

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO NODAL ABSORÇÃO-PRODUÇÃO NO CÁLCULO
DE DISTRIBUIÇÕES DE FLUXO DE NÊUTRONS E DE POTÊNCIA EM
UMA DIMENSÃO E UM GRUPO DE ENERGIA

CARLOS ROBERTO FERREIRA

E

FRANCISCO CORRÊA

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
CENTRO DE ENGENHARIA NUCLEAR
ÁREA DE FÍSICA DE REATORES
SÃO PAULO - SP

RESUMO

Uma equação nodal de balanço neutrônico é estabelecida para um grupo de energia, a partir de considerações sobre a produção e o transporte de nêutrons entre os nodos. A troca de nêutrons entre os nodos é representada por probabilidades. Expressões aproximadas para essas probabilidades (ou coeficientes de acoplamento nodais), para meios unidimensionais, foram obtidas pela aplicação da equação de difusão de nêutrons em um grupo de energia e em uma dimensão.

As relações obtidas foram incorporadas em dois programas de computador, designados por NOD3 e NOD5, através dos quais foram calculadas distribuições de fluxo de nêutrons e fatores efetivos e de multiplicação de nêutrons para diversos sistemas unidimensionais. Os resultados foram comparados aos de diferenças finitas, obtidos com o código CITATION^(autor), notando-se boa concordância para uma escolha conveniente dos tamanhos nodais, com nítida vantagem do modelo nodal sobre o de diferenças finitas no que diz respeito ao tempo e memória de computador. (autor).

1. OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é comparar o método nodal absorção-produção e o método de difusão representado por diferenças finitas, no cálculo de distribuições de fluxo de nêutrons e de potência, em um grupo de energia, para meios unidimensionais, em termos de : precisão, memória de computador requerida e tempo de computação. Tratamos aqui, por ora, apenas o caso estático.

2. CONSIDERAÇÕES GERAIS

Os métodos numéricos convencionais de diferenças finitas de malhas finas, usados em cálculos tridimensionais de distribuição de potência em reatores nucleares, apresentam limitações de tempo e de memória de computador. A maioria dos métodos desenvolvidos nas duas últimas décadas procurou contornar essas limitações. Alguns desses métodos são englobados numa categoria denominada de "métodos nodais", cuja idéia básica consiste em relacionar a corrente de nêutrons através da interface entre duas regiões (chamadas nodos) aos fluxos médios nessas regiões. Esses nodos (representados geometricamente por segmentos de reta, retângulos ou paralelepípedos, respectivamente, nos casos uni, bi e tridimensionais) são tomados tão grandes quanto possível, a fim de se reduzir o número de equações lineares para o fluxo e, desse modo, economizar tempo e memória de computador.

3. MÉTODO NODAL ABSORÇÃO-PRODUÇÃO EM UM GRUPO DE ENERGIA

O método nodal Absorção-Produção, objeto deste trabalho, considera a troca de nêutrons entre nodos interagentes representada por probabilidades. Essas probabilidades ou coeficientes de acoplamento nodais, são determinadas com base na equação de difusão de nêutrons. Definimos, então,

W_{ij} = probabilidade de que um nêutron de fissão nascido no nodo i seja absorvido no nodo j

Num sistema onde o nodo i é envolvido por $(m-1)$ nodos interagentes, a conservação do número de nêutrons implica em que :

$$\sum_{j=1}^m W_{ij} = 1 \tag{3.1}$$

Efetuando-se o balanço neutrônico para o i -ésimo nodo, através dos fatores W_{ij} , chegamos à seguinte equação nodal de balanço neutrônico :

$$\phi_i = \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^m C_{ji} \phi_j \tag{3.2}$$

com

$$C_{ji} = \frac{v_j \Sigma_{fj}}{\Sigma_{ai}} W_{ji} \tag{3.3}$$

onde ϕ_i = fluxo total de nêutrons no nodo i ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$);
 λ = maior auto-valor do sistema de equações (3.2) = fator efetivo de multiplicação de nêutrons do reator;
 ν_i = número médio de nêutrons emitidos por fissão no nodo i ;
 Σ_{fi} = seção de choque macroscópica média de fissão no nodo i (cm^{-1})
 Σ_{ai} = seção de choque macroscópica média de absorção no nodo i (cm^{-1}).

