente do tempo pode ser apresentada em uma forma simplificada:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_{t+\Delta t}^1 \\ \Phi_{t+\Delta t}^2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} \\ E_{21} & E_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_t^1 \\ \Phi_t^2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix} \{C_t\} \quad (3.54)$$

na qual as componentes das matrizes e vetores são dados por:

$$T_{11} = \frac{A^1}{\Delta t} + D^1 + H_a^1 - H_f^1 - \Gamma^1 P_{t+\Delta t}^1 \quad (3.55)$$

$$T_{12} = -\Gamma^1 P_{t+\Delta t}^2 - H_f^2 \quad (3.56)$$

$$T_{21} = -\Gamma^2 P_{t+\Delta t}^1 + H_s^{1 \rightarrow 2} \quad (3.57)$$

$$T_{22} = \frac{A^2}{\Delta t} + D^2 + H_a^2 - \Gamma^2 P_{t+\Delta t}^2 \quad (3.58)$$

$$E_{11} = \left(\frac{A^1}{\Delta t} - \Gamma^1 P_t^1 \right) \quad (3.59)$$

$$E_{12} = -\Gamma^1 P_t^2 \quad (3.60)$$

$$E_{21} = -\Gamma^2 P_t^1 \quad (3.61)$$

$$E_{22} = \left(\frac{A^2}{\Delta t} - \Gamma^2 P_t^2 \right) \quad (3.62)$$

$$R_1 = -\Gamma^1 T_t \quad (3.63)$$

$$R_2 = -\Gamma^2 T_t \quad (3.64)$$

Para resolver o sistema de equações acoplados nas variáveis $\Phi_{t+\Delta t}^{g=1}$ e $\Phi_{t+\Delta t}^{g=2}$, desmembram-se as componentes referentes aos grupos de energia dos nêutrons. As seguintes equações surgem:

$$T_{11}\Phi_{t+\Delta t}^1 = E_{11}\Phi_t^1 + E_{12}\Phi_t^2 - T_{12}\Phi_{t+\Delta t}^2 + R_1 C_t \quad (3.65)$$

$$T_{22}\Phi_{t+\Delta t}^2 = E_{22}\Phi_t^2 + E_{21}\Phi_t^1 - T_{21}\Phi_{t+\Delta t}^1 + R_2 C_t \quad (3.66)$$

Devido ao grande tamanho do sistema de equação (3.54) e ao acoplamento dos componentes do fluxo de nêutrons referentes aos grupos energéticos um método iterativo é recomendado para se obter a sua solução desse sistema de equações (VERDÚ et al, 1995). Deve ser notado que as sub-matrizes T_{11} , T_{12} , T_{21} , T_{22} , E_{11} , E_{12} , E_{21} e E_{22} são simétricas e em particular T_{11} e T_{22} são diagonais dominantes e positivas, enquanto que a matriz T definida pelas sub-matrizes T_{ij} não apresenta essas propriedades. Portanto, reescrevendo o sistema de equações na forma apresentada em (3.65) e (3.66), ele pode ser eficientemente resolvido por um método de solução de sistemas de equações lineares tais como o método de Gauss ou método do gradiente conjugado conjuntamente com um método iterativo aplicado as equações (3.65) e 3.66). Os métodos iterativos usuais apresentam problemas de convergência se usados diretamente no sistema de equações (3.54).

3.3.2.2. Método SOR

Os métodos interativos são aplicados em códigos da teoria da difusão transiente para resolver o sistema de equações para os novos estados variáveis. Entre eles pode-se destacar o método “Successive Over- Relaxation” (SOR). Este método popular, por ser preciso e eficiente, propicia técnicas de aceleração de convergência (VARGA, 1962).

O Algoritmo utilizado segue os seguintes passos:

1. Utilizar os fluxos de neutrons $\Phi_{t=0}^1$ e $\Phi_{t=0}^2$ da solução estacionária para se obter o novo fluxo de nêutrons do grupo 1 $\Phi_{t+\Delta t}^1$ à partir da equação definida em (3.65):

$$T_{11}[\Phi_{t+\Delta t}^1]_i = E_{11}\Phi_t^1 + E_{12}\Phi_t^2 - T_{12}[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i-1} + R_1 C_t \quad (3.67)$$

2. Obter uma solução estimada para o fluxo de nêutrons do grupo 1 à partir de (3.65) e resolver a equação (3.66) para se obter uma estimativa do fluxo de nêutrons do grupo 2 definido por $\Phi_{t+\Delta t}^2$:

$$T_{22}[\Phi_{t+\Delta t}^2]_i = E_{22}\Phi_t^2 + E_{21}\Phi_t^1 - T_{21}[\Phi_{t+\Delta t}^1]_i + R_2 C_t \quad (3.68)$$

3. O processo interativo será finalizado quando o critério de convergência definido abaixo for atingido, ou seja:

$$\frac{\left|[\Phi_{t+\Delta t}^g]_i\right| - \left|[\Phi_{t+\Delta t}^g]_{i-1}\right|}{\left|[\Phi_{t+\Delta t}^g]_i\right|} \leq \epsilon \quad (3.69)$$

Onde g define o grupo de energia do fluxo de nêutrons e ϵ é a tolerância requerida para a convergência.

4. A aceleração do processo iterativo pode ser obtida usando um método SOR, dado por:

$$T_{11}[\Phi_{t+\Delta t}^1]_{i+1} = E_{11}\Phi_t^1 + E_{12}\Phi_t^2 - T_{12}[\omega[\Phi_{t+\Delta t}^2]_i + (1-\omega)[\Phi_t^2]_{i-1}] \quad (3.70)$$

$$T_{22}[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i+1} = E_{22}\Phi_t^2 + E_{21}\Phi_t^1 - T_{21}[\omega[\Phi_{t+\Delta t}^1]_{i+1} + (1-\omega)[\Phi_t^1]_i] \quad (3.71)$$

Para $i=1$, o esquema ficará com o seguinte aspecto:

$$T_{11}[\Phi_{t+\Delta t}^1]_{i=2} = E_{11}\Phi_t^1 + E_{12}\Phi_t^2 - T_{12}[\omega[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i=1} + (1-\omega)[\Phi_t^2]_{i=0}] \quad (3.72)$$

$$T_{22}[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i=2} = E_{22}\Phi_t^2 + E_{21}\Phi_t^1 - T_{21}[\omega[\Phi_{t+\Delta t}^1]_{i=2} + (1-\omega)[\Phi_t^1]_{i=1}] \quad (3.73)$$

Onde, ω é o fator de relaxamento e é tipicamente escolhido como 1.5, $[\Phi_{t+\Delta t}^1]_{i=0}$ e $[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i=1}$ são os termos das equações (3.72) e (3.73) conhecidos no processo interativo anterior $i=0$ e $i=1$. O termo $[\Phi_{t+\Delta t}^2]_{i=2}$ da equação (3.73) é conhecido depois de se resolver a equação (3.68). O processo é concluído quando as seguintes condições são satisfeitas:

$$\left\| [\Phi_{t+\Delta t}^g]_{i+1} - [\Phi_{t+\Delta t}^g]_i \right\| < tol \quad (3.74)$$

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

O objetivo deste capítulo é apresentar os resultados numéricos obtidos para o fluxo de nêutrons utilizando o método dos elementos finitos e compara-los com os resultados numéricos do fluxo de nêutrons obtidos pelo método de diferenças finitas, em uma dimensão, presentes nas literaturas.

Assume-se como condição inicial, que a distribuição do fluxo de nêutrons no reator será dada pela solução da equação da difusão, em estado estacionário e definida como problema de autovalor. Desta forma, podemos determinar as concentrações iniciais de nêutrons precursores usando o fluxo de nêutrons do problema de autovalor, para serem utilizados nos cálculos de transientes usando as equações da cinética espacial.

4.1. EXEMPLOS NUMÉRICOS UNIDIMENSIONAIS

O primeiro e o segundo problema de teste são os reatores tipo placa BSS-6 –A1 e BSS-6 - A2 (ANL-7416, 1977), com uma dimensão. Os resultados numéricos obtidos com o método dos elementos finitos são comparados com os resultados encontrados na literatura (diferenças finitas).

A utilização da equação (3.54) permite a simulação numérica da equação da cinética espacial e comparações dos resultados numéricos nas seguintes propriedades: concentração dos precursores (estático e temporal), fator criticalidade k_{eff} e fluxo de nêutrons, nos exemplos numéricos BSS-6-A1 e BSS-6-A2 (ANL-7416, 1977).

O problema teste na fase inicial do programa MEF é um reator tipo placa de uma dimensão (NAGAYA e KOBAYASHI, 1995), com três regiões. As regiões extremas 1 e 3 são compostas por um combustível com as mesmas propriedades físicas e a região 2, central, composta por um combustível com propriedades diferentes das regiões 1 e 3. Como condição de contorno, aplica-se a condição de fluxo nulo nas extremidades do núcleo do reator como mostrado na figura 2.

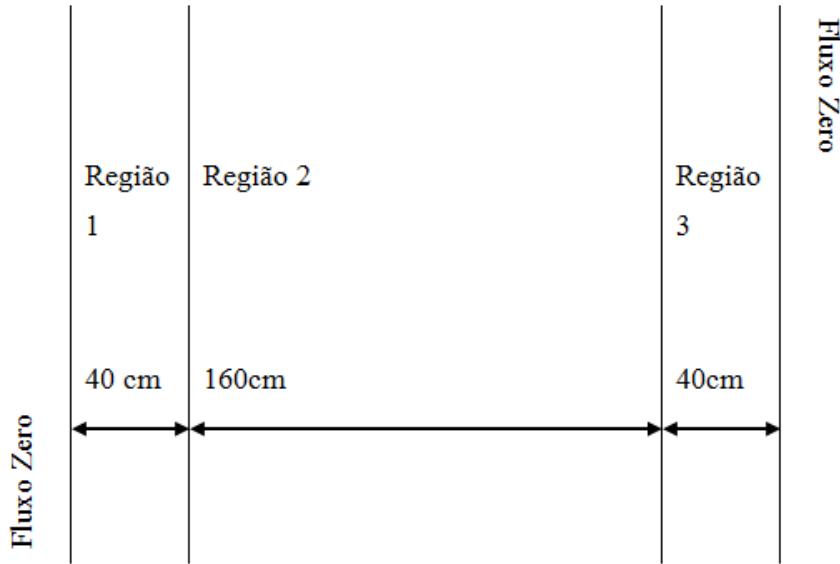


Figura 2: Geometria do reator tipo placa com uma dimensão BSS – 6 (ANL-7416, 1977).

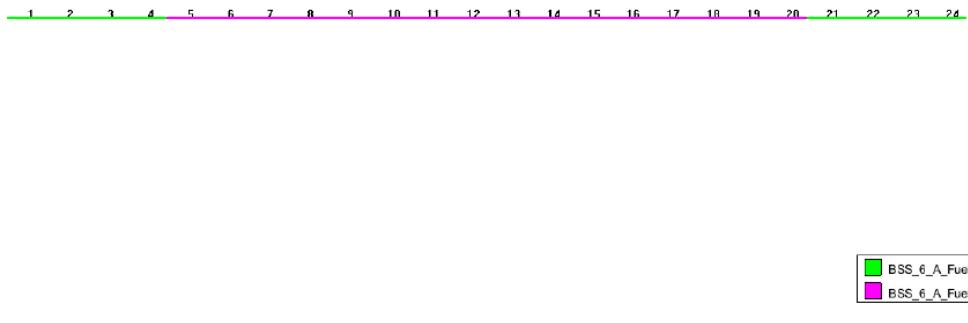


Figura 3: Discretização do reator tipo placa

Na figura 2 mostra-se a geometria do reator e na figura 3 mostra-se a discretização do núcleo do reator utilizando vinte quatro elementos finitos unidimensionais quadráticos com o mesmo comprimento para todos os elementos. Para testar a convergência do método outras discretizações são utilizadas tais como 6, 48, 96, 104 e 192 elementos finitos.

O principal motivo da escolha deste modelo de reator como problema teste, é devido as suas características serem simplificadas em relação aos reatores reais, podendo assim, utilizar as equações da cinética espacial e um amplo aporte teórico, que permite a verificação da precisão do método dos elementos finitos.

A precisão do método dos elementos finitos é testada com a utilização da solução do problema numérico BSS-6 (ANL-7416, 1977), que pode ser calculado por diferentes métodos: nodal, elementos finitos, diferenças finitas, etc. Na tabela 1 são apresentados os valores dos parâmetros físicos de cada região do reator (NAGAYA e KOBAYASHI, 1995).

Constantes	Região 1 e 3	Região 2
$D_1 (cm)$	1.5	1.0
$D_2 (cm)$	0.5	0.5
$\Sigma_{a1}(cm^{-1})$	0.026	0.02
$\Sigma_{a2}(cm^{-1})$	0.18	0.08
$\Sigma_{1 \rightarrow 2}(cm^{-1})$	0.015	0.01
$v\Sigma_{f1}(cm^{-1})$	0.01	0.005
$v\Sigma_{f2}(cm^{-1})$	0.2	0.099
χ_1	1.0	1.0
χ_2	0.0	0.0
$v_1(cm/s)$	1.0×10^7	1.0×10^7
$v_2(cm/s)$	3.0×10^5	3.0×10^5
Constantes dos Nêutrons Atrasados		
Grupos	$\bar{\beta}_i$	$\lambda_i(sec^{-1})$
1	0.00025	0.0124
2	0.00164	0.0305
3	0.00147	0.1110
4	0.00296	0.3010
5	0.00086	1.1400
6	0.00032	3.0100

Tabela 1: Constantes de grupo para 1-D ANL-BSS-6 (ANL-7416, 1977).

4.1.1. Comparação com a solução estacionária.

Para efeito de comparação, utiliza-se as soluções obtidas pelos métodos de diferenças finitas (LIMA, 2005) e o valor de referência do fator de criticalidade (ANL-7416, 1977). Nestes métodos as variáveis dependentes são as fontes de fissão em cada nó ou a derivação do núcleo (NAGAYA e KOBAYASHI, 1995), e para resolver a equação de difusão de nêutrons é utilizado

o método direto (OTT e MENELY, 1969). Os resultados numéricos dos fatores de criticalidade do reator obtidos na literatura e no programa MEF são apresentados na tabela 2.

Para o método dos elementos finitos foram utilizados 6, 24, 48, 96 e 192 elementos finitos e para o caso do método das diferenças finitas foram utilizados 6, 24, 48, 96, 192 pontos. Deve-se lembrar que o número de nós para o elemento finito unidimensional quadrático é de $2n+1$ onde n é o número de elementos.

Método de Diferenças Finitas (Lima, 2005)	Método de Elementos Finitos (Elementos finitos quadráticos)	Benchmark (referência) Fator de criticalidade (ANL-7416,1977)
0.936125 (6 Pontos)	0.9000870 (6 Elementos Finitos)	
0.903943 (24 Pontos)	0.9015320 (24 Elementos Finitos)	
0.902285 (48 Pontos)	0.9015870 (48 Elementos Finitos)	
0.901772 (96 Pontos)	0.9015960 (96 Elementos Finitos)	
0.901540 (192 Pontos)	0.9015960 (192 Elementos finitos)	0.9015507

Tabela 2: Comparação do fator de criticalidade do reator k_{eff} .

Analizando os resultados obtidos na tabela 2, o programa MEF apresenta uma boa precisão mesmo com baixo número de elementos finitos quadráticos e a convergência do fator de criticalidade se situa no valor de 0.9015960. Para o cálculo dos fluxos de nêutrons desse problema faz-se necessário inicialmente realizar uma comparação do fluxo de nêutrons calculados pelo método dos elementos finitos (MEF) e pelo método das diferenças finitas (MDF) com o intuito de escolher uma malha de elementos finitos que reduza as divergências entre os dois métodos, para os fluxos de nêutrons. Apresenta-se na figura 4, o fluxo de nêutrons térmicos obtidos pelo método dos elementos finitos e pelo método das diferenças finitas. Comparando-se os resultados obtidos pelo MEF e pelo MDF, verifica-se que uma discretização acima de 40 elementos finitos, no caso do MEF, permite se obter uma boa representação dessas variáveis em comparação com o MDF. Para a discretização do núcleo do reator será escolhida uma malha composta por 80 elementos finitos.

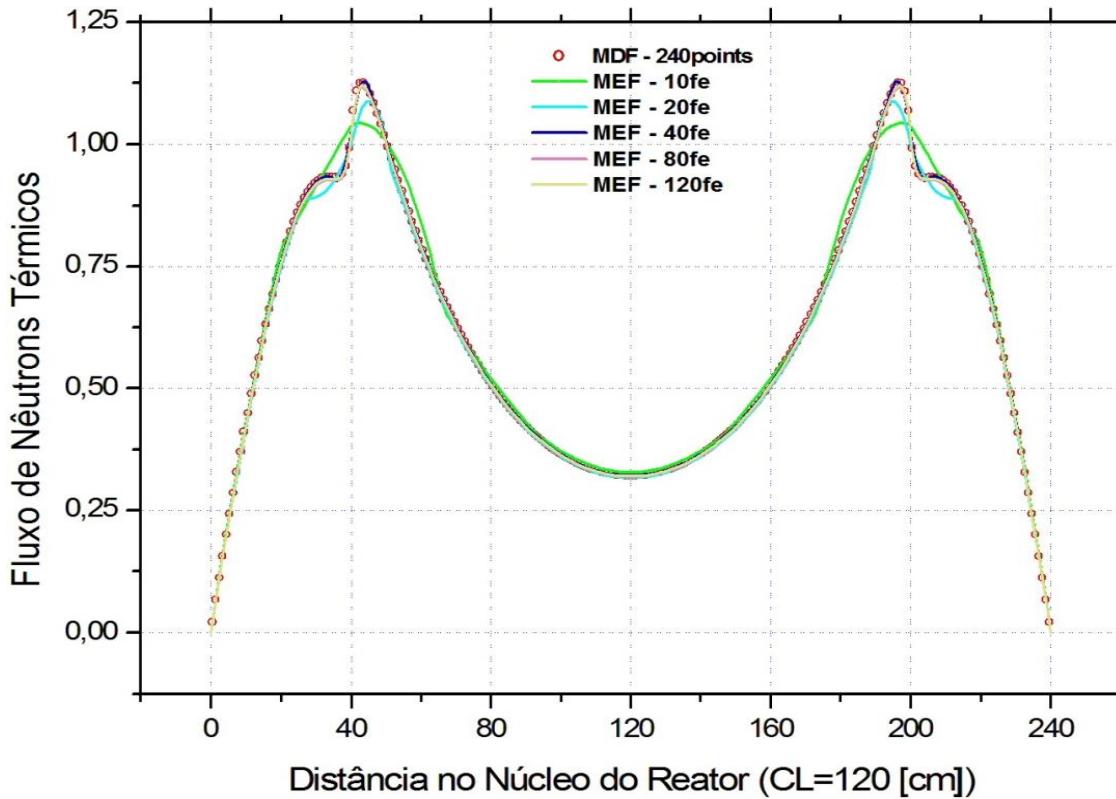


Figura 4: Comparação do fluxo de nêutrons térmicos para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF (10, 20, 40, 80 e 120 elementos finitos) e o MDF.

Na figura 4 e na figura 7, são apresentados respectivamente os fluxos rápido e térmico de nêutrons, calculados pelo programa MEF usando oitenta elementos finitos quadráticos em uma dimensão (cento e sessenta e um nós) e são comparados aos fluxos rápido e térmico obtidos pelo método de diferenças finitas (LIMA, 2005), ambos no caso estático. A tolerância utilizada no programa de elementos finitos para o cálculo estacionário foi de 10^{-10} e 10^{-7} para o método de diferenças finitas (LIMA,2005).

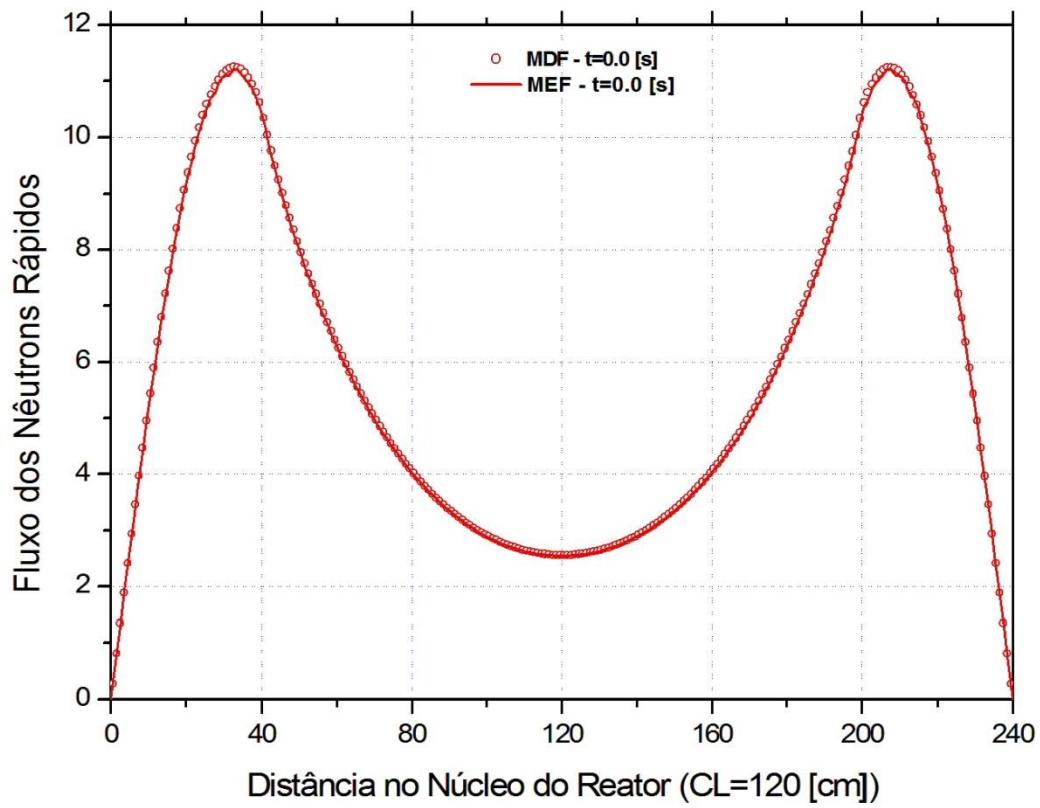


Figura 5: Comparação do fluxo de nêutrons rápido estacionário entre MEF e MDF.

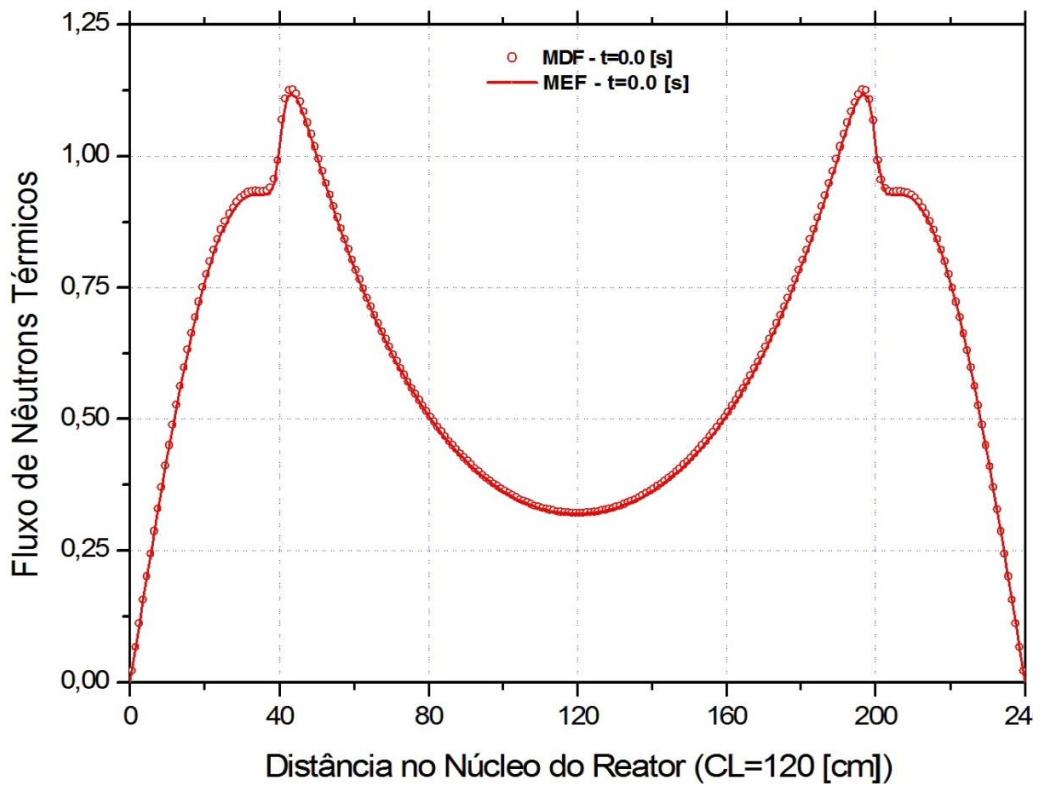


Figura 6: Comparação do fluxo de nêutrons térmico estacionário entre MEF e MDF.

4.1.2. Comparação com a solução dependente do tempo

4.1.2.1. Exemplo numérico BSS-6-A1

No problema BSS-6-A1, a seção de choque de absorção do grupo 2, na primeira região, é linearmente maior 3% em um segundo. Para o cálculo dos fluxos de nêutrons desse problema faz-se necessário inicialmente realizar uma comparação da concentração dos precursores calculados pelo método dos elementos finitos (MEF) e pelo método das diferenças finitas (MDF), no caso estacionário, com o intuito de escolher uma malha de elementos finitos que melhor represente a função das concentrações dos precursores. A comparação da solução dos fluxos de nêutrons entre os dois métodos para já foi realizada anteriormente também para a análise estacionária.

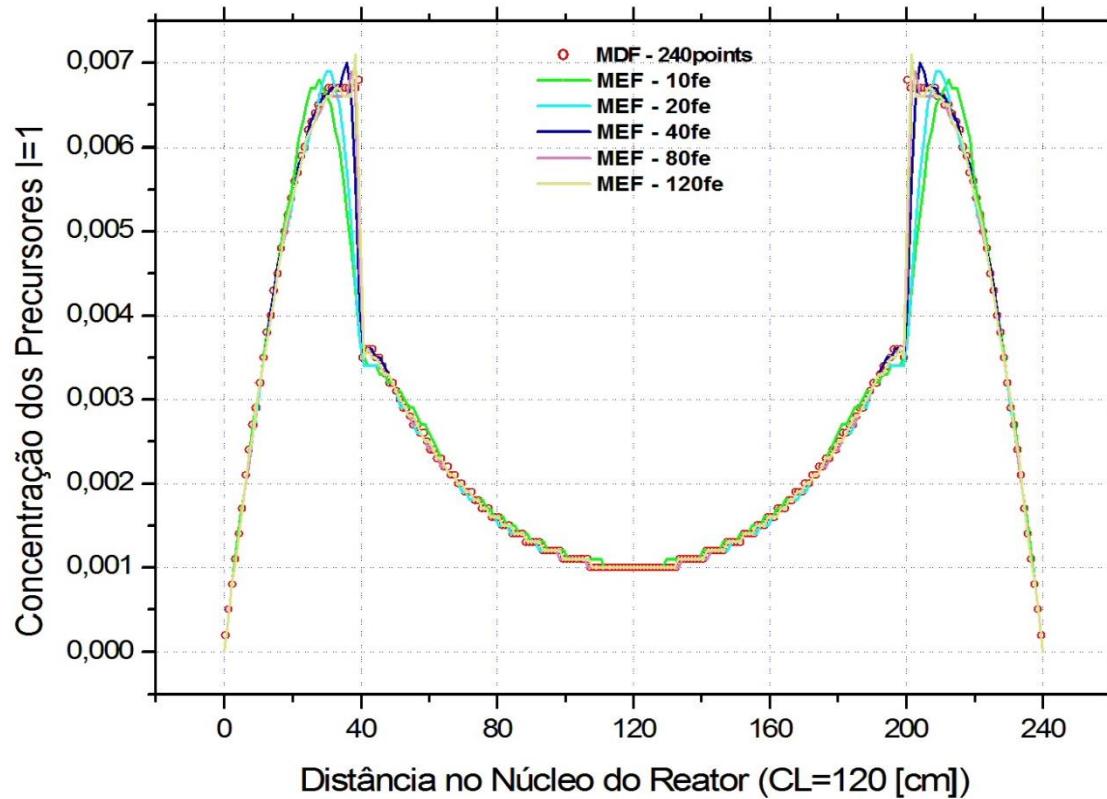


Figura 7: Comparação da concentração do precursor $l=1$ para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF (10, 20, 40, 80 e 120 elementos finitos) e o MDF (240 pontos).

Apresenta-se na figura 7 a concentração dos precursores obtidos pelo método dos elementos finitos e pelo método das diferenças finitas. Comparando-se os resultados obtidos

pelo MEF e pelo MDF, verifica-se novamente que uma discretização maior que 40 elementos finitos, no caso do MEF, também se obtém uma boa representação para essa variável. É importante ressaltar que a colocação de um nó na linha de centro (CL) do núcleo do reator permite obter uma melhor simetria dos resultados como é esperado no cálculo do núcleo de um reator simétrico. Com base nessa comparação de resultados feita anteriormente para o caso estacionário, utiliza-se no cálculo das variações temporais das concentrações de precursores e dos fluxos de nêutrons uma discretização com 80 elementos finitos quadráticos.

Na figura 8 apresenta-se uma comparação dos resultados obtidos, no caso estacionário, para as concentrações dos precursores $i=1, 2, 3, 4, 5$ e 6 entre o MEF utilizando 80 elementos finitos e o MDF utilizando 240 pontos.

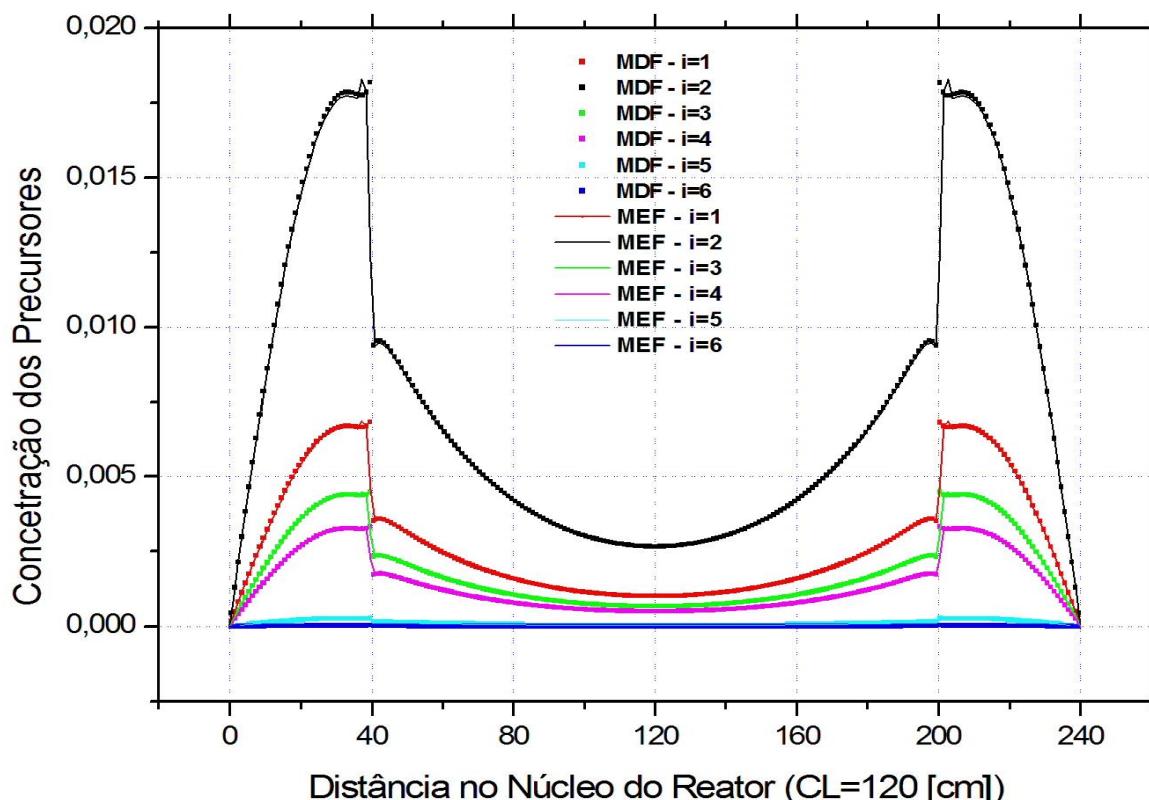


Figura 8: Comparação da concentração dos nêutrons precursores ($i=1, 2, 3, 4, 5$ e 6) para o tempo $t=0.0$ s calculados usando o MEF (80elementos finitos) e o MDF (240 pontos).

Na figura 9 é apresenta-se a evolução temporal do fluxo de nêutrons para o grupo rápido obtidos pelo programa MEF com os obtidos por MDF para os tempos $t=0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0 s.

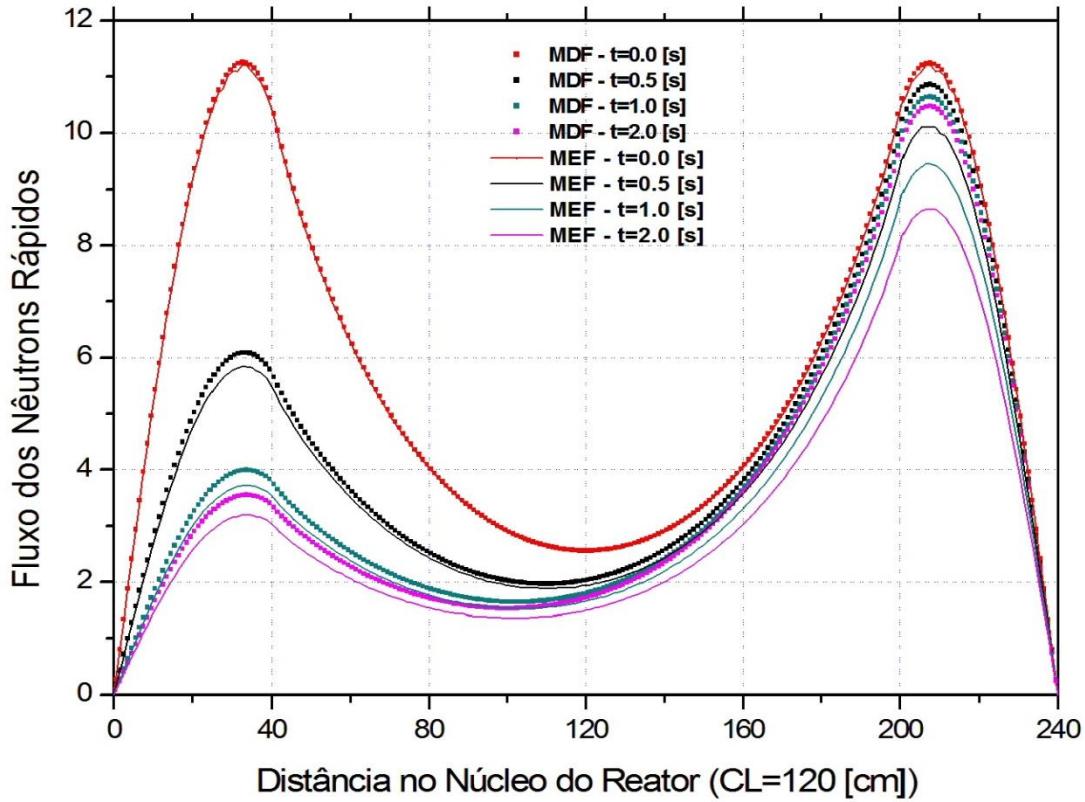


Figura 9: Comparação da evolução temporal dos fluxos de nêutrons rápidos obtidos pelo MEF (80elementos finitos) e MDF (240 pontos).

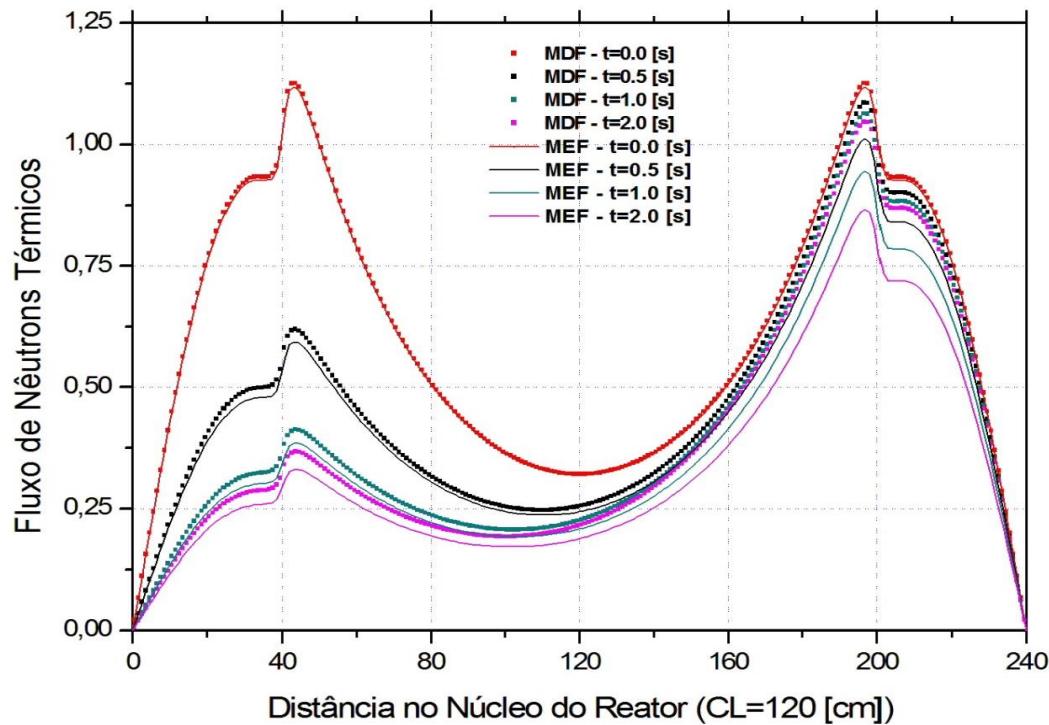


Figura 10: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons térmicos obtidos pelo MEF (80elementos finitos) e pelo MDF (240 pontos).

Na figura 10 acima, apresenta-se uma comparação da evolução temporal dos fluxos de nêutrons do grupo térmico, obtida pelo MEF e pelo MDF para os tempos $t=0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0s . Foi utilizada uma tolerância de 10^{-6} para os fluxos de nêutrons e os seis grupos de nêutrons precursores para o caso do MEF e de 10^{-7} para o caso do MDF com um passo de tempo de $\Delta t = 0.01\text{s}$ para ambos.

Na figura 11 apresenta uma comparação da concentração dos precursores do grupo 1 avaliados nos tempos $t=0.0\text{s}$ e $t=2.0\text{s}$ para o MEF e o MDF.

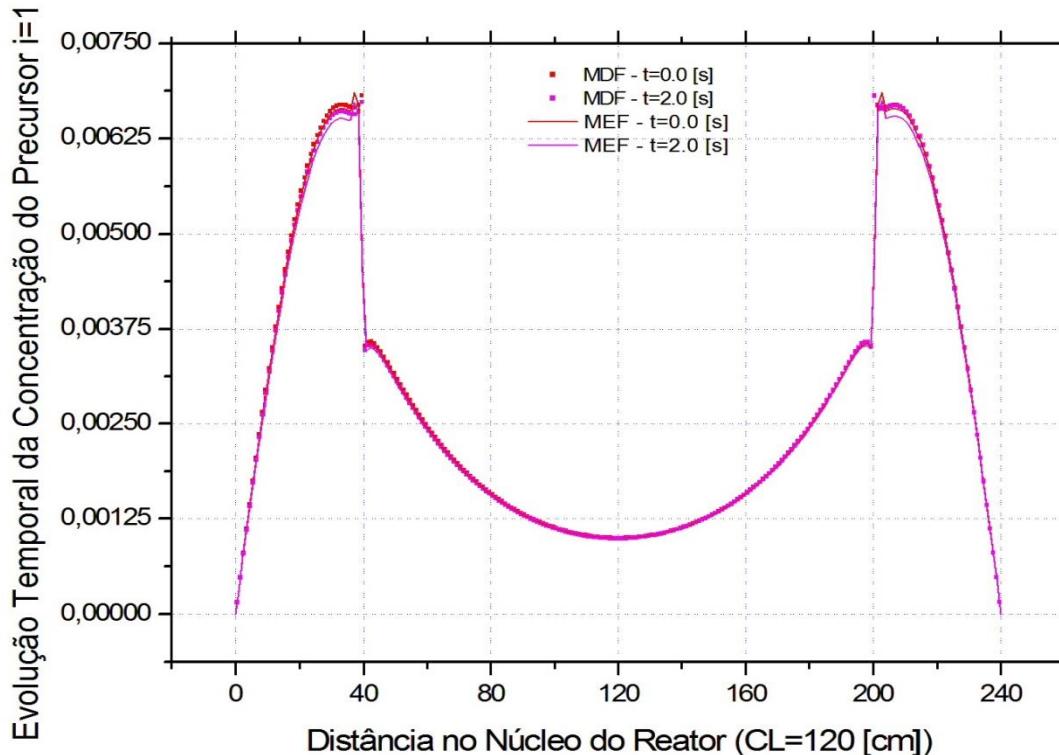


Figura 11: Comparação da concentração dos precursores do grupo $l=1$ avaliados no tempo $t=0.0\text{s}$ e $t=2.0\text{s}$ para o MEF (80elementos finitos) e o MDF (240 pontos).

Na figura 12 apresenta-se uma comparação entre os resultados obtidos para o fluxo de nêutrons do grupo térmico utilizando o MDF, com pontos equidistantes, e o MEF com uma discretização de 104, 120, 318 e 564 elementos finitos com tamanhos variados e com concentração nas regiões onde o fluxo térmico sofre grandes variações, isto é, nas regiões em torno das coordenadas $x=40$ e 200 cm .

Verifica-se existir uma variação máxima em torno de 10% entre as soluções do MEF com tamanho de elementos variáveis e do MDF com pontos equidistantes para o caso do fluxo térmico.

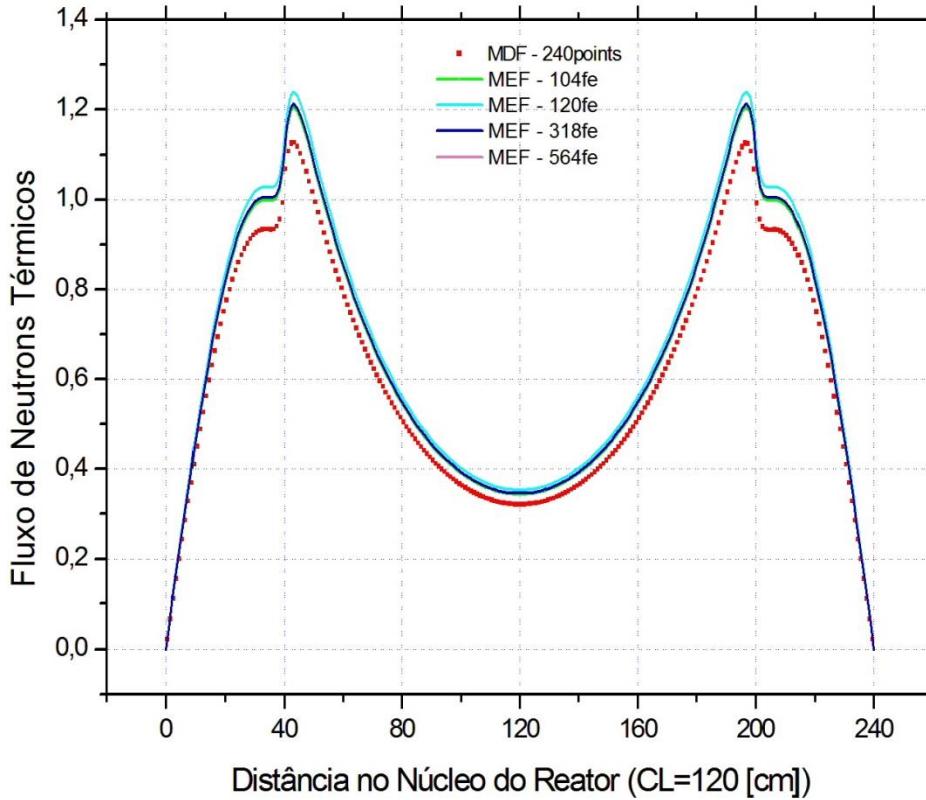


Figura 12: Comparação do fluxo de nêutrons térmicos entre o MEF, com elementos de tamanho variado, e o MDF.

4.1.2.2. Exemplo numérico BSS-6-A2

Este exemplo é similar ao exemplo anterior com mudanças apenas na seção de choque de absorção do grupo 2. Nesse caso, a seção de choque de absorção na região 1 diminui linearmente de 1% em um segundo.

Os resultados obtidos pelo programa MEF fazem uso da solução direta das equações da cinética espacial. Eles são comparados às soluções calculadas e apresentadas por vários referenciais teóricos utilizando diferentes métodos tais como o método nodal, o método das diferenças finitas, ...etc.