O auto-valor λ é reavaliado após cada iteração, na resolução do sistema de equações lineares representado pela Eq (3.2), fazendo-se o balanço neutrônico para todo o reator, como segue :

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m C_{ji} \phi_j}{\sum_{i=1}^n \phi_i} \quad (3.4)$$

n = número de nodos em que foi particionado o reator

Uma vez obtida a distribuição do fluxo de nêutrons, pela resolução do sistema de equações (3.2), obtemos, conseqüentemente, a distribuição de potência P_i do reator, pela relação,

$$P_i = \omega_{fi} \Sigma_{fi} \phi_i \quad (3.5)$$

onde ω_{fi} = energia média recuperável por fissão no nodo i .

4. DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE ACOPLAMENTO NODAL EM UMA DIMENSÃO E EM UM GRUPO DE ENERGIA

Para tornar aplicável a equação nodal de balanço neutrônico, Eq. (3.2), necessitamos, agora, determinar os fatores W_{ij} . Infelizmente, esta determinação, além de trabalhosa, é possível apenas de modo aproximado. No presente trabalho, as probabilidades W_{ij} foram determinadas em uma dimensão apenas considerando-se 3 ou 5 nodos acoplados. A aproximação feita na obtenção dos coeficientes de acoplamento, considera que os nodos apresentam distribuições planas de fontes neutrônicas. A Figura 4.1 ilustra um problema típico, onde temos uma placa, infinita nas direções y e z , dividida em N nodos homogêneos mais refletores de nêutrons à esquerda e à direita, respectivamente.

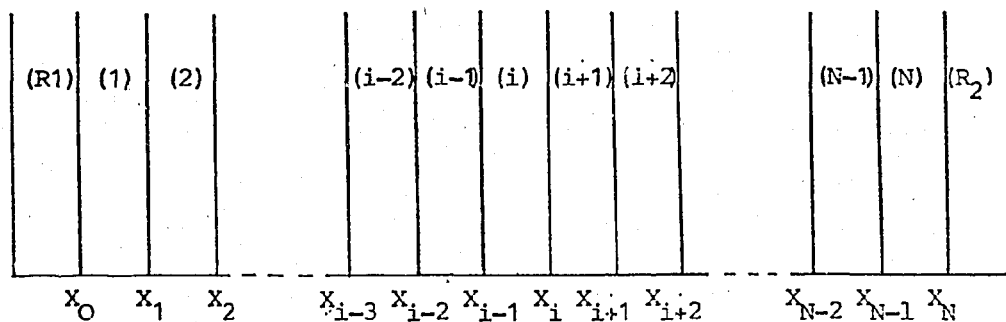


Figura 4.1 Esquema para obtenção dos Coeficientes W_{ij}

As probabilidades W_{ij} , para a i -ésima região, são definidas em função do fluxo de nêutrons $\phi(x)$ e da densidade de corrente de nêutrons $J(x)$, para 3 nodos acoplados, como segue :

$$\begin{aligned} W_{i(i-1)} &= \left| \frac{J_i(X_{i-1})}{S_i \Delta X_i} \right| \\ W_{ii} &= \frac{\int_{X_{i-1}}^{X_i} \Sigma_{ai} \phi_i(x) dx}{\int_{X_{i-1}}^{X_i} S_i dx} = \frac{\Sigma_{ai}}{S_i \Delta X_i} \int_{X_{i-1}}^{X_i} \phi_i(x) dx \quad (4.1) \\ W_{i(i+1)} &= \left| \frac{J_i(X_i)}{S_i \Delta X_i} \right| \end{aligned}$$

onde S_i = distribuição de fontes neutrônicas no nodo i ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$)
(por hipótese, plana);

$$\Delta X_i = X_i - X_{i-1} = \text{espessura do nodo } i \text{ (cm)}$$

Para 5 nodos acoplados, as definições dos fatores W_{ij} são semelhantes.