Mantém-se neste exemplo a mesma discretização utilizada anteriormente de 80 elementos finitos quadráticos unidimensionais com o mesmo comprimento para todos os elementos. Para este exemplo, os fluxos de nêutrons calculados pelo programa MEF, para os grupos rápidos e térmicos, são apresentados nas figura 13 e figura 14, respectivamente, e comparados com os resultados do MDF nos tempos $t = 0.0, 0.5, 1$ e 2s . A tolerância utilizada no MEF foi de 10^{-6} e no MDF (LIMA, 2005) de 10^{-7} ambos com um passo de tempo $\Delta t = 0.01\text{s}$. Podemos observar que os resultados obtidos pelo MEF são qualitativamente similares aos

obtidos pelo MDF mas, com uma solução apresentando um certo amortecimento nos valores do fluxo, característica similar ao notado no exemplo anterior.

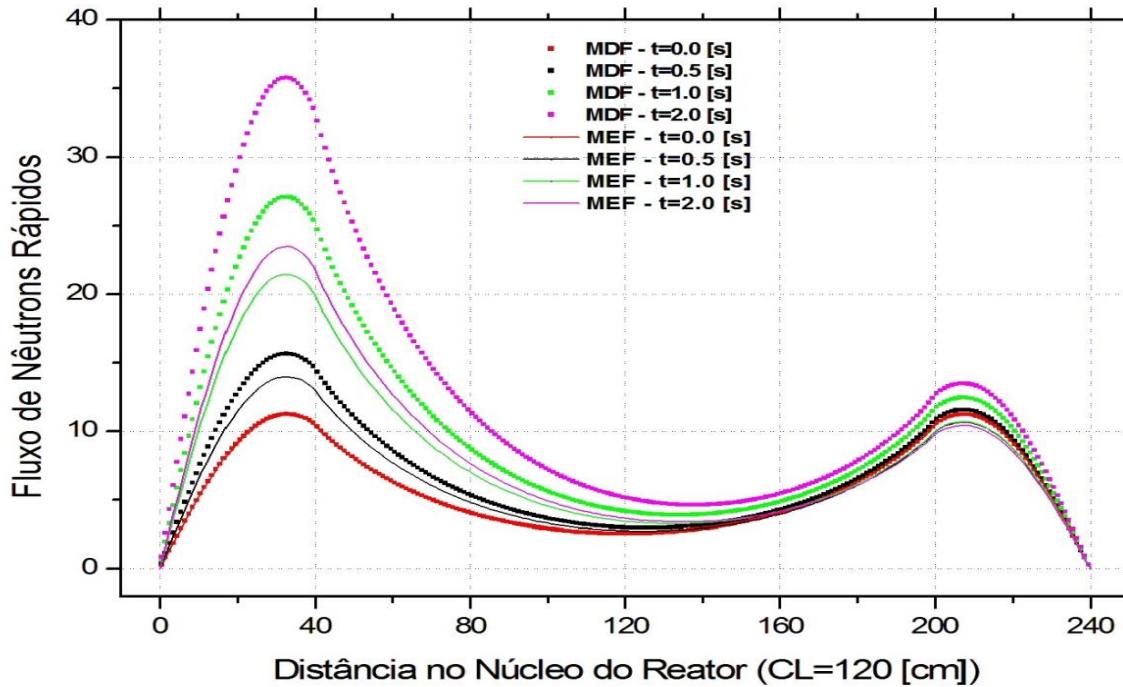


Figura 13: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons rápidos obtidos pelo MEF (80 elementos finitos) e pelo MDF (240 pontos) para o modelo bss-6-a2.

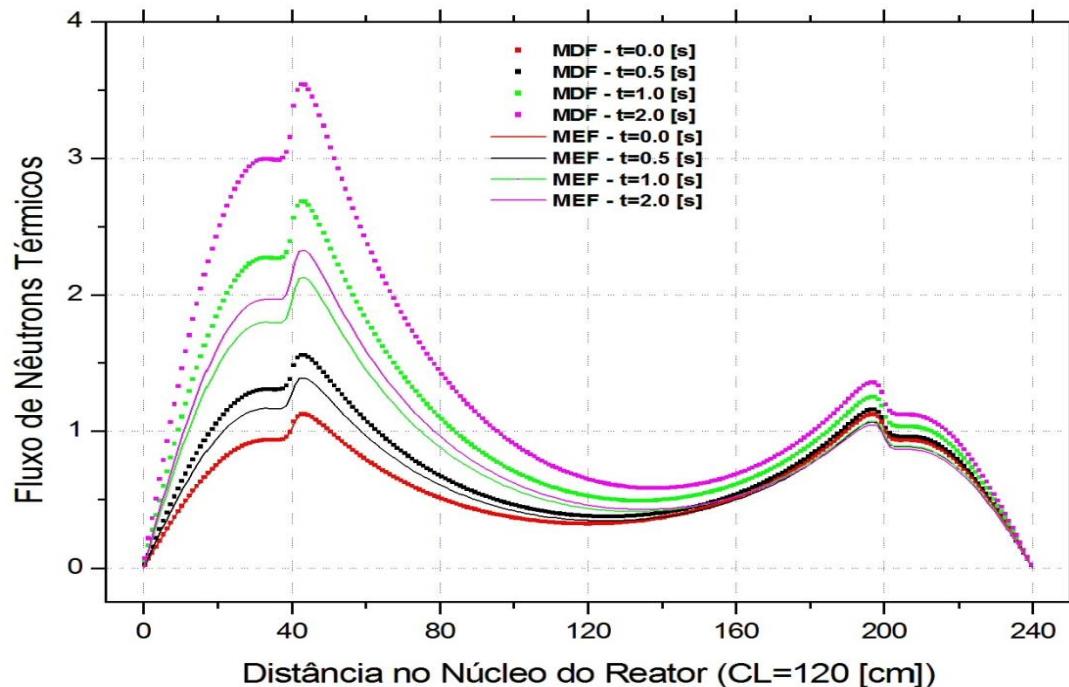


Figura 14: Comparação da evolução temporal do fluxo de nêutrons térmicos obtidos pelo MEF (80 elementos finitos) e pelo MDF (240 pontos) para o modelo bss-6-a2.

5. CONCLUSÕES

A solução das equações da cinética espacial unidimensional com seis grupos de nêutrons precursores e dois grupos de energia foi obtida nesse trabalho, utilizando-se uma aproximação espacial do domínio e das variáveis pelo método de elementos finitos e uma aproximação temporal pelo método direto de Euler implícito. A equação diferencial da concentração dos precursores é resolvida por integração analítica.

Para a solução do problema não linear da equação de difusão de nêutrons no espaço-tempo, apresentada pela equação (3.54), foi criado um módulo denominado CINE no programa MEF utilizando a linguagem de programação Fortran. Para uma aproximação espacial da geometria $[x]_l^e$, do fluxo de nêutrons \mathbf{u}_l^e e $\dot{\mathbf{u}}_l^e$ para dois grupos de energia e das concentrações dos nêutrons precursores C_t^e para os seis grupos recorreu-se ao método dos elementos finitos utilizando um elemento finito unidimensional quadrático definido num sub-domínio Ω^e com coordenadas de referência local. A passagem das coordenadas locais para as globais é feita mediante uma transformação jacobiana do sistema local (η, ζ e ξ) para o global (x, y e z). Para a solução da equação integral da cinética espacial, utiliza-se o método de Galerkin com uma função peso \mathbf{w}_l^e do mesmo tipo que a utilizada para o fluxo de nêutrons \mathbf{u}_l^e . A solução temporal pelo método direto faz uso do método Euler Implícito. Com a utilização das soluções estacionária (equação de difusão de nêutrons definida como um problema de autovalor) os valores de Φ_t e C_t são obtidos e substituídos na equação (3.51) o que permitirá o desenvolvimento dos cálculos das evoluções temporais das variáveis: $\Phi_{t+\Delta t}$ e $C_{t+\Delta t}$.

A solução analítica da equação (3.51), após a aproximação da concentração dos nêutrons precursores por elementos finitos, é disposta em forma matricial com a finalidade de ser utilizada com os algoritmos interativos apresentados nas equações (3.67) e (3.68) em função do tempo. Contudo, a concentração dos nêutrons precursores no tempo inicial $t=0$ são definidos pela solução estacionária da equação da concentração de nêutrons precursores.

Como saída de resultados, o programa MEF fornece os comportamentos dos fluxos térmico e rápido, a concentração dos precursores estacionários, a concentrações dos precursores no tempo e o fator de multiplicação.

No caso estacionário, a tabela 2 apresenta uma comparação dos resultados numéricos obtidos pelo método dos elementos finitos (MEF), pelo método de diferenças finitas (LIMA, 2005) e por uma referência numérica internacional (ANL-7416, 1977) para o caso BSS-6-A. O fator de criticalidade do reator obtido pelo programa MEF apresenta uma boa precisão mesmo

com número baixo de elementos quadráticos com os outros referenciais numéricos. Portanto, pode-se verificar também que o programa MEF nesse problema de teste estacionário, utilizado para avaliar o desempenho do módulo CINE do programa MEF, fornece um comportamento qualitativo correto também para o fluxo de nêutrons rápidos e térmicos são apresentados pelas figuras 5 e 6, respectivamente. A tolerância utilizada para os autovalores (fator de criticalidade) e autovetores (fluxos de nêutrons) no programa MEF (elementos finitos) foi de 1×10^{-10} enquanto que a tolerância apresentada pelo referencial numérico em diferenças finitas (LIMA, 2005) foi de 1×10^{-7} .

No caso dependente do tempo, em que se tratou do problema BSS-6-A1, as variações temporais do fluxo de nêutrons para o grupo de energia rápido e térmico e para a concentração de precursores, utilizando uma aproximação de 80 elementos finitos unidimensionais quadráticos, apresentaram para ambos os métodos a mesma convergência no tempo com um desvio no fluxo de nêutrons, do tipo amortecimento, nos tempos $t = 0.5, 1.0$ e 2.0 segundos. Algumas melhorias devem ser aplicadas ao MEF no intuito de aproximar a solução obtida por esse programa a solução obtida por diferenças finitas. O desvio em relação a distribuição do fluxo inicial é predominante na região 1 onde a variação da seção de choque de absorção é aplicada. O tempo de convergência para o processamento dessas soluções é praticamente o mesmo.

No segundo caso dependente do tempo definido pelo modelo BSS-6-A2 a seção de choque de absorção da região 1 do grupo dois de energia diminui linearmente em 1% em um segundo, os fluxos de nêutrons calculados pelo programa MEF para os grupos rápidos e térmicos apresentaram um desvio relativamente grande, predominantemente na região 1, onde a variação da seção de choque de absorção é aplicada. Nesse caso, também foram utilizados 80 elementos finitos unidimensionais quadráticos, uma tolerância de 10^{-6} e um passo de tempo de $\Delta t = 0.01$ segundos. Podemos afirmar que, apesar do método direto desenvolvido no módulo CINE do programa MEF convergir no caso I e II o comportamento quantitativo dos fluxos de nêutrons no tempo, tanto no caso I como no caso II, precisa ser estudado mais criteriosamente para averiguar o que estaria produzindo um amortecimento crescente da solução com o tempo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARGONNE NATIONAL LABORATORY. Argonne code center: benchmark problem book. ANL – 7416, Suplement 1, 1972.
- ARGONNE NATIONAL LABORATORY. Argonne code center: benchmark problem book. ANL – 7416, Suplement 1, 1977.
- BATHE, K. J., WILSON, E. I. Numerical methods in finite element analysis. Ed.: Prentice – Hall, Nova Jersey, 1976.
- CASE, K. M., ZWEIFEL, P. F. Linear transport theory. Addison- Wesley, 1967.
- CORREIA FILHO, A. Solução da equação de difusão de neutrons a dois grupos de energia por elementos finitos triangulares. Tese (Mestre em Ciência e Tecnologia Nuclear), Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Pernambuco, 1981.
- DHATT, G., TOUZOT, G. Une présentation de la méthode des éléments Finis. Ed.: Maloine S.A., Paris, 1981.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J. Nuclear reactor analysis. Ed.: John Wiley & Sons, New York, 1976.
- DUDERSTADT, J. J., MARTIN, W. R. Transport theory. Ed.: John Wiley & Sons, New York, 1979.
- GROSSMAN, L. M., HENNART, J. P. Nodal diffusion methods for space – time neutron kinetics. *Prog. Nucl. Energy*, v. 49, p. 181 – 216, 2007.
- HAGEMAN, L. A., YASINSKY, J. B. Comparison of alternating – direction time – differencing methods with other implicit methods for the solution of neutron group diffusion equations. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 38, p. 8 – 32, 1969.
- HENRY, A. F. Nuclear reactor analysis. Ed.: MIT Press, Cambridge, 1975.
- HENRY, A. F. Refinements in accuracy of coarse – mesh finite difference solution of the group diffusion equations. *Proc. Seminar on Numerical Reactor Equations*, v. 447, p. 17 – 21, 1972.
- HENRY, A. F., CURLEE, N. J. Verification of a method for treating neutron space – time problems. *Nucl. Sci. Eng*, v. 4, p. 727 – 744, 1958.
- HENRY. A. F. Review of computational methods for space – time kinetics. *American Nuclear Society*, p. 3 – 15, 1969.
- LAMARSH, J. R. Introduction to nuclear reactor theory. Ed.: Addison-Wesley Publishing Co., New York, 1966.

- LANGENBUCH, S., MAURER, W., WERNER, W. Coarse – mesh flux – expansion method for the analysis of space – time effects in large light water reactor cores. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 63, p. 437 – 456, 1977.
- LEWINS, J. Nuclear reactor kinetics and control. Ed.: Pergamon, Oxford, 1978.
- LIMA, Z. R. Aplicação do método dos pseudo – harmônicos à cinética multidimensional. Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear) - COOPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.
- MAIA, C. R. M. Cálculos em teoria de transporte no modelo de um grupo para célula de três regiões. Tese (Mestre em Reatores Nucleares de Pôtencia e Tecnologia do Combustível Nuclear), Instituto de Energia Atômica, São Paulo, 1979.
- MARK, J. C. The spherical harmonics method, I. Chalk River, Ont., National Research Council of Canada, 1957. (CRT-340).
- NAGAYA, Y., KOBAYASHI, K. Solution of 1-D multi- group time – dependent diffusion equations using the coupled reactors theory. *Ann. Nucl. Energy*, v. 22, p. 421 – 440, 1995.
- NAKAMURA, S. Computational methods in engineering and science with applications to fluid dynamics and nuclear systems. Ed.: John Wiley & Sons, 1977.
- OTT, K. O., MENELEY, D. A. Accuracy of the quasistatic treatment of spatial reactor kinetics. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 36, p. 276, 1969.
- PETERSEN, C. Z. Solução analítica das equações da cinética pontual e especial da teoria de difusão de neutrons pelas técnicas da GITT e decomposição. Tese (Doutorado em Engenharia) Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.
- RIBEIRO, F. L. B. Introdução ao métodos elementos finitos. Programa de Engenharia Civil – COOPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004.
- STACEY, W. M. Jr. Variational methods in nuclear reactor physics, Nuclear Science and Technology Series. n. 10. Ed.: Academic, New York, 1974.
- STACEY, W. M., Jr. Space - time nuclear reactor kinetics, Nuclear Science and Technology Series, nº5. Ed.: Academic, New York, 1969.
- SUTTON, T. M., AVILES, B. N. Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations. *Prog. Nucl. Energy*, v. 30, p. 119 – 182, 1996.
- VARGA, R. S. Matrix iterative analysis. Prentice – Hall, Englewood Cliffs, N. J, 1962.
- VERDÚ, G., GINESTAR, D., VIDAL, V., MUÑOZ – COBO, J. L. A consistent multidimensional nodal method for transient calculations. *Ann. Nucl. Energy*, v. 22, pp. 395-410, 1995.

- VIGIL, J. C. Solution of the reactor kinetics equations by analytic continuation. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 29, p. 329 – 401, 1967.
- WEINBERG, A. M., WIGNER, E. P. *The physical theory of neutron chain reactors*. University of Chicago Press, Chicago, 1958.
- YASINSKY, J. B., HENRY, A. F. Some numerical experiments concerning space – time reactor kinetics behavior. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 22, p. 171 – 181, 1965.
- ZIENKIEWICZ, O. C., MORGAN, K. *Finite elements & approximation*. Ed.: Dover Publications, Inc., New York, 1983.

APÊNDICE A. DIFUSÃO ESTACIONÁRIA DE NÊUTRONS

A.1. O PROBLEMA DE DIFUSÃO ESTACIONÁRIA DE NÊUTRONS

A.1.1. Para um grupo de energia

A equação da difusão para um grupo de energia, definida como um problema de autovalor é dada por:

$$-\mathbf{D}\nabla^2\phi(x, t) + \Sigma_a\phi(x, t) = \frac{1}{k_{eff}}\nu\Sigma_f\phi(x, t) \quad (\text{A.1})$$

A.1.2. Para dois grupos de energia

A equação da difusão estacionária pode ser obtida por meio da equação (2.24), eliminando a variação do fluxo de nêutrons no tempo.

$$-\nabla \cdot \mathbf{D}\nabla \mathbf{u}(x) + \mathbf{H}\mathbf{u}(x) = \mathbf{s} \quad (\text{A.2})$$

onde \mathbf{D} é a matriz diagonal dos coeficientes de difusão:

$$\mathbf{D} = \text{diag}[D^1, \dots, D^G]_{[G \times G]}^T \quad (\text{A.3})$$

e onde \mathbf{H} é a matriz composta das matrizes das seções de choque de remoção \mathbf{H}_R , das seções de choque de espalhamento \mathbf{H}_s e das seções de choque de fissão dos nêutrons \mathbf{H}_f :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_R - \mathbf{H}_s - \mathbf{H}_f \quad (\text{A.4})$$

Para dois grupos de energia, o rápido (1) e o térmico (2), \mathbf{D} apresenta a seguinte forma matricial:

$$\bar{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} D^1 & 0 \\ 0 & D^2 \end{bmatrix}_{(2 \times 2)} \quad (\text{A.5})$$

e a matriz H a forma;

$$H_R = \begin{bmatrix} \Sigma_R^1 & 0 \\ 0 & \Sigma_R^2 \end{bmatrix}_{(2x2)} \quad (\text{A.6})$$

$$H_s = \begin{bmatrix} 0 & \Sigma_s^{2 \rightarrow 1} \\ \Sigma_s^{1 \rightarrow 2} & 0 \end{bmatrix}_{(2x2)} \quad (\text{A.7})$$

$$H_f = \begin{bmatrix} \chi_0^1 v \Sigma_f^1 & \chi_0^1 v \Sigma_f^2 \\ \chi_0^2 v \Sigma_f^1 & \chi_0^2 v \Sigma_f^2 \end{bmatrix}_{(2x2)} \quad (\text{A.8})$$

O vetor do fluxo de nêutrons \mathbf{u} , nesse caso, é representado por:

$$\mathbf{u} = \{\phi^1, \dots, \phi^G\}^T = \{\Phi\}_{[Gx1]} = \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{Bmatrix}_{(2x1)} \quad (\text{A.9})$$

Deve-se ser considerado no caso de dois grupos de energia, que essencialmente todos nêutrons de fissão nascem no grupo rápido. Portanto, os espectros de fissão são dados por (DUDERSTADT,1976):

$$\chi^1 = \int_{E_1}^{E_0} \chi(E) dE = 1 \quad (\text{A.10})$$

$$\chi^2 = \int_{E_2}^{E_1} \chi(E) dE = 0 \quad (\text{A.11})$$

A fonte de fissão somente aparece no grupo pronto da equação:

$$s_f^1 = v^1 \Sigma_f^1 \phi^1 + v^2 \Sigma_f^2 \phi^2 \quad (\text{Pronto}) \quad (\text{A.12})$$

$$s_f^2 = 0 \quad (\text{Térmico}) \quad (\text{A.13})$$

Então, a seção de choque de remoção para o grupo térmico é somente:

$$\Sigma_R^2 = \Sigma_a^2 - \Sigma_s^{2 \rightarrow 1} = \Sigma_a^2 \quad (\text{A.14})$$

Considerando a aplicação da teoria da difusão para dois grupos de energia para reatores crítico, pode-se então assumir que as derivadas no tempo e o termo da fonte externa são iguais a zero. Desta forma, a equação da difusão para dois grupos de energia, definida como um problema de autovalor é:

$$-\nabla \cdot D^1 \nabla \phi^1 + \Sigma_R^1 \phi^1 = \frac{1}{\lambda} (\nu \Sigma_f^1 \phi^1 + \nu \Sigma_f^2 \phi^2) \quad (\text{A.15})$$

$$-\nabla \cdot D^2 \nabla \phi^2 + \Sigma_a^2 \phi^2 = \Sigma_s^{1 \rightarrow 2} \phi^1 \quad (\text{A.16})$$

A.2. FORMULAÇÃO INTEGRAL DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO ESTACIONÁRIA

A.2.1. Formulação integral para dois grupos de energia

Para se obter a formulação fraca da equação da difusão estacionária, utilizam-se as equações (3.17) e (3.18) na forma integral para dois grupos de energia definida no domínio Ω . Utilizando a formulação de Galerkin, iguala-se a função peso w com o fluxo de nêutrons u na equação (3.11). As equações da difusão estacionária tomam a seguinte forma:

$$-\int_{\Omega} \phi^1 \nabla \cdot D^1 \nabla \phi^1 d\Omega + \int_{\Omega} \phi^1 \left[\Sigma_R^1 \phi^1 - \frac{1}{\lambda} (\nu \Sigma_f^1 \phi^1 + \nu \Sigma_f^2 \phi^2) \right] d\Omega = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$-\int_{\Omega} \phi^2 \nabla \cdot D^2 \nabla \phi^2 d\Omega + \int_{\Omega} \phi^2 [\Sigma_a^2 \phi^2 - \Sigma_s^{1 \rightarrow 2} \phi^1] d\Omega = 0 \quad (\text{A.18})$$

Reescrevendo-as, tem-se:

$$\int_{\Omega} (-\phi^1 \cdot \nabla D^1 \nabla \phi^1 + \phi^1 \Sigma_R^1 \phi^1) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{1}{\lambda} \phi^1 [(\nu \Sigma_f^1 \phi^1 + \nu \Sigma_f^2 \phi^2)] d\Omega \quad (\text{A.19})$$

$$\int_{\Omega} (-\phi^2 \cdot \nabla D^2 \nabla \phi^2 + \phi^2 \Sigma_R^2 \phi^2) d\Omega = \int_{\Omega} \phi^2 [(\Sigma_s^{1 \rightarrow 2} \phi^1)] d\Omega \quad (\text{A.20})$$

A.3. SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS

A.3.1. Aproximações das equações da difusão por elementos finitos

A geometria e os fluxos de nêutrons são aproximados por elementos finitos definidos num subdomínio Ω^e :

$$x = \sum_{i=1}^{ne} (x)^e \quad (\text{A.21})$$

$$(\phi^g)^e = \sum_{i=1}^{nnel} ([\phi]_i^g)^e \quad (\text{A.22})$$

no qual ne é o número de elementos finitos resultante da discretização do domínio. A justaposição dos elementos finitos define uma aproximação para todo o domínio:

Para cada subdomínio, as funções de aproximação são definidas pela interpolação da geometria (equação A.23) e do fluxo de nêutrons (equação A.24) da seguinte forma:

$$x^e = \sum_{i=1}^{nnel} N_i(x_i)^e \quad (\text{A.23})$$

$$(\phi^g)^e = \sum_{i=1}^{nnel} N_i([\phi]_i^g)^e \quad (\text{A.24})$$

$$(\nabla \phi^g)^e = \begin{Bmatrix} \frac{\partial (\sum_{i=1}^{nnel} N_i [\phi]_i^g)^e}{\partial x} \\ \frac{\partial (\sum_{i=1}^{nnel} N_i [\phi]_i^g)^e}{\partial y} \end{Bmatrix} \quad (\text{A.25})$$

onde N_i é a função de interpolação definida para o nó i e elemento e e, $nnel$ é número de nós por elemento.

A.3.2. Aproximação para duas dimensões

Na utilização de um sistema de coordenadas cartesianas em 2D e elementos finitos triangulares lineares, a geometria aproximada pode ser obtida pelas seguintes expressões:

$$x^e = \{N_1, N_2, N_3\} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix}^e \quad (\text{A.26})$$

$$y^e = \{N_1, N_2, N_3\} \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{Bmatrix}^e \quad (\text{A.27})$$

E para fluxo de nêutrons:

$$(\phi^g)^e = \{N_1 \quad N_2 \quad N_3\} \begin{Bmatrix} \phi_1^g \\ \phi_2^g \\ \phi_3^g \end{Bmatrix}^e \quad (\text{A.28})$$

O gradiente do fluxo de nêutrons da equação (A.29), é dado por:

$$\begin{aligned} (\nabla \phi^g)^e &= \begin{Bmatrix} \frac{\partial(\sum_{i=1}^{nne} N_i [\phi]_i^g)^e}{\partial x} \\ \frac{\partial(\sum_{i=1}^{nne} N_i [\phi]_i^g)^e}{\partial y} \end{Bmatrix} = \left(\nabla \begin{bmatrix} N_{1,x} & N_{2,x} & N_{3,x} \\ N_{1,y} & N_{2,y} & N_{3,y} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^g \\ \phi_2^g \\ \phi_3^g \end{Bmatrix} \right)^e \\ &= [\nabla N]^e \{\Phi^g\}^e \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Aplicando a equação (A.29) nas equações da difusão (A.19) e (A.20), obtém-se os seguintes sistemas de equações:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{ne} \left(\int_{\Omega^e} ([\nabla N]^e \cdot D^1 [\nabla N]^e + \{N\}^e \Sigma_t^1 \{N\}^e) \{\Phi^1\}^e d\Omega^e \right) \\ = \sum_{i=1}^{ne} \left(\int_{\Omega^e} \frac{1}{\lambda} \{N\}^e \{\Phi^1\}^e (v \Sigma_f^1 \{N\}^e \{\Phi^1\}^e \right. \\ \left. - v \Sigma_f^2 \{N\}^e \{\Phi^2\}^e) d\Omega^e \right) \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{ne} \left(\int_{\Omega^e} [[\nabla N]^e \cdot D^2 [\nabla N]^e + \{N\}^e \Sigma_a^2 \{N\}^e] \{\Phi^2\}^e d\Omega^e \right) \\ = \sum_{i=1}^{ne} \left(\int_{\Omega} \{\Phi^2\}^e \{N\}^e \Sigma_s^{1 \rightarrow 2} \{N\}^e \{\Phi^1\}^e d\Omega^e \right) \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Pode-se definir as matrizes K e M como sendo:

$$[K^1]^e = [D^1]^e + [H_a^1]^e + [H_s^1]^e \quad (\text{A.32})$$

$$[K^2]^e = [D^2]^e + [H_a^2]^e \quad (\text{A.33})$$

$$[\mathbf{M}^1]^e = [\mathbf{H}_f^1]^e + [\mathbf{H}_f^2]^e \quad (\text{A.34})$$

Se discretizar o fluxo de nêutrons em dois grupos de energias (G=2) produz os seguintes sistemas de equações:

$$(\mathbf{D}^1 + \mathbf{H}_a^1 + \mathbf{H}_s^1) = \Lambda(\mathbf{H}_f^1 + \mathbf{H}_f^2)\Phi^1 \quad (\text{A.35})$$

$$(\mathbf{D}^2 + \mathbf{H}_a^2)\Phi^2 = \mathbf{H}_s^{1 \rightarrow 2}\Phi^1 \quad (\text{A.36})$$

No qual, os componentes da matriz H são definidos nas equações (A.32) e (A.33):

$$\mathbf{H}_a = -v_{g'}\Sigma_a^{g'}\delta_{gg'} \quad (\text{A.37})$$

$$\mathbf{H}_s = (1 - \delta_{gg'})v_g\Sigma_s^{g' \rightarrow g} \quad (\text{A.38})$$

$$\mathbf{H}_f = (1 - \beta)v_g\chi_0^g(v\Sigma_f)^{g'} \quad (\text{A.39})$$

Com as aplicações das equações (A.33) e (A.34) nas equações (A.30) e (A.31) elas podem ser reescritas como:

$$\sum_{e=1}^{ne} [\mathbf{K}^1]^e \{\Phi^1\}^e = \frac{1}{\lambda} \sum_{e=1}^{ne} [\mathbf{M}^1]^e \{\Phi^1\}^e \quad (\text{A.40})$$

$$\sum_{e=1}^{ne} [\mathbf{K}^2]^e \{\Phi^2\}^e = \sum_{e=1}^{ne} [\mathbf{H}_s^{1 \rightarrow 2}]^e \{\Phi^1\}^e \quad (\text{A.41})$$

Sendo que:

$$[\mathbf{K}^1]^e = \int_{\Omega^e} ([\nabla N]^e \cdot D^1 [\nabla N]^e + \{N\}^e \Sigma^1 \{N\}^e) d\Omega^e \quad (\text{A.42})$$

$$[\mathbf{M}^1]^e = \int_{\Omega^e} \{N\}^e (v\Sigma_f^1 \{N\}^e - v\Sigma_f^2 \{N\}^e) d\Omega^e \quad (\text{A.43})$$

$$[\mathbf{K}^2]^e \int_{\Omega^e} ([\nabla N]^e \cdot D^2 [\nabla N]^e + \{N\}^e \Sigma^2 \{N\}^e) d\Omega^e \quad (\text{A.44})$$

$$[\mathbf{H}_s^{1 \rightarrow 2}]^e = \int_{\Omega^e} \{N\}^e \Sigma_s^{1 \rightarrow 2} \{N\}^e d\Omega^e \quad (\text{A.45})$$

APÊNDICE B. DEFINIÇÕES DAS MATRIZES DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS DINÂMICO

$$\bar{D} = \begin{bmatrix} D^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D^G \end{bmatrix}_{(G \times G)} \quad (B.1)$$

$$H = H_a + H_s^d + H_s^u + H_f \quad (B.2)$$

H_a : matriz de absorção de nêutrons

$$H_a = \begin{bmatrix} H_a^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_a^G \end{bmatrix}_{(G \times G)} \quad (B.3)$$

H_s^d : matriz de espalhamento down de nêutrons

$$H_s^d = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ -H_s^{1 \rightarrow 2} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -H_s^{1 \rightarrow G} & -H_s^{2 \rightarrow G} & \dots & 0 \end{bmatrix}_{(G \times G)} \quad (B.4)$$

H_s^u : matriz de espalhamento up de nêutrons

$$H_s^u = \begin{bmatrix} 0 & -H_s^{2 \rightarrow 1} & \dots & -H_s^{G \rightarrow 1} \\ 0 & 0 & \dots & -H_s^{G \rightarrow 2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{(G \times G)} \quad (B.5)$$

H_f : matriz de fissão de nêutrons

$$\mathbf{H}_f = \begin{bmatrix} \chi_0^1 \mathbf{H}_f^1 & \chi_0^1 \mathbf{H}_f^2 & \cdots & \chi_0^1 \mathbf{H}_f^G \\ \chi_0^2 \mathbf{H}_f^1 & \chi_0^2 \mathbf{H}_f^2 & \cdots & \chi_0^2 \mathbf{H}_f^G \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \chi_0^G \mathbf{H}_f^1 & \chi_0^G \mathbf{H}_f^2 & \cdots & \chi_0^G \mathbf{H}_f^G \end{bmatrix}_{(G \times G)} \quad (\text{B.6})$$

Supondo para somente dois grupos de energia, as matrizes têm as seguintes forma:

H_a : matriz de absorção de nêutrons

$$\mathbf{H}_a = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_a^1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_a^2 \end{bmatrix}_{(2 \times 2)} \quad (\text{B.7})$$

H_s^d : matriz de espalhamento down de nêutrons

$$\mathbf{H}_s^d = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{H}_s^{1 \rightarrow 2} & \mathbf{0} \end{bmatrix}_{(2 \times 2)} \quad (\text{B.8})$$

H_s^u : matriz de espalhamento up de nêutrons

$$\mathbf{H}_s^u = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{H}_s^{2 \rightarrow 1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}_{(2 \times 2)} \quad (\text{B.9})$$

\mathbf{H}_f : matriz da fissão de nêutrons

$$\mathbf{H}_f = \begin{bmatrix} \chi_0^1 \mathbf{H}_f^1 & \chi_0^1 \mathbf{H}_f^2 \\ \chi_0^2 \mathbf{H}_f^1 & \chi_0^2 \mathbf{H}_f^2 \end{bmatrix}_{(2 \times 2)} \quad (\text{B.10})$$

Onde:

$$[\mathbf{H}_a]^{gg'} = -v_{g'} \Sigma_a^{g'} \delta_{gg'} \quad (\text{B.11})$$

$$[\mathbf{H}_s]^{gg'} = (1 - \delta_{gg'}) v_g \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \quad (\text{B.12})$$

$$[\mathbf{H}_f]^{gg} = (1 - \beta_{eff}) v_g \nu \Sigma_f^{gg} \quad (\text{B.13})$$

A equação (3.51) pode ser escrita na seguinte forma matricial:

$$\mathbf{C}_{t+\Delta t}^e = [\mathbf{T}_t]^e \mathbf{C}_t^e + [\mathbf{P}_t]^e \Phi_t^e + [\mathbf{P}_{t+\Delta t}]^e \Phi_{t+\Delta t}^e \quad (\text{B.14})$$

Definindo n_{nel} como o número de nós por elemento, isto é possível os graus de liberdade de cada grupo de energia:

$$\{\Phi_t\}^e = \left\{ \begin{array}{c} \phi_1^1 \\ \phi_2^1 \\ \dots \\ \phi_{n_{nel}}^1 \\ \phi_1^2 \\ \dots \\ \phi_1^G \\ \phi_2^G \\ \dots \\ \phi_{n_{nel}}^G \end{array} \right\}_{(n_{nel} \times G; 1)} \quad (\text{B.15})$$

$$\{\mathbf{C}_t\}^e = \left\{ \begin{array}{c} C_1^1 \\ C_2^1 \\ \dots \\ C_{n_{nel}}^1 \\ C_1^2 \\ \dots \\ C_{n_{nel}}^I \end{array} \right\}_{(n_{nel} \times I; 1)} \quad (\text{B.16})$$

Deste modo a matriz \mathbf{T}_t pode ser escrita por:

$$[\mathbf{T}_t]^e = \begin{bmatrix} t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_{I-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_I \end{bmatrix}_{(nnel \times I; nnel \times I)} \quad (\text{B.17})$$

$$t_i = e^{-\lambda_i \Delta t} \quad (\text{B.18})$$

Definindo as variáveis f_i e h_i como:

$$f_i = \frac{\beta_i}{\lambda_i} \left[\frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} - e^{-\lambda_i \Delta t} \right] \quad (\text{B.19})$$

$$h_i = \frac{\beta_i}{\lambda_i} \left[\frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} - 1 \right] \quad (\text{B.20})$$

As matrizes \mathbf{P}_t e $\mathbf{P}_{t+\Delta t}$ pode ser expressas nas formas:

$$[\mathbf{P}_t]^e = [\mathbf{P}_t^{g=1} \quad \mathbf{P}_t^{g=2} \quad \dots \quad \mathbf{P}_t^{g=G}]_{((nnel \times I) \times (nnel \times G))} \quad (\text{B.21})$$

$$[\mathbf{P}_{t+\Delta t}]^e = [\mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=1} \quad \mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=2} \quad \dots \quad \mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=G}]_{((nnel \times I) \times (nnel \times G))} \quad (\text{B.22})$$

Onde:

$$[\mathbf{P}_t^g]^e = \begin{bmatrix} f_1\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & f_1\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & f_1\nu\Sigma_f^g \\ f_2\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & f_2\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & f_2\nu\Sigma_f^g \\ \dots & \dots & \dots \\ f_I\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & f_I\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & f_I\nu\Sigma_f^g \end{bmatrix}_{(nnel \times I; nnel)} \quad (\text{B.23})$$

$$[\mathbf{P}_{t+\Delta t}^g]^e = \begin{bmatrix} h_1\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & h_1\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & h_1\nu\Sigma_f^g \\ h_2\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & h_2\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & h_2\nu\Sigma_f^g \\ \dots & & \\ h_I\nu\Sigma_f^g & 0 & 0 \\ 0 & h_I\nu\Sigma_f^g & 0 \\ 0 & 0 & h_I\nu\Sigma_f^g \end{bmatrix}_{(nnel \times I; nnel)} \quad (\text{B.24})$$

Usando os dois grupos de energia para nêutrons prontos ambas as matrizes têm as seguintes formas:

$$[\mathbf{P}_t]^e = [\mathbf{P}_t^{g=1} \quad \mathbf{P}_t^{g=2}]_{((nnel \times I) \times (nnel \times 2))} \quad (\text{B.25})$$

$$[\mathbf{P}_{t+\Delta t}]^e = [\mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=1} \quad \mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=2}]_{((nnel \times I) \times (nnel \times 2))} \quad (\text{B.26})$$

E o fluxo de nêutrons atrasados tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{t+\Delta t}^e &= [\mathbf{T}_t]^e \mathbf{C}_t^e + [\mathbf{P}_t^{g=1} \quad \mathbf{P}_t^{g=2}]^e \left\{ \begin{array}{c} \Phi_t^{g=1} \\ \Phi_t^{g=2} \end{array} \right\}^e + \\ &\quad [\mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=1} \quad \mathbf{P}_{t+\Delta t}^{g=2}]^e \left\{ \begin{array}{c} \Phi_{t+\Delta t}^{g=1} \\ \Phi_{t+\Delta t}^{g=2} \end{array} \right\}^e \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

APÊNDICE C. DESCRIÇÃO DO PROGRAMA MEF

Este tópico descreve o programa MEF (Método de Elementos Finitos), os seus aspectos gerais tal como as suas aplicabilidades, os métodos numéricos nele empregados e as suas sub-rotinas.

Em seguida mostra-se os fluxogramas (esquema iterativo da solução do problema dinâmico linear usando passo a passo, organização geral do programa MEF e estrutura geral do bloco CINE) e uma descrição sucinta de cada sub-rotina do programa MEF (bloco CINE), detendo-se com maiores detalhes nas sub-rotinas cuja função é o desenvolvimento dos cálculos e da execução da solução do problema.

Para finalizar são apresentados os dados de entrada (variáveis lidas) no programa MEF.

As informações apresentadas neste apêndice têm como referência básica (DHATT e TOUZOT, 1981).

C.1. ASPECTOS GERAIS DO MEF

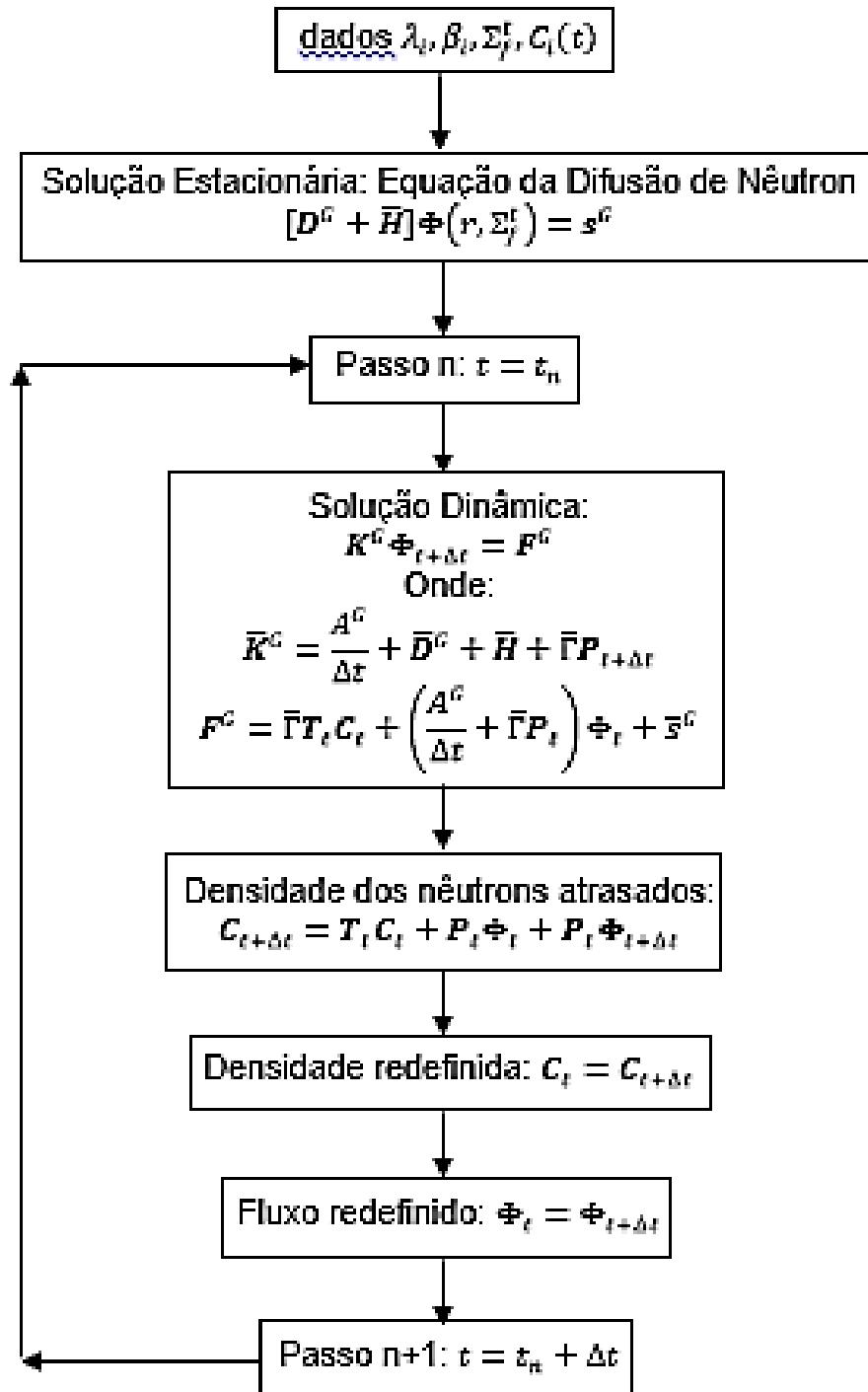
O programa MEF é um programa em linguagem FORTRAN que utiliza elementos finitos triangulares e/ ou quadráticos nas soluções de problemas com uma, duas ou em três dimensões, com sistemas lineares ou não lineares da equação de difusão de nêutrons, a dois grupos de energia em regime estacionário e não estacionário.

Para obter a solução analítica do sistema com problema não linear da equação de difusão de nêutrons do espaço- tempo, apresentada pela equação (3.51), aplica-se, resumidamente, o método dos elementos finitos quadráticos gerando elementos e definidos no subdomínio Ω^e e com coordenadas de referência das transformações jacobiana (η, ζ e ξ), discretiza o fluxo de nêutrons para dois grupos de energia, aplica-se o método de interpolação de Galerkin (aproximações na geometria $[x]_l^e$, função peso \mathbf{w}_l^e e fluxo de nêutrons \mathbf{u}_l^e e $\dot{\mathbf{u}}_l^e$), Método Direto e o Método Euler Implícito. Com a utilização das aproximações de soluções estacionária de nêutrons prontos (equação de difusão) os valores de \mathbf{C}_t e Φ_t são obtidos e substituídos na equação (3.51), isso permitirá o desenvolvimento dos cálculos das evoluções temporais das variáveis: $\Phi_{t+\Delta t}$ e $\mathbf{C}_{t+\Delta t}$.

Para desenvolver a solução da equação (3.51), que apresenta um sistema de equação não linear, são obtidas as formas matricial desta equação com a finalidade de montar blocos (matrizes) compostos pelas substituições das notações dos elementos das matrizes, equação (3.51) por algoritmos interativos apresentados pelas equações (3.67 e 3.68) para a realização

dos cálculos em função do tempo, sendo que os cálculos e a solução para o tempo inicial são definidos pela solução estacionária da equação de difusão.

Como saída de resultados do programa MEF, tem-se: resoluções das matrizes, os comportamentos dos fluxos térmico e rápido em cada nó da malha, concentração de precursores estacionário, concentrações de precursores temporal e o fator de criticalidade.



Fluxograma C.1: Esquema das soluções do problema dinâmica linear iterativo (equação de difusão de nêutrons espaço-tempo) usando a solução passo a passo.