O fluxo e a densidade de corrente de nêutrons foram determinados pela aplicação, aos nodos, da equação de difusão de nêutrons em uma dimensão e em um grupo de energia, juntamente com condições convenientes de contorno e de interface. Daí, as expressões finais para os coeficientes W_{ij} , para 3 nodos acoplados, resultaram :

$$\begin{aligned} W_{i(i-1)} &= \frac{D_i |A_2|}{L_i \Delta X_i} \\ W_{ii} &= \frac{\Sigma_{ai} L_i}{\Delta X_i} \left[A_1 \sinh \frac{\Delta X_i}{L_i} + (\cosh \frac{\Delta X_i}{L_i} - 1) \right] + 1 \quad (4.2) \\ W_{i(i+1)} &= \frac{D_i}{L_i \Delta X_i} \left| A_1 \sinh \frac{\Delta X_i}{L_i} + A_2 \cosh \frac{\Delta X_i}{L_i} \right| \end{aligned}$$

onde D_i = coeficiente de difusão de nêutrons para o nodo i (cm)

L_i = comprimento de difusão de nêutrons para o nodo i (cm)

A_1 = constantes de acoplamento das equações diferenciais originadas pela aplicação da equação de difusão de nêutrons às regiões $(i-1)$, i e $(i+1)$.

Uma vez obtidas as expressões para os fatores W_{ij} ficam, conseqüentemente, determinados os coeficientes C_{ij} dados pela Eq. (3.3) e, portanto, a Eq. (3.2) de balanço neutrônico pode ser aplicada.

5. PROGRAMA NODAL

Todas as relações mencionadas anteriormente foram incorporadas em dois programas de computador, em linguagem FORTRAN-IV, designados por

NODAL (3) e NODAL (5) (ou NOD3 e NOD5), para 3 e 5 nodos acoplados, respectivamente. Estes programas calculam os coeficientes W_{ij} e C_{ij} e, a seguir, resolvem o sistema de equações nodais, Eq. (3.2), iterativamente. Alguns resultados são discutidos abaixo.

6. COMPARAÇÃO ENTRE O MÉTODO NODAL ABSORÇÃO-PRODUÇÃO E O MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS.

Primeiramente, fizemos um estudo da variação das probabilidades W_{ij} com a espessura dos nodos iteragentes. Para isso, executamos o programa NOD5 para várias espessuras dos nodos de uma placa homogênea de 200 cm de espessura (Figura 4.1). A composição da placa foi tomada como sendo igual à da célula de UO_2 , enriquecido 3.10% em U-235, do reator Angra-I, e as seções de choque foram geradas pelo programa LEOPARD. Os fatores W_{ij} são apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1. : Variação dos coeficientes W_{ij} com $\Delta X/L$

X (CM)	$\Delta X/L$	$W_{i(i-2)}$	$W_{i(i-1)}$	W_{ii}	$W_{i(i+1)}$	$W_{i(i+2)}$
5	0,640	0,2391	0,1432	0,2355	0,1432	0,2391
10	1,280	0,0843	0,1989	0,4336	0,1989	0,0843
15	1,920	0,0333	0,1890	0,5554	0,1890	0,0333
20	2,560	0,0140	0,1662	0,6396	0,1662	0,0140
25	3,201	0,0061	0,1437	0,7003	0,1437	0,0061
30	3,841	0,0027	0,1246	0,7452	0,1246	0,0027
35	4,481	0,0012	0,1091	0,7794	0,1091	0,0012
40	5.121	0,0006	0,0965	0,8059	0,0965	0,0006

Examinando esta tabela, por exemplo, para $\Delta X = 20$ cm = 2,560 L, vemos que apenas uma pequena fração (<1%) dos nêutrons produzidos no nodo i migram para regiões além dos nodos $(i-2)$ e $(i+2)$ e essa fração diminui à medida que aumentamos a espessura dos nodos iteragentes. Esse aumento na largura dos nodos deveria corresponder a um aumento na precisão dos resultados obtidos pelo modelo nodal (se as expressões para dos fatores W_{ij} fossem exatas).