C.1.1. Organizações do cálculo das matrizes elementares para integração numérica

Para uma maioria dos elementos, deve recorrer a uma integração numérica, para calcular as matrizes dos vetores elementares. As etapas dos cálculos correspondentes são as seguintes:

- a) Operações comuns a todos os elementos do mesmo modo tipo (tendo os mesmos elementos de referência):
 - Cálculo das coordenadas ξ e da função peso w correspondente aos pontos de integração;
 - Cálculo das funções N, \bar{N} e a sua derivada em ξ aos pontos de integração (para os elementos isoparamétricos $N \equiv \bar{N}$).
- b) Operação necessária para calcular a matriz $[\mathbf{K}^G]$ de cada elemento:
 - Inicializar $[\mathbf{K}^G]$ igual a zero;
 - Para cada ponto de integração ξ ;
 - Calcular a matriz jacobiana $[J]$ a partir das derivadas em ξ das funções \bar{N} e coordenadas dos nós do elemento e o seu inverso e determinante
 - Calcular as derivadas das funções N em x a partir das derivadas em ξ ;
 - Construção das matrizes $[\mathbf{D}]$ e $[\nabla \mathbf{N}]$;
 - Acumular em $[\mathbf{K}^G]$ o produto: $\nabla \mathbf{N}^T \cdot \mathbf{D} \nabla \mathbf{N} \det[J]_i^e w_i^e$.
- c) Operação necessárias para calcular a matriz $[\mathbf{M}^I]$:
 - Inicializar $[\mathbf{M}^I]$ igual a zero;
 - Por cada ponto de integração ξ ;
 - Calcular a matriz Jacobiana e o seu determinante;
 - Acumular em $[\mathbf{M}^I]$ o produto: $\{\mathbf{N}\} \det[J]_i^e w_i^e$.
- d) Operações necessárias para calcular os vetores solicitados $[\mathbf{F}^G]$ correspondente a f_v constante.
 - Inicializar $[\mathbf{F}^G]$ igual a zero;
 - Para cada ponto de integração ξ ;
 - Calcular a matriz Jacobiana e o seu determinante;

- Acumular em $\{f\}$ o produto: $\{N\}f_v \det[J]_i^e w_i^e$.
- e) Operações necessárias para calcular o resíduo $[R^I]$ a partir da solução $\{u_n\}$:
- Inicializar o resíduo $[R^I]$ para $[F^G]$ calcula no item (d);
 - Por cada ponto de integração ξ ;
 - Construção das matrizes $[D]$, $[\nabla N]$ e $[J]$ como na sub-seção (b) acima;
 - Acumular em $[R^I]$ o produto: $\nabla N^T \cdot D \nabla N u_n \det[J]_i^e w_i^e$.
- f) Operações necessárias para calcular os gradientes $\{\partial u\}$ com pontos de integração a partir da solução $\{u_n\}$:
- Para cada ponto de integração ξ ;
 - Construção da matriz $[\nabla N]$; comum dans la sous-sections (b) ci-dessus;
 - Calcular e imprimir o gradiente: $\{\partial u\} = [\nabla N]\{u_n\}$.

C.2. DESCRIÇÃO GERAL DO PROGRAMA MEF

Para a solução do sistema de equações (3.51), utiliza-se o programa MEF escrito em Fortran, para solucionar os problemas de equações de difusão de nêutrons utilizando o método dos elementos finitos.

C.2.1. Possibilidades geral do MEF

O programa em geral, usando MEF tem que ser cabível (DHATT e TOUZOT, 1981):

- Resolver uma variedade de problemas em diferentes domínios: linear e não linear, fluídos, problemas harmônicos, etc.;
- Lidar com grandes problemas envolvendo um número grande de nós e elementos;

C.2.2. Variedades dos problemas

1 O comportamento de um sistema continuo está descrito pelas equações com derivadas parciais: $\mathcal{L}(u) + f_v = 0$ e $\mathcal{C}(u) = f_s$

f_v e f_s são das funções conhecidas das solicitações; \mathcal{L} e \mathcal{C} : são os operadores diferenciais caracterizado do sistema.

Conforme o problema estudado, o número e a natureza das variáveis nodais variam, assim como as expressões das matrizes e os vetores elementares. Para um determinado problema, usa-se vários tipos de elementos de formas diferentes (por exemplos: triangulares e quadriláteros) e de diferentes precisões (por exemplo: triangular para 3 ou 6 nós). Enfim em um considerado domínio de aplicação é desejável tratar os problemas para uma, duas ou três dimensões, lineares ou não lineares, estacionário ou não estacionário.

Este programa apresenta soluções para os seguintes problemas (DHATT e TOUZOT, 1981):

1. Problemas: 1D, 2D e 3D;
2. Diferentes graus de liberdade em cada nó;
3. Fácil inclusão de elementos na biblioteca;
4. Matrizes simétricas ou não simétricas;
5. Problemas lineares e não lineares;
6. Problemas estacionários e não estacionário;
7. Problemas de autovalores.

C.2.3. Tamanhos dos problemas

Muitos problemas necessitam de um importante número de elementos, de nós, por consequência, de graus de liberdade. O número total desconhecido pode variar a partir de algumas centenas (problemas pequenos) e a partir de dezenas de milhares (problemas excepcionais). O tamanho do problema depende dos seguintes fatores (DHATT e TOUZOT, 1981):

- O número de dimensões;
- O número de variáveis desconhecida em cada ponto, por exemplo: componentes de velocidade u , v e w ;
- A complexidade da geometria do domínio estudado;
- O número de elementos necessários para representar a solução juntamente com uma precisão satisfatória.

a) Descrição do Problema:

A descrição do problema inclui a preparação das tabelas de coordenadas (VCORG) e do conectivo (KCONEC), a definição das propriedades físicas, das solicitações e condições dos limites e as suas descrições pode se tornar grande e errada.

Um programa geral deve ter ferramentas de apoio para a preparação e verificação de dados, em particular os sub- programas de geração automática e de plotagem de malhas. Estas ferramentas são constituídas de interfaces de pré-processamento independente do programa geral o que inclui, às vezes, a preparação dos vetores solicitados.

b) Armazenamento das Tabelas:

O tamanho do problema é importante, por isso várias tabelas de trabalho não podem ser armazenadas na memória central do computador, então o programa deve criar as tabelas em um arquivo de disco (memória secundária) e trazer na memória principal uma parte de cada tabela para um instante determinado. A organização das tabelas pode-se tornar muito complexa e envolver tecnologia computacional sofisticada.

O armazenamento das tabelas, constitui a fase da estruturação dos dados do programa dos elementos finitos. É difícil de construir um programa que seja eficaz tanto para pequenos problemas quanto para problemas maiores: a programação torna-se muito complexa.

c) Volume dos Cálculos:

Para um problema de grande tamanho, o tempo de cálculo necessário para obter a solução torna-se muito importante, em particular para os problemas não lineares e não estacionários. O preço destes cálculos constitui em uma limitação econômica da utilização dos métodos dos elementos finitos. O programa apresenta muita eficácia nos cálculos da: construção da matriz, montagem da resolução, etc. Além disso, é necessário realizar cuidadosamente todas as seleções que influencia no tempo do cálculo, que são:

- Tipo de elemento e forma da malha;
- Método de integração numérica;
- Método de resolução do sistema de equação, em particular para o sistema não lineares;
- Método de integração para problemas não estacionário;
- Método de cálculo dos autovalores.

d) Exploração dos Resultados:

Os programas fornecem os resultados sob uma forma de listas muito difíceis de explorar. Um programa geral deve ter ferramentas que possam a partir da representação selecionar os resultados.

Estas ferramentas podem construir a partir do pós- processamento independente do programa geral dos elementos finitos e deve ser adaptável as necessidades específicas de cada usuário.

C.2.4. Modularidade

Um programa geral que apresenta as características descritas no tópico C.2.3 é inevitavelmente muito complexo. No entanto, é desejável que:

- Sua lógica seja de fácil compreensão;
- Seja facilmente modificável;
- Muitas pessoas podem colaborar para o seu desenvolvimento sem ter que saber perfeitamente todo programa;
- Pode-se especializar ou otimizar o programa para um determinado tipo de aplicação de dados, simplesmente substituindo alguns sub- programas;

Para alcançar estes objetivos, é necessário estruturar o programa modularmente. Para isso, constrói-se uma biblioteca a partir de sub- programa que efetuam as operações seguintes, características dos métodos dos elementos finitos (DHATT e TOUZOT,1981):

a) Organização do Dados:

- Criação das tabelas de coordenadas e conectividades;
- Criação das tabelas contendo a partir dos parâmetros comuns ligados aos elementos ou aos nós (propriedades elementares e propriedades nodais);
- Criação das tabelas de definição das condições de contorno.

b) Operações Correspondentes a Cada Elemento:

- Determinação das coordenadas e da função peso dos pontos de integração;
- Cálculo das funções de interpolação e de suas derivadas;
- Cálculo das matrizes Jacobiana, seus inversos e seus determinantes;
- Construção de cada matrizes e vetores elementares: $[\mathbf{K}^G]$, $\{\mathbf{F}^G\}$, $[\mathbf{M}^I]$, $[\mathbf{R}^I]$, etc.

c) Operação de Montagem:

- Montagem de um vetor ou de uma matriz elementar $[k]$ e $\{f\}$ em um vetor ou em uma matriz global $[\mathbf{K}^G]$ e $\{\mathbf{F}^G\}$.

d) Resolução:

- Decomposição da resolução de um sistema de equações lineares.

e) Impressão dos Resultados:

- Impressão das variáveis nodais e dos diversos resultados adicionais: gradientes, reações, etc.

Em Estes sub- programa são utilizados em todos programa de elementos finitos. No entanto, a sequência destes sub- programas depende se o problema estudado é linear ou não, estacionário ou não. A lógica de um programa capaz de resolver todos estes problemas é muito complexa.

O programa é organizado em forma de bloco funcionais que podem ser utilizados em ordem sequencial que se deseja. Um bloco pode executar uma simples operação (criar a tabela de conectividade), ou ao contrário executar várias operações (organizar todos os dados, construir $[K^G]$, $\{F^G\}$, resolver o sistema de equações e imprimir os resultados). Quando os blocos funcionais são simples, eles podem ser sequenciados de maneira mais flexível, em contrapartida, os usuários devem dominar a lógica do seu sequenciamento.

C.2.5. Etapas características do programa MEF

Todos os programas baseados no método dos elementos finitos (MEF) são incluídos os blocos funcionais com as seguintes características (DHATT e TOUZOT,1981):

1. Leitura, Verificação, Organização dos Dados

Ler e Imprimir:

- As coordenadas dos nós;
- As conectividades dos elementos;
- Os parâmetros físicos;
- As solicitações;
- As condições de contorno.

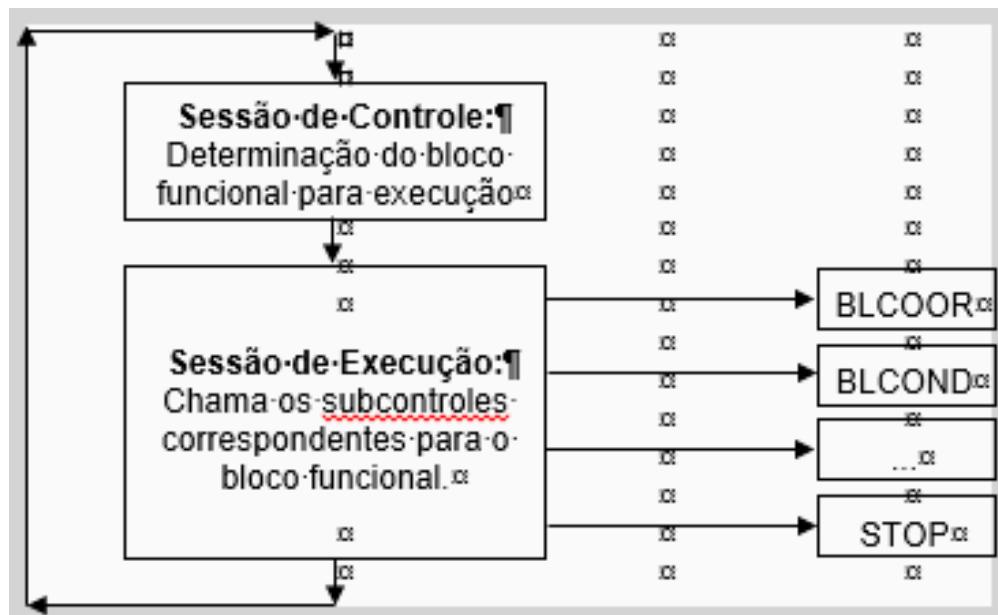
2. Construção da Matriz e do Vetor Global $[K^G]$ e $\{F^G\}$

Para cada elemento:

- Extrair as informações ligado a este elemento;
 - Construir a matriz e os vetores elementares $[k]$ e $\{f\}$;
 - Montar $[k]$ e $\{f\}$ em $[K^G]$ e $\{F^G\}$.
3. Resolução do Sistema de Equações $K^G \Phi_{t+\Delta t} = F^G$
- Modificar $[K^G]$ e $\{F^G\}$ por considerações as condições de contorno;
 - Triangularizar $[K^G]$;
 - Calcular a solução $\Phi_{t+\Delta t}$.
4. Impressão dos Resultados;
- Calcular as variáveis adicionais (gradientes, reações, restrições, etc.);
 - Imprimir os resultados.

C.2.6. Descrições dos blocos do MEF – organização geral

O programa principal sequencia as execuções dos blocos funcionais sob o controle dos usuários, chamando os sub- programas correspondentes à cada bloco:



Fluxograma C.2: Organização geral.

C.2.7. Organização dos dados

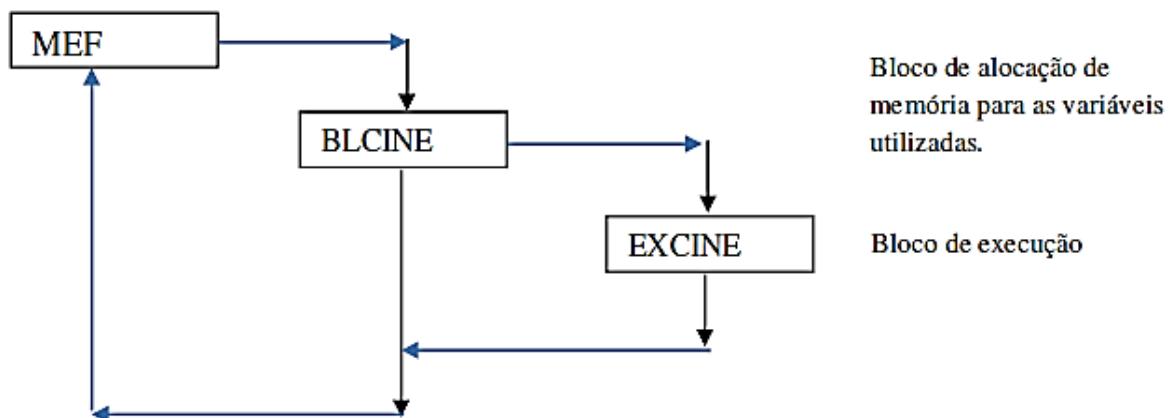
C.2.7.1. Blocos de leitura dos dados e blocos de execução:

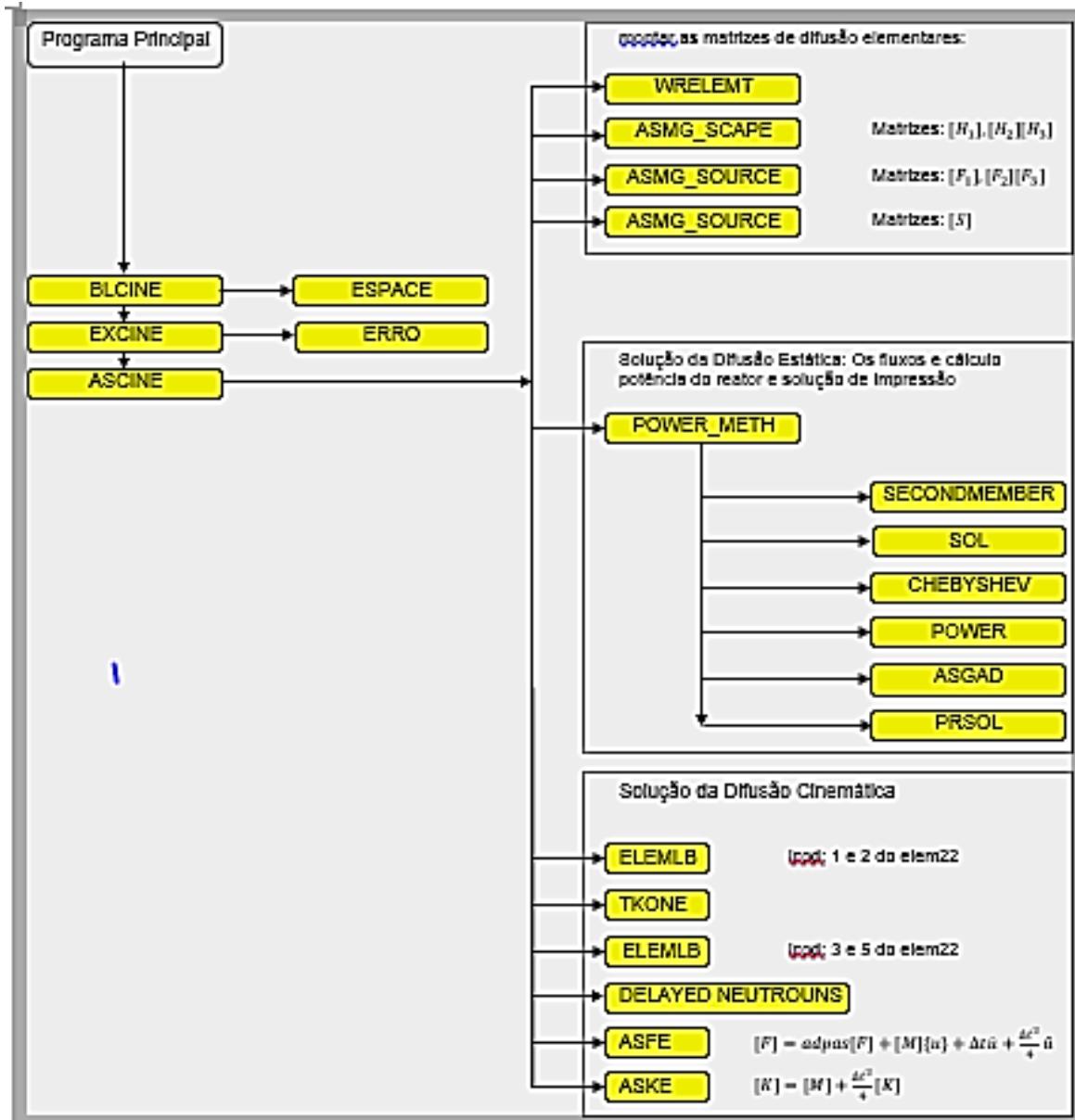
O Método dos Elementos Finitos (MEF) inclui os blocos funcionais especializados em leitura, a verificação e organização dos dados. Por exemplo (DHATT e TOUZOT, 1981):

- O bloco ‘COOR’ lê as coordenadas dos nós e os nomes dos graus de liberdade de cada nó. Depois das verificações, ele cria as tabelas VCORG (coordenadas dos nós) e KDLNC (nome de graus de liberdade de cada nó, acumulativo);
- O bloco ‘COND’ lê as condições de contorno cria as tabelas KNEQ (número de equação de cada grau de liberdade) e VDIMP (valores de cada grau de liberdade imposta);
- O bloco ‘ELEM’ lê as conectividades e outras características dos elementos, pois ele cria uma ficha contendo todas estas informações. Cada gravação desta ficha constitui a descrição completa de um elemento.

Outros blocos funcionais do MEF são blocos de execução das operações dos elementos finitos. Eles são usados pelas tabelas dos blocos de leitura dos dados. Por exemplo (DHATT e TOUZOT, 1981):

- O bloco LINM monta e resolve o sistema de equações correspondente a um problema linear, a matriz global [K] residente na memória central;
- O bloco LIND é semelhante ao bloco LINM, mas a matriz global [K] reside na memória externa;
- O bloco NLIN monta e resolve o sistema de equações correspondente a um problema não linear.





Fluxograma C.3: Estrutura geral do bloco CINE.

No fluxograma C.2 demonstra que a organização geral do programa é constituída por duas partes: seção de controle (determinação da função do bloco a ser executado) e da seção execução (chamar os subprogramas correspondentes a função dos blocos e executar cálculos).

A seção de execução do programa MEF após chamar várias sub-rotinas como: BLCINE, EXCINE, ASCINE, etc. retorna para o começo da seção de controle para obter a função do bloco que será determinado para o bloco de execução.

C.2.8. Funções e descrições dos sub-rotinas do bloco CINE

As sub-rotinas para a solução da equação de difusão, como pode ser observado no fluxograma C.3, são: BLCINE, EXCINE e ASCINE.

O sistema de coordenadas adotado para aplicação da malha de elementos finitos triangulares é o sistema de coordenadas de referência das transformações Jacobiana. Para se diminuir a dimensão da coluna da matriz solução do problema deve-se sempre que possível enumerar os nós em ordem crescente da esquerda para direita e de baixo para cima (NAKAMURA,1977).

O programa MEF solicita duas incógnitas em cada nó da malha: o fluxo de nêutrons rápidos e o fluxo de nêutrons térmicos. A condição de continuidade é imposta pelo programa e devem ser indicados os nós do contorno sob condições de Direichelet (fluxo e correntes zero) (CORREIA FILHO,1981).

C.2.8.1. Blcine

O Bloco BLCINE tem as seguintes características:

- Soluciona problema dinâmico linear (equação de difusão de nêutron) usando a solução passo a passo;
- Lê as coordenadas, nres para o cálculo de resíduos e o número de graus de liberdade dos nós;
- Gera nós por interpolação linear;
- Cria as tabelas: **VKS, VKGI, VFG, VKE, VFE, VRES e VDLE**;
- Soluciona o sistema de equação usando o gradiente conjugado;
- Utiliza o Power Method para obter a solução inicial pelo método de solução passo a passo.
- Aloca espaço para as tabelas **VKS, VKGI, VFG, VKE, VFE, VRES e VDLE**.

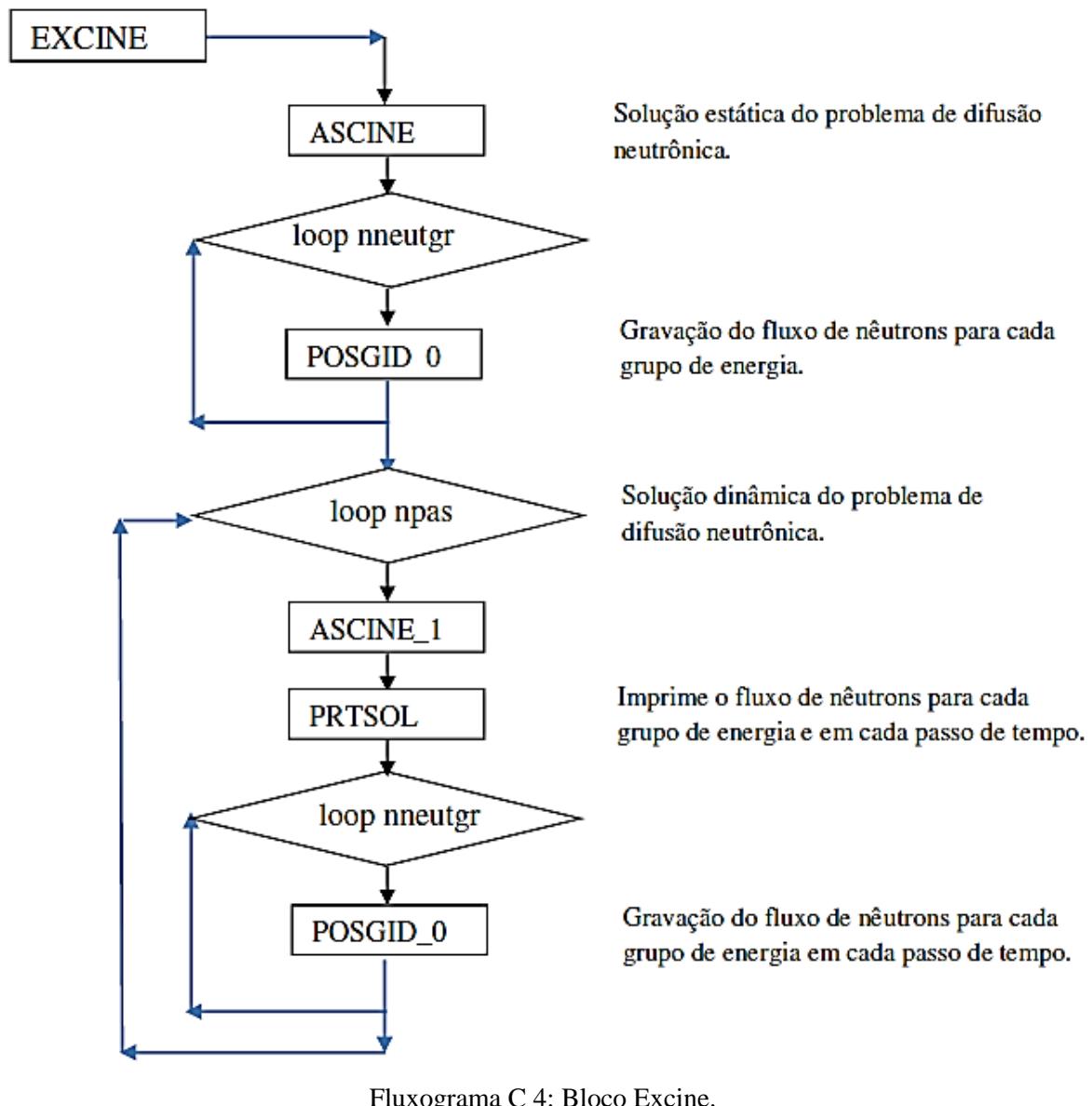
C.2.8.2. Excine

O EXCINE é utilizado para montar os elementos das matrizes da difusão de nêutron e para resolver o sistema de equação linear usando o gradiente conjugado. Portanto, ela calcula e imprime:

- A solução residual se nres=1 (PRRESD);
- A solução (PRSOL);

- Os gradientes (ASGRAD_CG).

Os ciclos do subprograma EXCINE são realizados em passos de carga ou em passo de tempo ou dentro do equilíbrio de cada passo de interação e imprime uma mensagem de erro.



C.2.8.3. Ascine

Tem a função de calcular as matrizes e os dados a serem utilizados. A convergência do processo de interação é de acordo com a escolha do método e da sub-rotina chamada. Para resolver o problema não estacionário, por exemplo, utiliza-se o METH 2, que executa exemplos com algoritmos de Euler implícito.

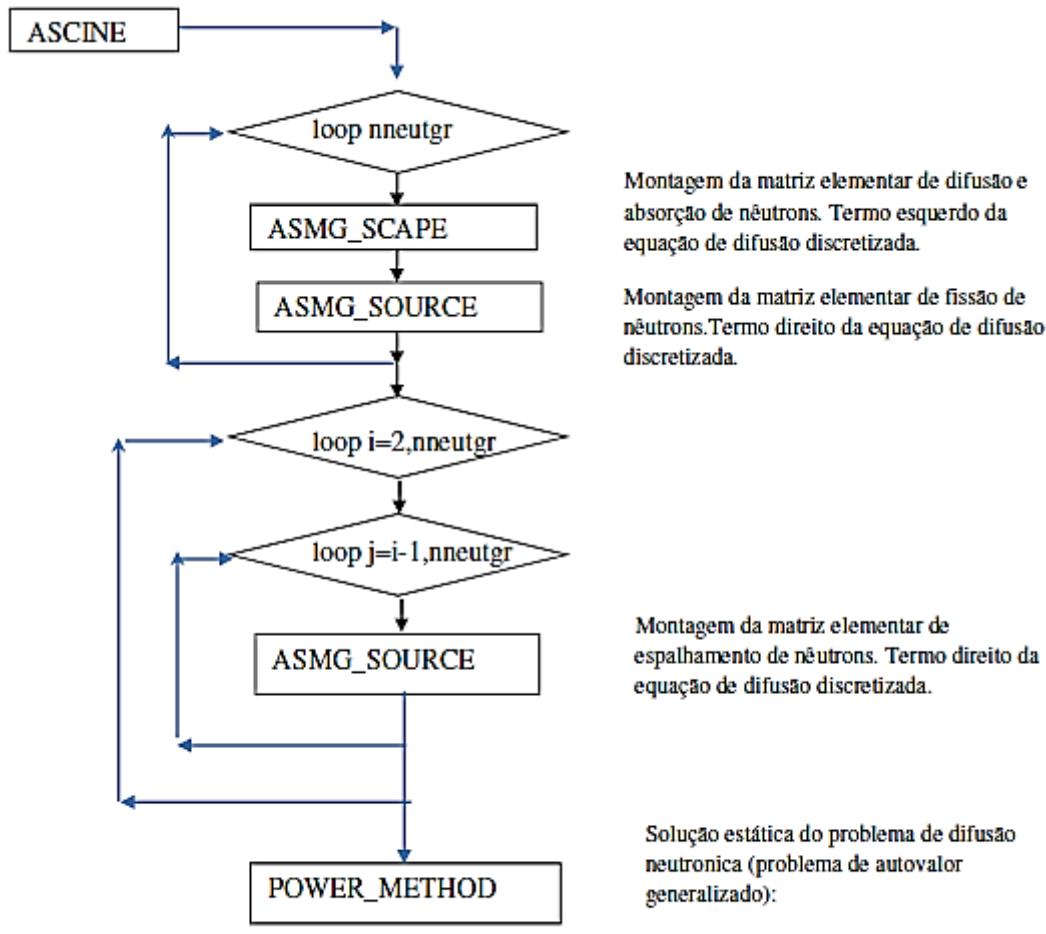
As execuções dos cálculos das matrizes são realizadas na sub-rotina elemento 22 (elem 22), do programa MEF. A sub-rotina elemento 22 foi desenvolvida para resolver o problema da difusão de nêutron com uma, duas ou três dimensões e construir uma matriz ou um vetor elementar de acordo com o valor de icod, que tem as seguintes definições:

- icod=1: Retorno dos parâmetros;
- icod=2: Cálculo das funções de interpolação e dos coeficientes de integração numérica;
- icod=3: Matrizes elementares H_1 e H_2 (vke), correspondentes ao termos de fuga, perda por absorção e remoção por espalhamento, para os grupos de nêutrons 1 e 2, respectivamente;
- icod=4: Matrizes elementares S_1 e S_2 , correspondente aos termos de produção de fissão total e fonte externa, para os grupos de nêutrons 1 e 2, respectivamente.
- icod=5: Matrizes elementares A_1 e A_2 , correspondendo aos termos do fluxo de nêutrons com variação no tempo, para os grupos de nêutrons 1 e 2, respectivamente e da matriz C membro de $C\left(\frac{DT}{dt}\right)$;
- icod=6: $Kc.T$ Contribuição do resíduo (vfe);
- icod=7: Solicitação elementar (vfe);
- icod=8: Cálculo e Impressão dos gradientes (derivada do fluxo);
- icod=10: Cálculo da carga devido ao fluxo quente aplicado no elemento no lado i-j;
- icod=11: $Kh.u$ contribuição do resíduo (vfe);
- icod=12: Cálculo da característica do comprimento do elemento;
- icod=13: Cálculo da carga devido ao fluxo quente aplicado no elemento no lado i-j;
- icod=31: Impressão dos pontos de Gauss no arquivo GIF;
- icod=33: Cálculo da coordenada elementar para coordenada global;
- icod=60: Realiza cálculo da potência no elemento em consideração.

Para determinar as quantidades de variáveis que as matrizes são compostas, deve-se considerar a seguinte expressão:

$$ipg \times nnel \times (ndim+1) \quad (5.1)$$

- Número de pontos de integração (ipg);
- Número de nós por elemento (nnel);
- Dimensão do problema (ndim)

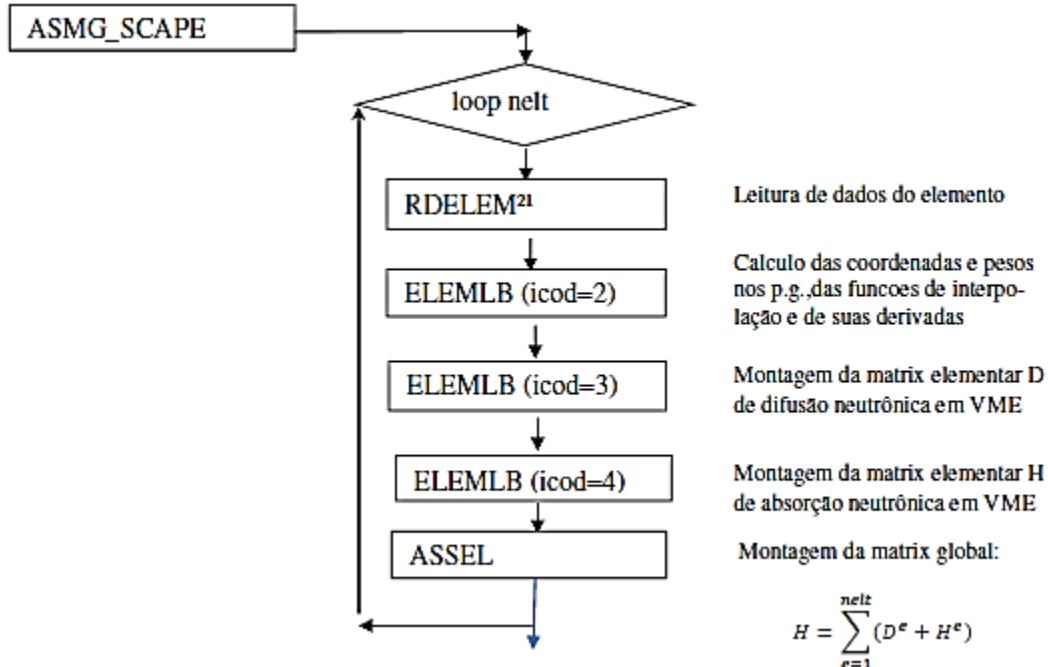


Fluxograma C 5: Bloco Ascine.

Para realizar a montagem dos elementos das matrizes de nêutron são utilizadas as seguintes sub-rotinas:

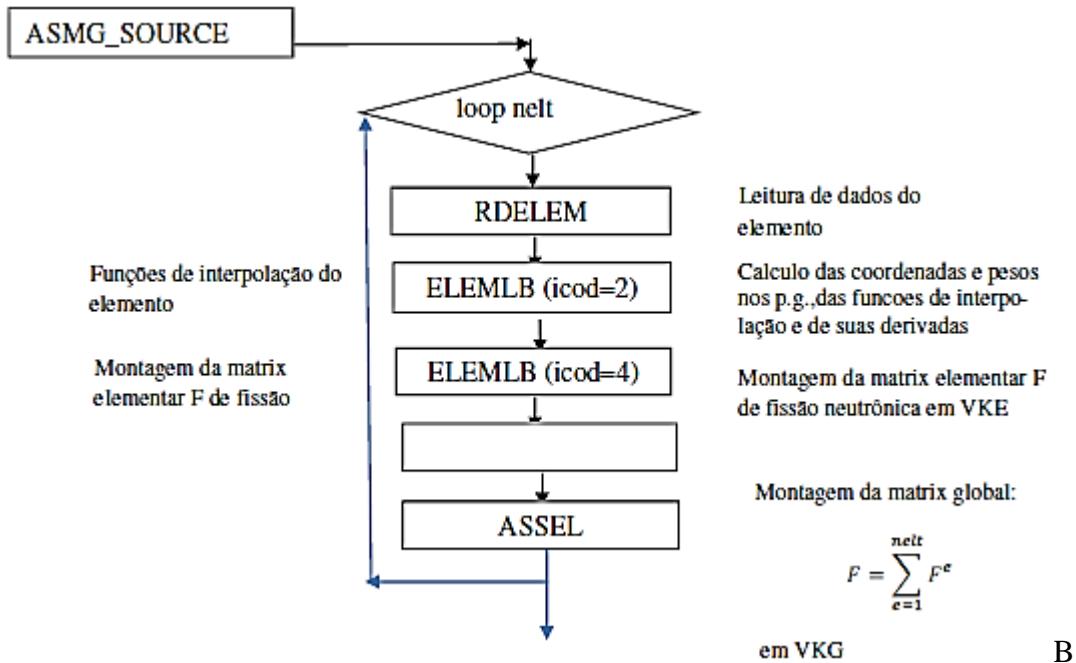
- WRELEM: Lê as propriedades do elemento nos vetores elementos.
- ASMG_SCAPE: Monta as matrizes de fuga de nêutron local (absorção, espalhamento e fissão),

Matrizes $[H_a, H_s, H_f]$.



Fluxograma C 6: Bloco ASMG_SCAPE.

- RDELEM: Propriedades de leitura de elemento correspondente a escrita da sub-rotina WRELEMENT.
- ELEMLB: Chama primeiro a sub-rotina com elemento icod=2 (funções de interpolação e pontos de Gauss) e então com icod=3 (calcula as matrizes de nêutron do elemento).
- MODFG: Modifica o segundo membro do vetor $\{f\}$ levando em conta as condições de contorno não nula.
- ASSEL: Montagem dos elementos do vetor carga $\{vfe\}$ no vetor carga global $\{vfg\}$.
- MULKU: Multiplica a matriz global por um vetor.
- ASMG_SOURCE: Monta as matrizes de fuga e absorção de nêutron local, Matrizes $[F_a, F_s, F_f]$.
- ASMG_SOURCE: Monta a matriz fonte, Matriz $[S]$.

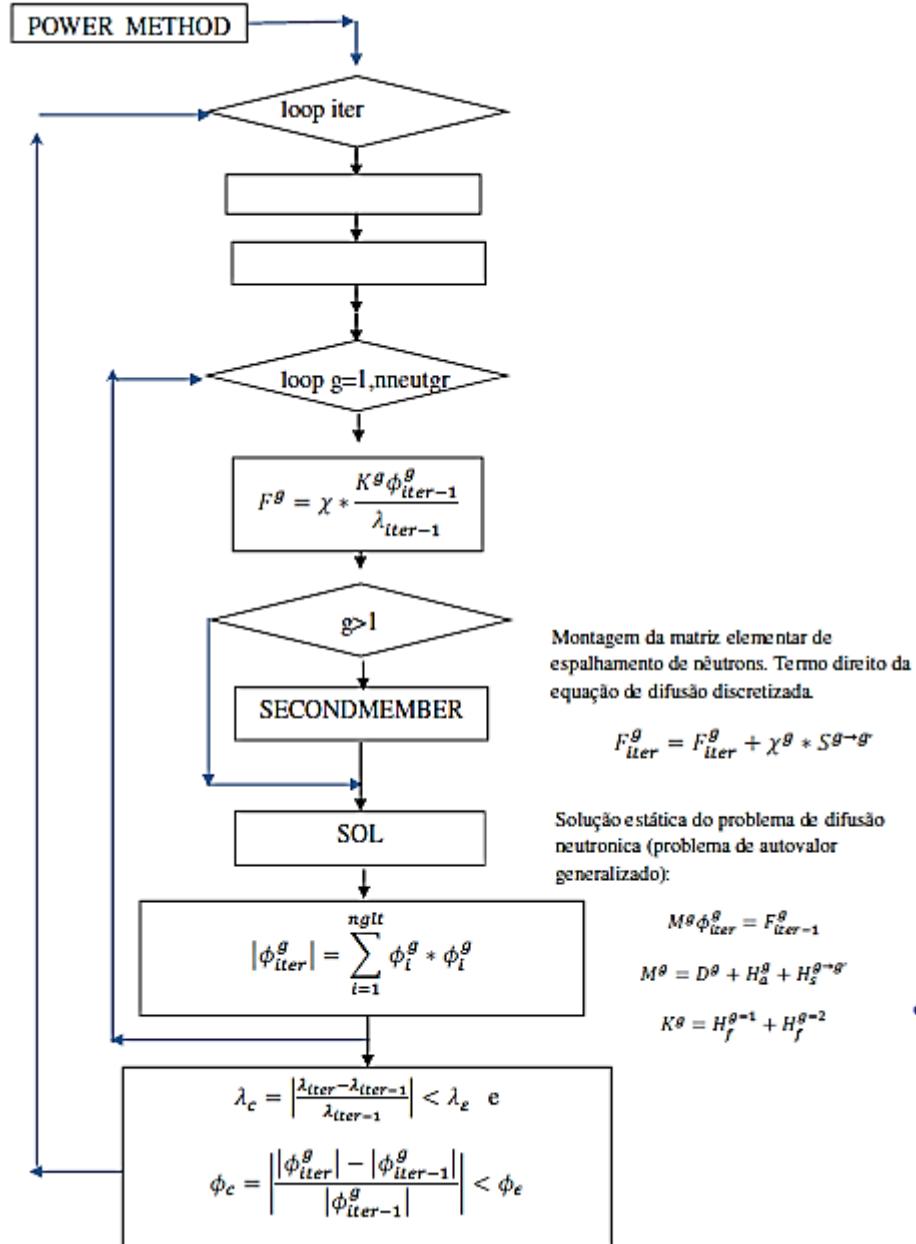


Fluxograma C 7: Bloco ASMG_SOURCE.

- DIFU_OBJ: Calcula o propósito da função.
- RIGHTMEMBER(CG: Calcula o segundo membro do vetor da equação de difusão (levando em conta o decaimento).

Para a solução da difusão estacionária do fluxo, extração da solução e do cálculo da potência do reator e impressão da solução, são utilizadas as seguintes sub-rotinas:

- POWER METH e GRADCONJ: Resolve o sistema de equação linear usando o gradiente conjugado.



Fluxograma C 8: Bloco POWER METHOD.

- SECONDMEMBER: Ler as propriedades do elemento.
- SOL: Resolve o sistema de equação linear com SCAL.
- PRPVTS: Imprime o pivots da matriz global.
- CHEBYSHEV: Calcula a extrapolação da solução baseada no polinômio de Chebyshev.
- ASGRAD: Calcula e imprime a solução dos gradientes.
- POWER: Calcula a normalização da potência do reator.

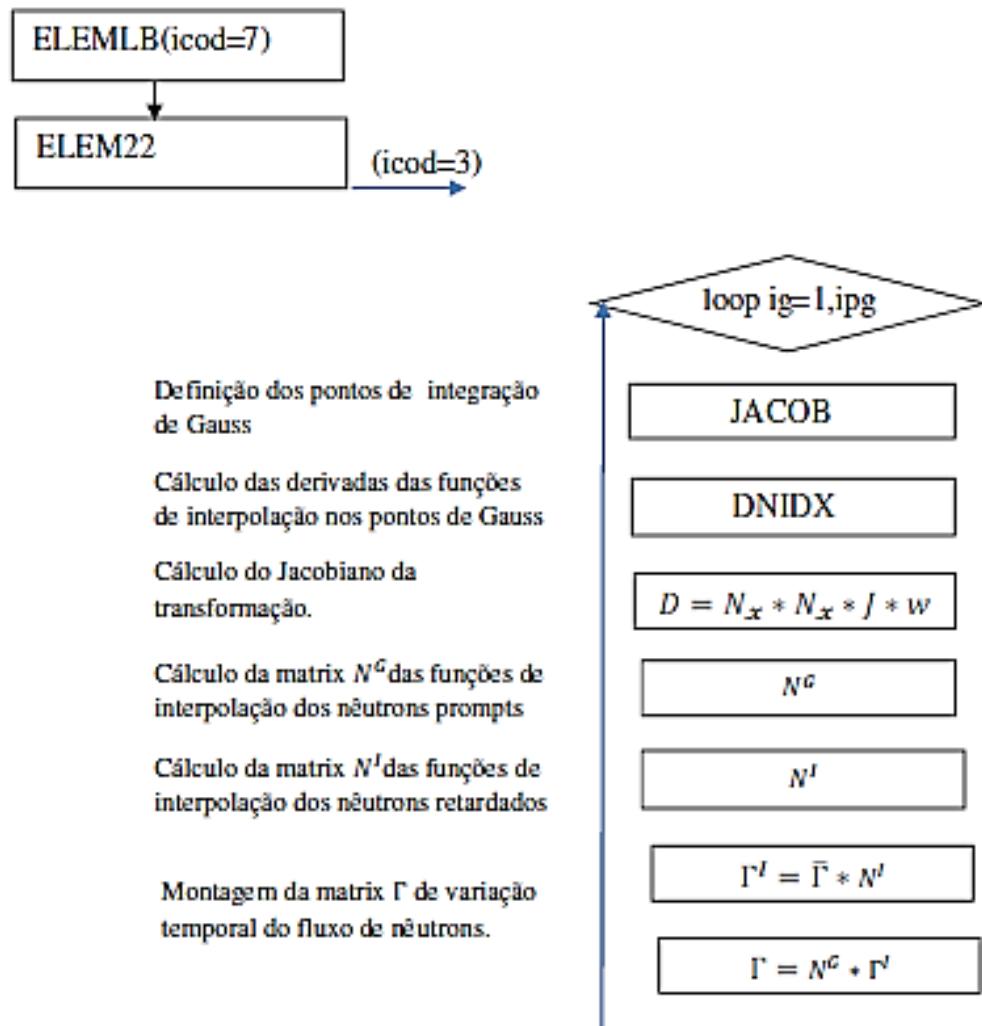
Faz a normalização, cálculo dos valores médios. Para efeito de normalização dos resultados pode ser adotado um dos critérios:

- a) Os fluxos térmico e rápido assumem valor unitário em um determinado nó da malha;
- b) Ou então para a potência do núcleo do reator igual a $1\text{n}/\text{cm}^3$.
- ASGRAD(CG): Imprime o vetor resíduo $\{r\}$ da solução problema: $[\mathbf{K}]\{u\} - \{f\} = \{r\}$, equações.
- PRSOL: Imprime a solução $\{u\}$ (fluxo ϕ).