A seguir, utilizando-se o programa CITATION (o qual resolve a equação de difusão de nêutrons expressa em diferenças finitas) e os programas nodais, NOD3 e NOD5, calculamos a distribuição de fluxo de nêutrons e o fator efetivo de multiplicação de nêutrons para a placa homogênea mencionada acima e, também, para uma placa, de 180cm de espessura, constituída de três composições, dispostas simetricamente, com zonas de enriquecimentos crescentes a partir do centro da placa para as bordas, a saber : UO_2 2,10%, 2,60% e 3,10% enriquecido em U-235 (composições típicas de células do reator Angra-I). Ambas

as placas apresentam refletores de 15cm de H₂O de cada lado e as seções de choque foram geradas pelo programa LEOPARD. Executamos esses programas para diversos tamanhos nodais e, para o método de diferenças finitas, tomamos malhas de 1cm. Dos problemas executados, os melhores resultados (entenda-se por melhores resultados àqueles que melhor concordam com os obtidos pelo método de diferenças finitas, que nos serve de padrão) ocorreram para nodos de 20cm (=2,560L) e nodos de 10cm (=1,280L) através dos programas NOD3 e NOD5, respectivamente; e, para a placa com três composições, o melhor resultado ocorreu para nodos de 15 cm (=1,920L) através do programa NOD5. Estes resultados estão ilustrados nas Tabelas 6.2, 6.3 e 6.4, abaixo :

Tabela 6.2 : Comparação entre as distribuições de fluxo de nêutrons calculadas pelos programas NOD5 e CITATION - $\Delta X = 10\text{cm} = 1,280L$.

I	ϕ_{CIT}	ϕ_{NOD5}	$\frac{\phi_{\text{NOD5}} - \phi_{\text{CIT}}}{\phi_{\text{CIT}}} \times 100$
1	$7,27 \times 10^{-2}$	$7,03 \times 10^{-2}$	- 3,3
2	$1,04 \times 10^{-1}$	$1,01 \times 10^{-1}$	- 2,9
3	$1,33 \times 10^{-1}$	$1,34 \times 10^{-1}$	0,8
4	$1,60 \times 10^{-1}$	$1,60 \times 10^{-1}$	0,0
5	$1,85 \times 10^{-1}$	$1,85 \times 10^{-1}$	0,0
6	$2,05 \times 10^{-1}$	$2,06 \times 10^{-1}$	0,5
7	$2,23 \times 10^{-1}$	$2,23 \times 10^{-1}$	0,0
8	$2,36 \times 10^{-1}$	$2,37 \times 10^{-1}$	0,4
9	$2,45 \times 10^{-1}$	$2,45 \times 10^{-1}$	0,4
10	$2,49 \times 10^{-1}$	$2,50 \times 10^{-1}$	0,4
11	$2,49 \times 10^{-1}$	$2,50 \times 10^{-1}$	0,4
12	$2,45 \times 10^{-1}$	$2,46 \times 10^{-1}$	0,4
13	$2,36 \times 10^{-1}$	$2,37 \times 10^{-1}$	0,4
14	$2,23 \times 10^{-1}$	$2,23 \times 10^{-1}$	0,0
15	$2,05 \times 10^{-1}$	$2,06 \times 10^{-1}$	0,5
16	$1,85 \times 10^{-1}$	$1,85 \times 10^{-1}$	0,0
17	$1,60 \times 10^{-1}$	$1,60 \times 10^{-1}$	0,0
18	$1,33 \times 10^{-1}$	$1,34 \times 10^{-1}$	0,8
19	$1,04 \times 10^{-1}$	$1,01 \times 10^{-1}$	- 2,9
20	$7,27 \times 10^{-2}$	$7,03 \times 10^{-2}$	- 3,3
K*	1,312	1,313	0,1
T**	22,1	4,1	-81,4

(*) K = fator de multiplicação efetivo

(**) T = tempo de computação (seg)

Tabela 6.3 : Comparação entre as distribuições de fluxo de nêutrons calculados pelos programas NOD3 e CITATION - $\Delta X = 20 \text{ cm} = 2,560 \text{ L}$.