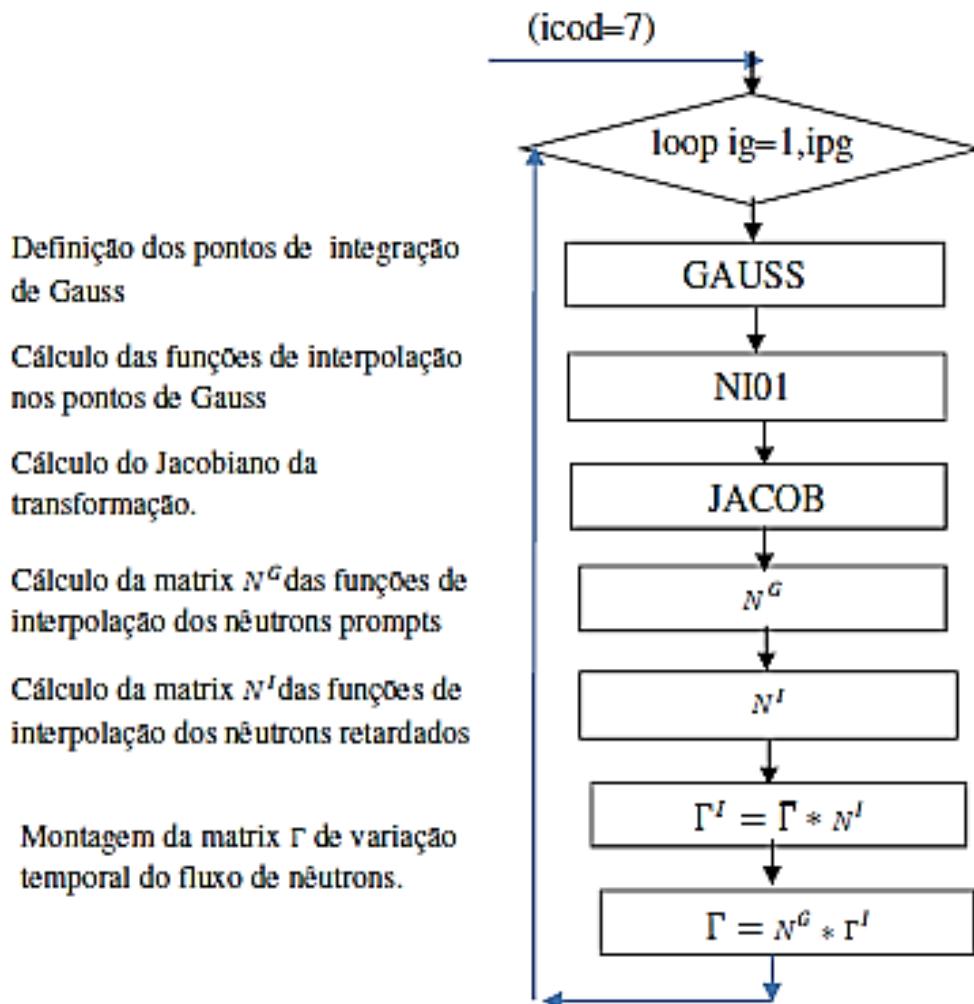
Imprime os valores dos fluxos rápido e térmico por nó da malha.

Para solução da difusão da Cinética:

- ELEMLB: icod 1 (parâmetros iniciais do elemento) e icod 2 (calcula a função de interpolação) do elemento 22.
- TKONE:
- ELEMLB: icod 3 (calcula a matriz $[\mathbf{K}]$) e icod 5 (calcula a matriz $[\mathbf{M}]$) do elemento 22.

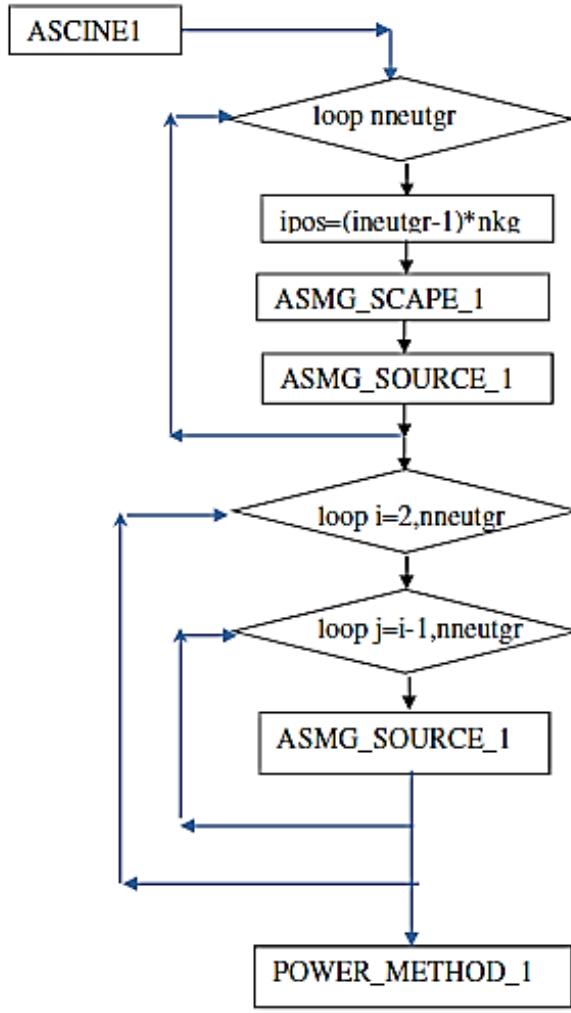


Fluxograma C 9: Bloco elem1lb (icod=7).



Fluxograma C 10: Bloco elemlb (icod=7).

- DELAYED NEUTRONS:
- ASFE: Calcula a equação $[F] = adpas[F] + [M]\{u\} + \Delta t\dot{u} + \frac{\Delta t^2}{4}\ddot{u}$
- ASKE: Calcula a equação $[K] = [M] + \frac{\Delta t^2}{4}[K]$



Cálculo das matrizes do termo esquerdo da equação:

$$T_{11} = \frac{A^{g=1}}{\Delta t} + D^{g=1} + H^{g=1} + \Gamma^{g=1} P_{t+\Delta t}^{g=1}$$

$$T_{22} = \frac{A^{g=2}}{\Delta t} + D^{g=2} + H^{g=2} + \Gamma^{g=2} P_{t+\Delta t}^{g=2}$$

Cálculo das matrizes do 2º termo direito da equação:

$$E_1 = \left(\frac{A^{g=1}}{\Delta t} + \Gamma^{g=1} P_t^{g=1} \right) \phi_t^{g=1} + \Gamma^{g=1} P_t^{g=2} \phi_t^{g=2} + \Gamma^g T_t C_t$$

$$E_2 = \left(\frac{A^{g=2}}{\Delta t} + \Gamma^{g=2} P_t^{g=2} \right) \phi_t^{g=2} + \Gamma^{g=2} P_t^{g=1} \phi_t^{g=1} + \Gamma^g T_t C_t$$

Cálculo das matrizes do 1º termo direito da equação:

$$T_{12} = \Gamma^{g=1} P_{t+\Delta t}^{g=2}$$

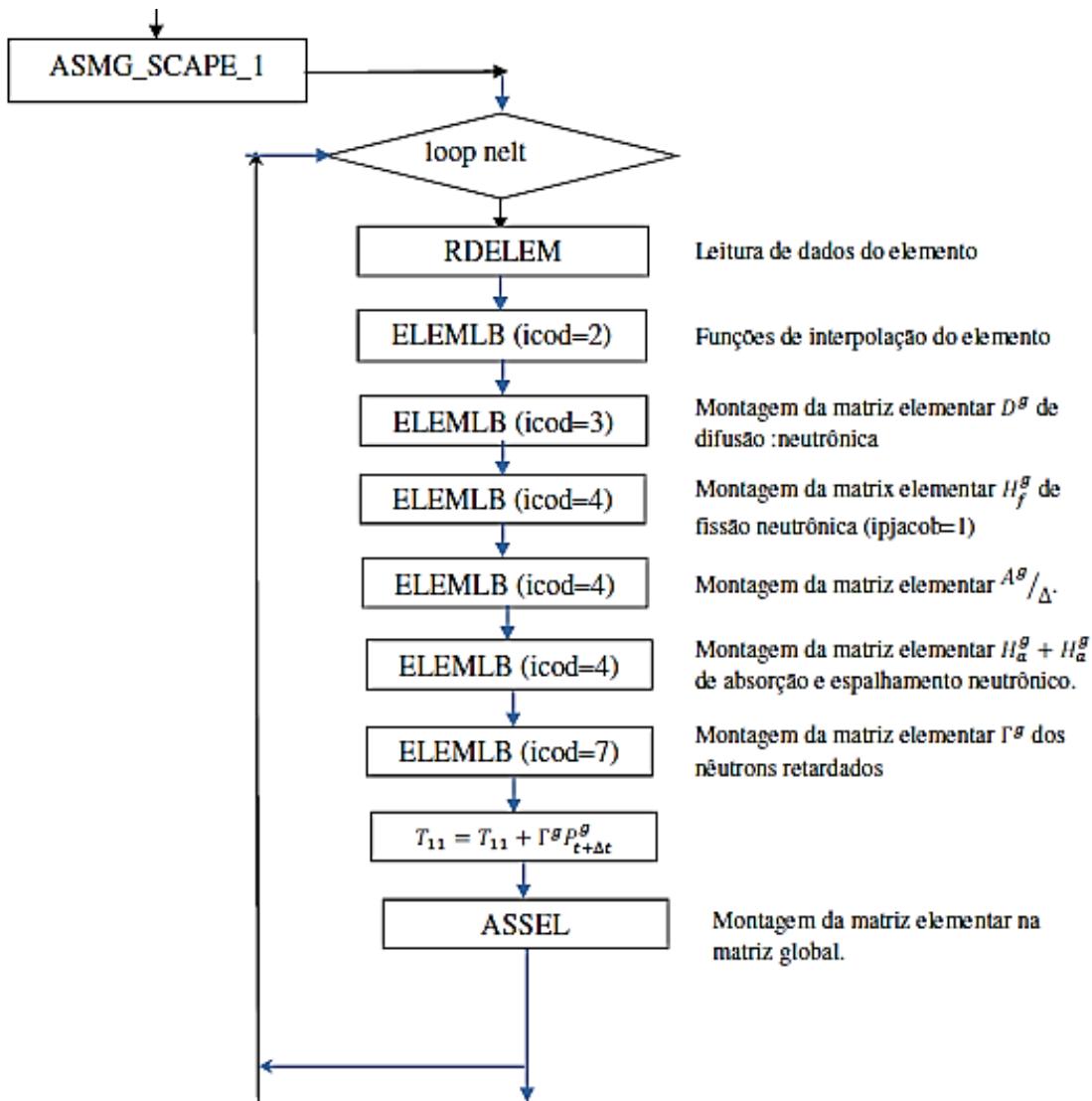
$$T_{21} = \Gamma^{g=2} P_{t+\Delta t}^{g=1}$$

Solução dinâmica do problema de difusão neutônica (solução pelo método passo-à-passos):

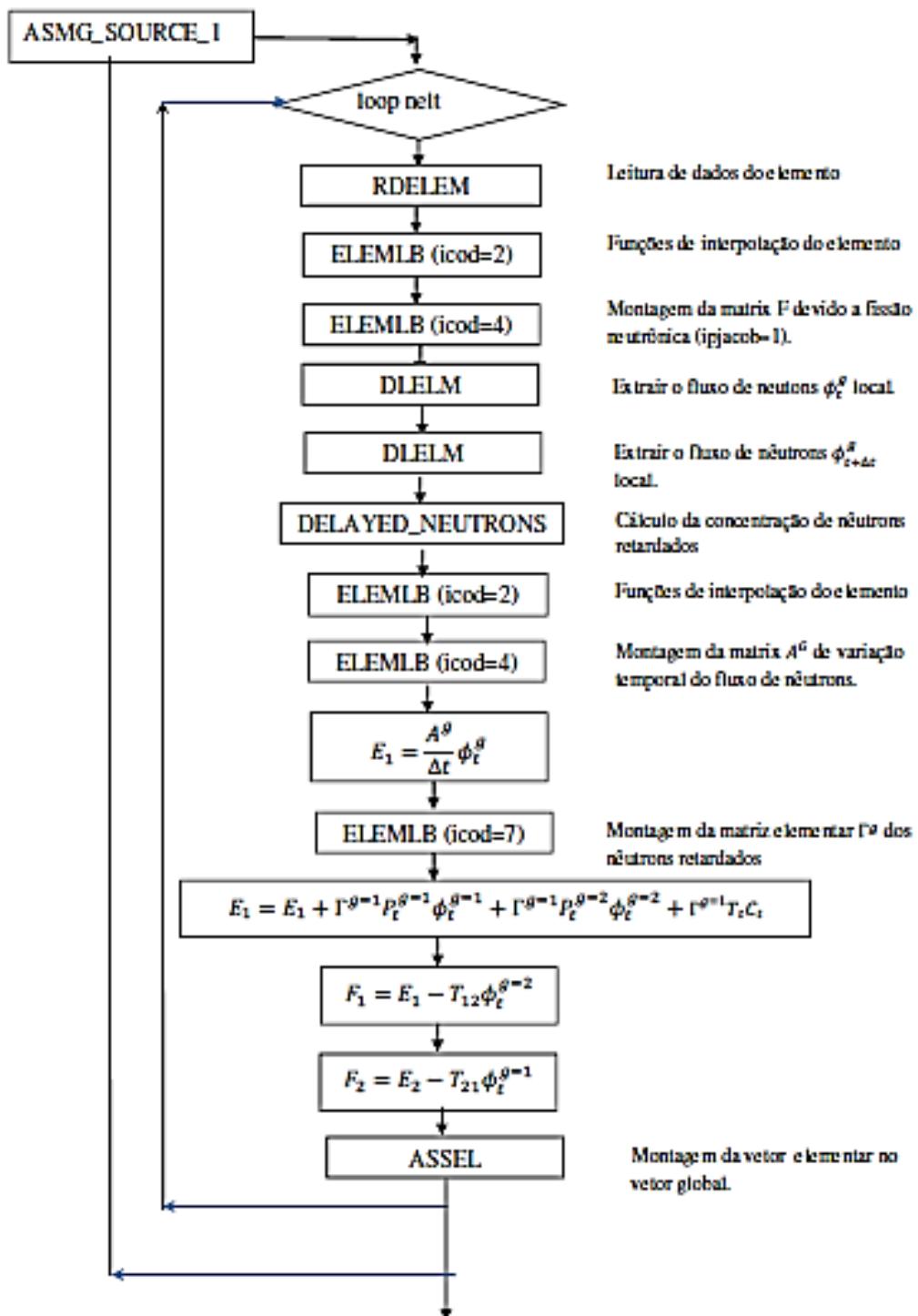
$$T_{11} \phi_{t+\Delta t}^{g=1} = E_1 - T_{12} \phi_t^{g=2}$$

$$T_{22} \phi_{t+\Delta t}^{g=2} = E_2 - T_{21} \phi_t^{g=1}$$

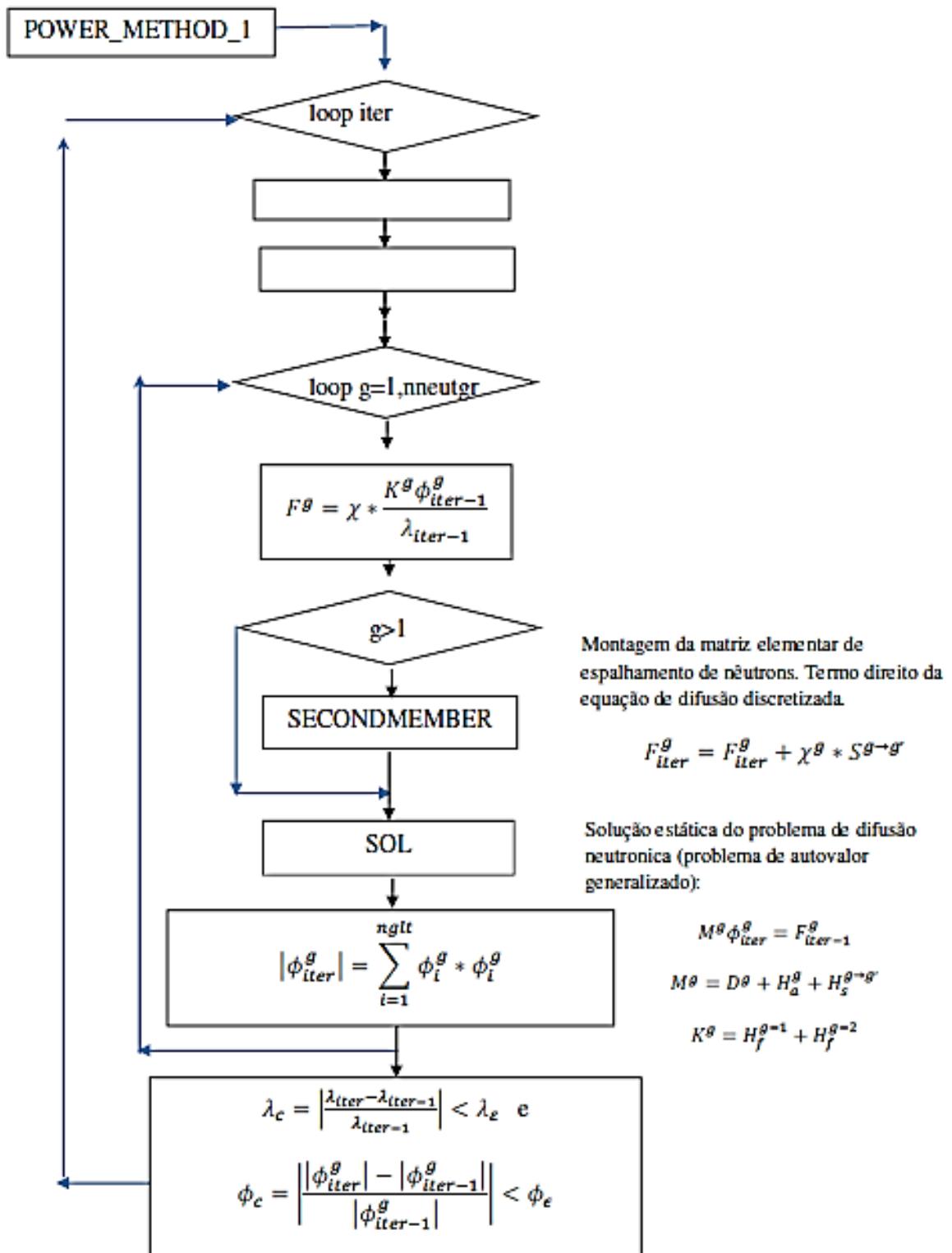
Fluxograma C 11: Bloco Ascine1.



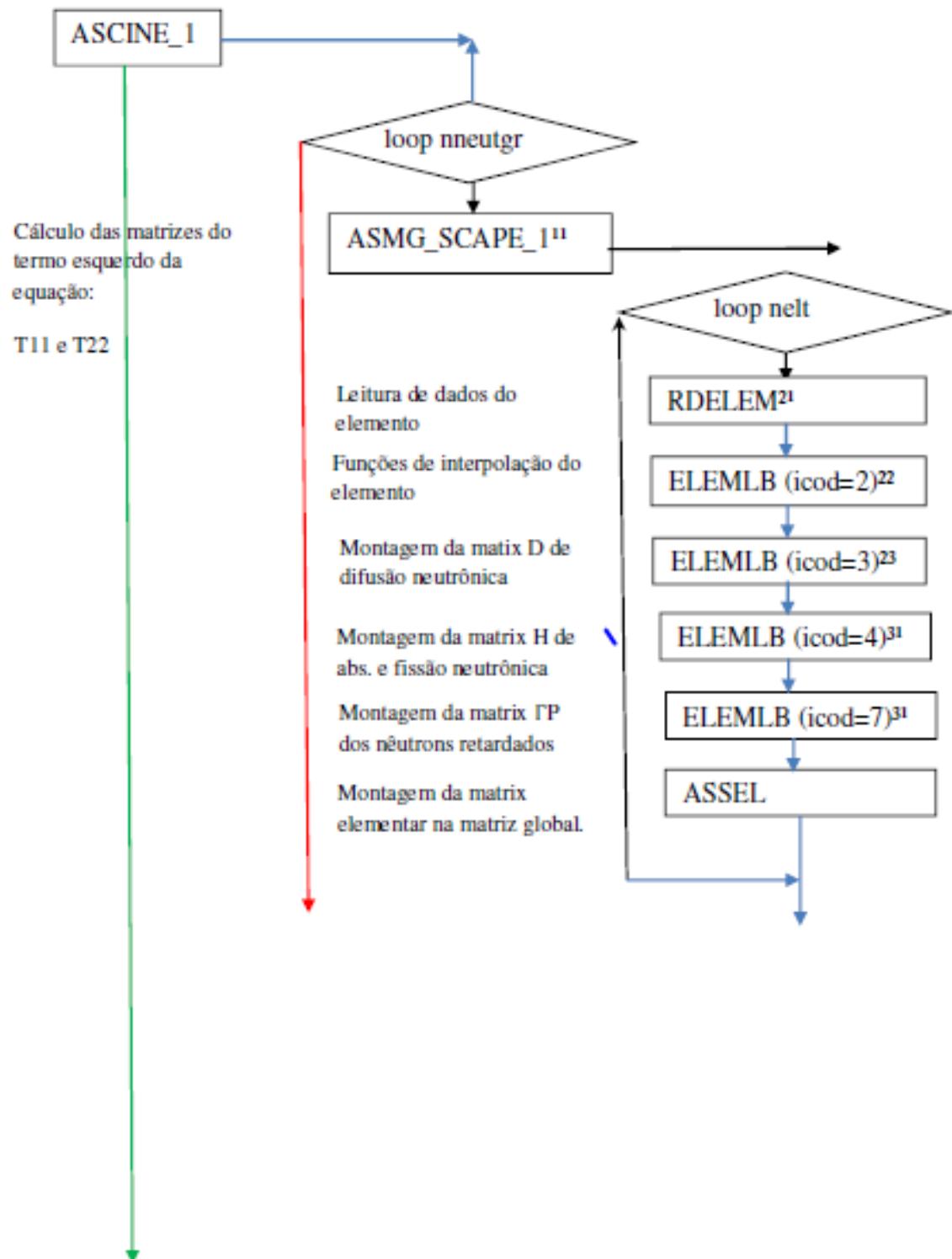
Fluxograma C 12: Bloco ASMG_SCAPE_1.