I	ϕ_{CIT}	ϕ_{NOD3}	$\frac{\phi_{\text{NOD3}} - \phi_{\text{CIT}}}{\phi_{\text{CIT}}} \times 100$
1	$8,83 \times 10^{-2}$	$9,46 \times 10^{-2}$	7,1
2	$1,47 \times 10^{-1}$	$1,51 \times 10^{-1}$	2,7
3	$1,95 \times 10^{-1}$	$1,94 \times 10^{-1}$	- 0,5
4	$2,29 \times 10^{-1}$	$2,25 \times 10^{-1}$	- 1,7
5	$2,47 \times 10^{-1}$	$2,41 \times 10^{-1}$	- 2,4
6	$2,47 \times 10^{-1}$	$2,41 \times 10^{-1}$	- 2,4
7	$2,29 \times 10^{-1}$	$2,25 \times 10^{-1}$	- 1,7
8	$1,95 \times 10^{-1}$	$1,94 \times 10^{-1}$	- 0,5
9	$1,47 \times 10^{-1}$	$1,51 \times 10^{-1}$	2,7
10	$8,83 \times 10^{-2}$	$9,46 \times 10^{-2}$	7,1
K	1,312	1,310	- 0,2
T	21,2	1,6	-92,5

Tabela 6.4 : Comparação entre as distribuições de fluxo de nêutrons calculados pelos programas NOD5 e CITATION - $\Delta X = 15 \text{ cm} = 1,920 \text{ L}$.

I	ϕ_{CIT}	ϕ_{NOD5}	$\frac{\phi_{\text{NOD5}} - \phi_{\text{CIT}}}{\phi_{\text{CIT}}} \times 100$
1	$1,43 \times 10^{-1}$	$1,46 \times 10^{-1}$	2,1
2	$2,06 \times 10^{-1}$	$2,01 \times 10^{-1}$	- 2,4
3	$2,34 \times 10^{-1}$	$2,30 \times 10^{-1}$	- 1,7
4	$2,39 \times 10^{-1}$	$2,38 \times 10^{-1}$	- 0,4
5	$2,27 \times 10^{-1}$	$2,30 \times 10^{-1}$	1,3
6	$2,19 \times 10^{-1}$	$2,25 \times 10^{-1}$	2,7
7	$2,19 \times 10^{-1}$	$2,25 \times 10^{-1}$	2,7
8	$2,27 \times 10^{-1}$	$2,30 \times 10^{-1}$	1,3
9	$2,39 \times 10^{-1}$	$2,38 \times 10^{-1}$	- 0,4
10	$2,34 \times 10^{-1}$	$2,30 \times 10^{-1}$	- 1,7
11	$2,06 \times 10^{-1}$	$2,01 \times 10^{-1}$	- 2,4
12	$1,43 \times 10^{-1}$	$1,46 \times 10^{-1}$	2,1
K	1,263	1,261	- 0,2
T	17,9	2,6	-85,5

Finalmente, executamos os programas NODAL e CITATION para a placa homogênea dividida em 10 nodos de 20 cm (2,560 L) mais refletores, mudando apenas as precisões requeridas na convergência da distribuição de fluxo de nêutrons (E_1) e na constante efetiva de multiplicação do sistema (E_2). No caso do CITATION tomamos malhas de 1 cm. Os resultados, relacionados na Tabela 6.5, comparam os tempos de CPU gastos na execução dos programas.