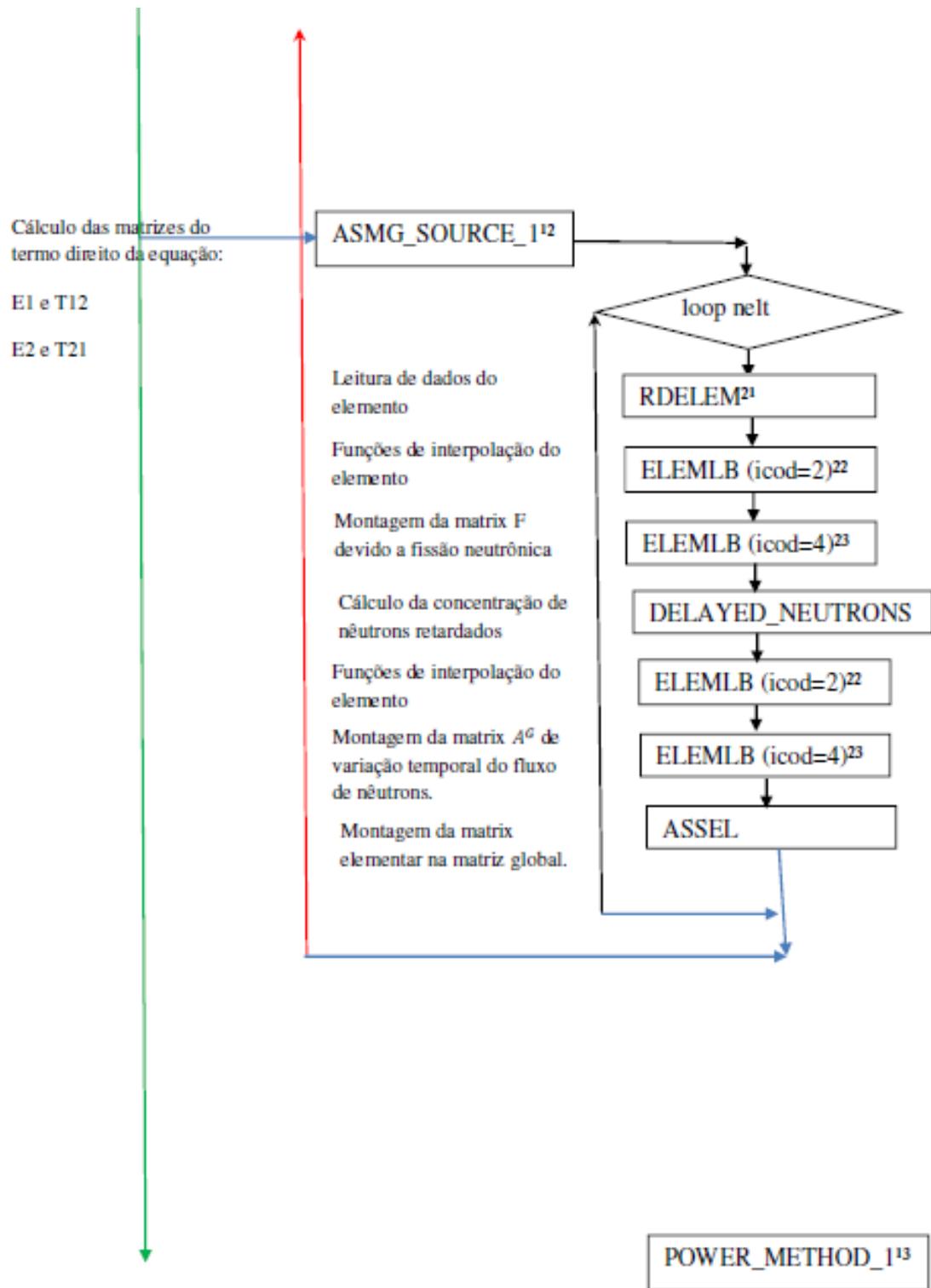
Fluxograma C 13: Bloco ASMG_SOURCE_1.



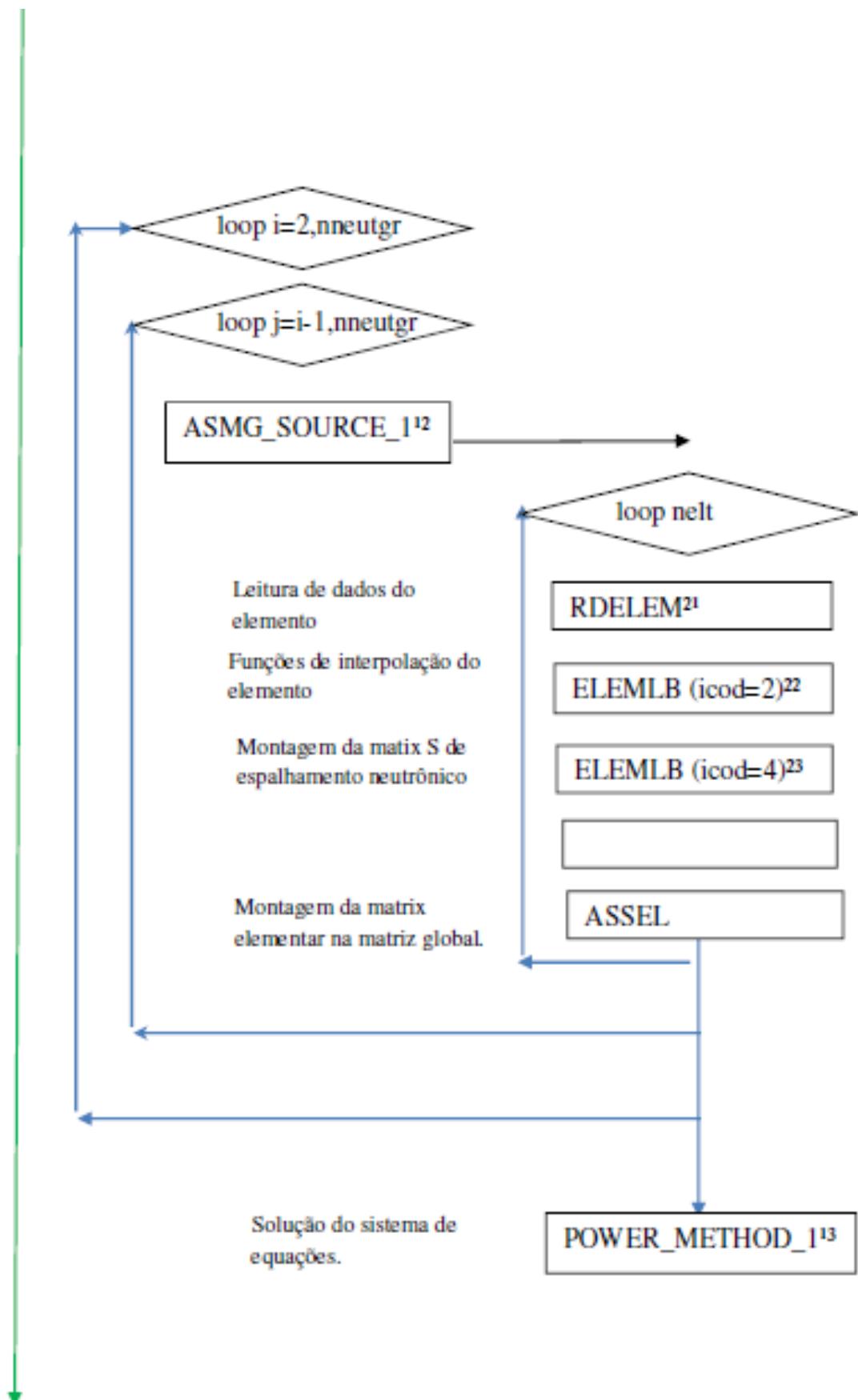
Fluxograma C 14: Bloco POWER METHOD_1.



Fluxograma C 15: Bloco Ascine_1.



Fluxograma C 16: Bloco do cálculo das matrizes do lado direito da equação.



C.2.9. Dados de entrada do bloco CINE

- m2: número lógico de arquivo de elemento (assumindo m2=1);
- m3: número lógico de arquivo onde a matriz [K] e o vetor [F] são armazenado e usado para calcular o resíduo (assumindo m3=2).

Para o cálculo do parâmetro resíduo e impressão do gradiente do fluxo, as variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
Nres	I5	Cálculo do problema residual: =1
Nprgrad	I5	Impressão do gradiente da solução.

Tabela 3: Variáveis de entrada para o cálculo do parâmetro resíduo e o gradiente do fluxo.

Para o procedimento de normalização, as variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
nneutgr	I5	Número de grupos de energia de nêutron
nlm	I5	Para os tipos de fissão: =1: fissão somente com os nêutrons rápidos. =2:fissão com os nêutrons térmicos.
inorm	I5	Para solução da normalização: = 0: em função unitária do núcleo da potência do reator. = m: em função dos fluxos rápido e térmico.
iref	I5	Região onde não tem fissão (refletor e anteparo).
cnorm	I5	Potência de normalização do núcleo do reator.

Tabela 4: Variáveis de entrada para o procedimento de normalização.

Para o cálculo do parâmetro crítico k_{eff} , as variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
niter	I5	Máximo de número de interações no power method.
eps_flux	I5	Tolerância para o fluxo de nêutron convergir.
eps_lambda	I5	Tolerância para k_{eff} convergir.
sgmb	I5	Para relação de domínio para uma rápida convergência dos polinômios de Chebyshev: =0: calcular a estimativa da relação de domínio. >1: A convergência rápida não é requerida. <1: A estimativa da relação do domínio

Tabela 5: Variáveis de entrada para o cálculo do parâmetro k_{eff} .

C.2.10. Dados de entrada do bloco COOR

A função do bloco COOR é ler as coordenadas e o número de graus de liberdade dos nós, gerar nós por interpolação e criar as tabelas VCORG e KDLNC.

As variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
nnt	I5	Número máximo de nós.
ndlnb	I5	Número máximo de graus de liberdade por nó.
ndim	I5	Dimensões do problema (um, dois ou três dimensões).
fac (1)	f10.0	Fator escalar na direção x
fac(2)	f10.0	Fator escalar na direção y
fac(3)	f10.0	Fator escalar na direção z
in2	I5	Número do último nó gerado.
X2 (1)	f15.0	Coordenada X do nó.
X2 (2)	f15.0	Coordenada Y do nó.
X2 (3)	f15.0	Coordenada Z do nó.
Incr	I5	O incremento no número de nó usado na geração.
Idln	I5	Número de graus de liberdade gerado no nó. Se eles são diferentes do número assumido (ndln).

Tabela 6: Variáveis de entrada do bloco COOR.

Observações:

1. O número dos graus de liberdade de cada nó tem que ser consistente com os elementos que são ligados neste nó;
2. Se o número de graus de liberdade é diferente de um nó para outro na mesma linha de geração, então isto é possível para o uso dos graus de liberdade assumido e para modificar eles utilizam-se a ajuda do bloco DLPN (este bloco ler os números dos graus de liberdade e modifica a tabela KDLNC. Isto é necessário somente quando o número dos graus de liberdade muda de um nó para outro).

C.2.11. Dados de entrada do bloco PRND

A função do bloco PRND é ler as propriedades nodal e criar a tabela VPRNG.

As variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
nprn	I5	Número de propriedades por nó.
vprng	8f10.0	Lista de propriedades para sucessivos nós (nó1, nó2, nó3).

Tabela 7: Variáveis de entrada do bloco PRND.

C.2.12. Dados de entrada do bloco PREL

A função do bloco PREL é ler e imprimir as propriedades do elemento e criar a tabela VPREG que contém todos os grupos das propriedades do elemento.

As variáveis lidas são, onde igpe=0:

Variáveis	Formato	Descrição
ngpe	I5	Número dos grupos das propriedades do elemento.
npree	I5	Número das propriedades para cada grupo.
Ig	I5	Número de grupo.
v1	7f10.0	Sucessivos valores de diferentes propriedades.

Tabela 8: Variáveis de entrada do bloco PREL.

C.2.13. Dados de entrada do bloco ELEM

A função do bloco ELEM é ler os elementos de conectividades e gerar o arquivo de elemento.

- m2: número lógico de arquivo de elemento (assumindo m2=1).

As variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
nelt	I5	Número máximo de elementos.
nnel	I5	Número máximo de nós por elementos.
ntpe	I5	Tipo de elemento por falta.
ngre	I5	Número do grupo de elemento por falta.
nsym	I5	=0: matriz [K] é simétrica. =1: matriz [K] não é simétrica.
nident	I5	=0: todos as matrizes [K] são diferentes. =1: se todas matriz [K] são idêntica.

Tabela 9: Variáveis de entrada do bloco ELEM.

As variáveis lidas, onde iel<0, são:

Variáveis	Formato	Descrição
iel	I5	Número do primeiro elemento.
igen	I5	Número dos elementos gerados por IEL incluindo o primeiro elemento.
incr	I5	Incremento do número de nó para geração automática.
itpe	I5	Número de tipo de elemento se for diferente de NTPE.
igpe	I5	Número do grupo de propriedade de elementos.
igre	I5	Número do grupo de elemento.
knint0	10i5	Define o tipo de integração: =0: integração normal, =1: integração reduzida.

Tabela 10: Variáveis de entrada do bloco ELEM com iel<0.

Como exemplo de tipo de elemento, tem-se um elemento triangular linear para problema de difusão de nêutron em duas dimensões.

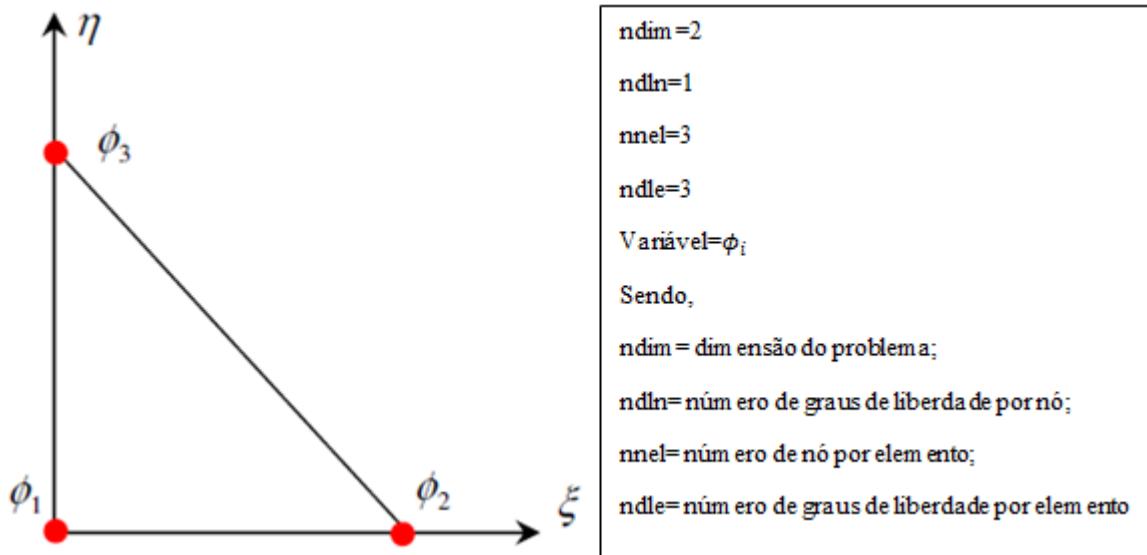


Figura 15: Elemento triangular linear com coordenadas de referências da transformação do Jacobiano.

C.2.14. Dados de entrada do bloco DYNS

A função do bloco DYNS é resolver um problema não estacionário e não linear usando o método de Euler.

As variáveis lidas são:

Variáveis	Formato	Descrição
npas	I5	Número de passos de tempo igual.
dpas	f10.0	Passo de tempo f.
Dfg	f10.0	Incremento de carga por passo.

Tabela 11: Variáveis de entrada do bloco DYNS.

C.2.15. Descrição e listagem dos blocos funcionais do programa MEF

C.2.15.1. Programa principal

Tabelas Definidas no Programa MEF			
Descrição do Problema Físico			
Tabela	Dimensão	Bloco que cria a tabela	Especificações
vcorg	nnt x ndim	COOR	<p>Coordenadas global de todos os nós:</p> <ul style="list-style-type: none"> Para 1 dimensão:$\langle\{x_1\}\{x_2\}\{x_3\} \dots \rangle$ Para 2 dimensão:$\langle\{x_1y_1\}\{x_2y_2\} \dots \rangle$ Para 3 dimensões:$\langle\{x_1y_2z_3\}\{x_1y_2z_3\} \dots \rangle$
kdlnc	nnt+1	COOR	<p>Número de graus de liberdade acumulado $kdlnc(i+1)$ tem o número de nós de graus de liberdade $1,2,3,\dots,i-1,i$ $kdlnc(nnt+1)=ndlt$; $kdlnc(1)=0$</p>
kneq	ndlt	ELEM	<p>Número de equação de cada grau de liberdade $j=kneq(i)$:</p> <ul style="list-style-type: none"> Para $j>0$: o grau de liberdade é desconhecido e corresponde a equação j na equação do sistema. Para $j<0$: o grau de liberdade é conhecido e este valor é VDIMP(-J)
vdimp	nclt	COND	Valor de todos os graus de liberdade imposto pela condição de contorno
vprng	nnt x nprn	PRND	<p>Lista dos grupos de propriedade nodal: $\langle \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{nó 1} \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{nó 2} \dots \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{nó nprn} \rangle$</p> <p>Lista dos grupos de propriedade elemento: $\langle \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo 1} \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo 2} \dots \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo nprn} \rangle$</p>
vpreg	ngpe x npre	PREL	<p>Lista dos grupos de propriedade elemento: $\langle \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo 1} \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo 2} \dots \{p_1p_2 \dots p_{nprn}\}_{grupo nprn} \rangle$</p>

kld	neq+1	ELEM	Localização do começo de cada coluna da matriz global KG . KLD(NEQ+1)-1 é o número de termos do triângulo superior de KG sem os termos da diagonal. kld(1)=kld(2)=1.
Matrizes e Vetores Global			
vkgs	nkg=kld (neq+1)-1		Termos do triângulo superior de matriz KG armazenado na linha da coluna descendente sem os termos da diagonal.
vkgd	neq		Termos da diagonal da matriz KG .
vkgi	nkg		Termos do triângulo inferior de matriz KG armazenado na linha da coluna descendente sem os termos da diagonal.
vfg	neq		Vetor de solicitação (ou força) global.
vdlg	ndlt	NLIN, TEMP	Vetor global das variáveis nodais (solução).
vres	ndlt	LINM, LIND	Vetor resíduo e reação.
vsg	nlgr x nelt x nscomp	LINM, GRAD, LIMI, SHAK	Vetor linear elástico para toda estrutura e grupos de carga: $\langle vse _{ie=1}^{ilgr=1}; vse _{ie=2}^{ilgr=1}; \dots; vse _{ie=nelt}^{ilgr=1}; \dots vse _{ie=1}^{ilgr=2}; \dots; vse _{ie=nelt}^{ilgr=nlgr} \rangle$
vdisp	(nlgr+1) x neq	LINM, GRAD, LIMI, SHAK	Vetor desacoplamento de cada grupo carga.
vfgv	2 x neq	LINM, GRAD, LIMI, SHAK	Vetor carga para cada grupo carga.
vfgs	4 x neq	LINM, LIND	

klocg	ndle x nelt		Vetor de todos elementos kloce localizado: $\langle kloce _{ie=1}; kloce _{ie=2}; \dots; kloce _{ie=nelt} \rangle$
Descrição do Elemento			
kne	nnel		Número de nó do elemento (elemento conectividade).
kloce	ndle		Localização do elemento obtido pela extração de KNEQ a informação correspondente do elemento dado.
vcore	nnel x ndim		Coordenadas do elemento extraído de VCORG .
vprne	nnel x nprn		Lista da propriedade nodal dada pelo elemento extraído de VPRNG .
vpree	npre		Lista de propriedade do elemento dado pelo elemento extraído de VPREG .
Matrizes e Vetores Elementos			
vke	Se nsym.eq.0: nke=ndle x (ndle+1)/2 Se nsym.eq.1: nke= ndle x ndle		Elemento armazenado na matriz por colunas descendentes do triângulo superior, somente para matriz simétrica.
vme	ndle x (ndle+1)/2		Elemento da matriz massa, armazenado por colunas descendentes do triângulo superior.
vfe	ndle		Vetor de solicitação (ou força) do elemento.
vdle	ndle		Valor do grau de liberdade dado ao elemento (vetor de solicitação do elemento).

vse	nscomp x ipg		<p>Vetor linear elástico para o elemento:</p> $\sigma_x \sigma_y \tau_{xy} \sigma \sigma^e 0000 \det J _{ipg=1};$ $\langle \sigma_x \sigma_y \tau_{xy} \sigma \sigma^e 0000 \det J _{ipg=2}; \dots; \rangle$ $\sigma_x \sigma_y \tau_{xy} \sigma \sigma^e 0000 \det J _{ipg=npg}$
Integração Numérica			
vkpg	ipg x ndim		<p>Coordenadas dos pontos da integração numérica no elemento referido estruturado com em VCORG (Ksi de pontos de Gauss).</p>
vcpg	ipg		<p>Pontos de integração numérica da função peso (coeficientes de pontos de Gauss).</p>
Armazenamento das funções (N)e Matriz Jacobiana			
vni	ipg x nnel x (ndim+1)		<p>Lista dos valores das funções de interpolação (N) e isto é derivado nas direções ξ, ζ e η para todos os pontos de integração:</p> <p>Para 2 dimensões:</p> $\langle N_1 N_2 \dots \frac{\partial N_1}{\partial \xi} \frac{\partial N_2}{\partial \xi} \dots \frac{\partial N_1}{\partial \eta} \frac{\partial N_2}{\partial \eta} \dots _{ponto\ 1};$ $ \dots _{ponto\ 2}; \dots$
vj,vj1	ndim x ndim		<p>Matriz Jacobiana e a inversa.</p>
vnix	nnel x ndim		<p>Lista dos valores das funções de interpolação (N) e isto é derivado nas direções x, y e z para cada ponto de integração:</p> $\langle \frac{\partial N_1}{\partial x} \frac{\partial N_2}{\partial x} \dots; \frac{\partial N_1}{\partial y} \frac{\partial N_2}{\partial y} \dots; \frac{\partial N_1}{\partial z} \frac{\partial N_2}{\partial z} \dots \rangle$
Cálculo Automático das funções de interpolação (N)			
vkxi	inel x ndim		<p>ξ_i, ζ_i e η_i São coordenadas dos nós de elemento de referência estruturado com em VCORG.</p>
kexp	inel x ndim		<p>Exponentes das bases polinomial</p> $\langle 1 \ \xi \ \eta \ \xi \eta \rangle \rightarrow KEXP = \langle 0\ 0; 1\ 0; 0\ 1; 1\ 1 \rangle.$

kder	ndim		Indica a definição da ordem da derivação da função de interpolação <ul style="list-style-type: none"> Para 2 dimensões: $\frac{\partial^2 N}{\partial \xi \partial \eta} \rightarrow KDER = \langle 1 1 \rangle$ <ul style="list-style-type: none"> Para 3 dimensões: $\frac{\partial^3 N}{\partial \xi^2 \partial \zeta} \rightarrow KDER = \langle 2 0 1 \rangle$
vpn	inel x inel		Matriz nodal PN ou inversa.
vp	inel		Valor do polinômio base no ponto dado.

Tabela 12: Tabelas globais, locais e dos elementos do programa MEF (DHATT e TOUZOT,1981).