Tabela 6.5 - Comparação entre tempos de CPU

PRECISÃO		TEMPO DE CPU (SEGUNDOS)		
E_1	E_2	CITATION	NOD ₃	NOD ₅
10^{-1}	10^{-2}	6,50	0,68	0,78
10^{-2}	10^{-3}	8,70	0,73	0,79
10^{-3}	10^{-4}	9,49	0,84	0,94
10^{-4}	10^{-5}	11,45	0,88	1,06
10^{-5}	10^{-6}	15,10	1,12	1,24
10^{-6}	10^{-7}	18,81	1,25	1,44
10^{-7}	10^{-8}	22,99	1,53	1,77
10^{-8}	10^{-9}	36,35	1,67	1,93
10^{-9}	10^{-10}	37,16	1,89	2,09

Os resultados constantes das Tabelas 6.2, 6.3 e 6.4 mostram uma concordância boa entre os resultados obtidos pelo método nodal e os resultados obtidos pelo método de diferenças finitas. Ainda, dessas tabelas, mais a Tabela 6.5, notamos que o método nodal apresenta tempos de computação e utilização de memória (esta comparação não está explícita mas sua validade pode ser inferida do seguinte fato: no método de diferenças finitas, solucionamos um sistema com 210 equações enquanto que no método nodal o número máximo de equações foi igual a 20) de computador bastante inferiores aos apresentados pelo método de diferenças finitas. Estas são as principais vantagens do primeiro sobre o segundo método.

Cabe observar aqui, que tais vantagens serão de grande importância para cálculos envolvendo queima do combustível nuclear (que estamos desenvolvendo), onde cálculos estáticos repetidos são necessários. Serão mais importantes, ainda, quando o método for estendido a duas e a três dimensões.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como conclusões finais, à base do que foi exposto, notamos que a precisão do método nodal em estudo, para uma dada espessura da placa, depende

há uma escolha conveniente dos tamanhos nodais. Se as expressões para os W_{ij} fossem exatas poderíamos assegurar determinada precisão do modelo nodal em relação ao de diferenças finitas, apenas, tomando-se nodos suficientemente largos. Porém, a suposição de distribuição plana de fontes neutrônicas, na obtenção dos coeficientes de acoplamento nodais W_{ij} , acarreta em suas expressões um erro intrínseco. Assim sendo, por uma escolha conveniente de tamanhos nodais, devemos entender uma escolha na qual os erros envolvidos se contrabalançam ao máximo possível, minimizando o desvio global dos resultados nodais em relação aos resultados correspondentes obtidos pelo método de diferenças finitas, que nos serve de padrão. Felizmente, os erros mencionados parecem atuar em sentidos opostos e aproximadamente na mesma razão.

Por outro lado, como não temos um critério exato para estabelecer a espessura nodal ótima, isto foi feito executando-se os programas nodais para várias espessuras dos nodos e observando a concordância dos resultados com os provenientes do método de diferenças finitas. Os resultados discutidos anteriormente, juntamente com outros não incluídos aqui, nos dá um intervalo, expresso em termos do comprimento de difusão de nêutrons, no qual os tamanhos nodais devem ser tomados, à saber: $\Delta X = 1,280L$ e $\Delta X = 2,560L$ (10cm e 20cm no caso). Este intervalo foi estabelecido um tanto grosseiramente. Poderemos delimitá-lo mais precisamente, executando os programas nodais para outros tamanhos de nodos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Delp, D.L., et al., FLARE, "A Three Dimensional Boiling Water Reactor Simulator". General Electric Company Report, GEAP 4598 (1964).
2. FOWLER, T.B., et al., "CITATION: Nuclear reactor core analysis Code" Oak Ridge National Lab., 1971 (ORNL-TM-2496, Rev.2).
3. FROHLICH, R., "Summary discussion and state of art review for coarse-mesh computational methods". *Atomkernenergie* (1977) V.50 (2) p. 152-158.
4. GRAVES, H.W.Jr., "Nuclear Fuel Management". John Wiley & Sons, Inc.
5. HENRY, A.F., "Nuclear Reactor Analysis". M.I.T. press, Cambridge (1975).
6. HENRY, A.F., Proc. Conf. Numerical Reactor Calculations, IAE-SM-154/21, p.447, International Atomic Energy Agency (1972).