

CÁLCULO DE REATORES EM MALHAS GROSSAS PELA TÉCNICA DE
ELEMENTOS FINITOS APLICADA AO MÉTODO DE MATRIZ RESPOSTA

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

WILLIAM R. MARTIN
UNIVERSITY OF MICHIGAN
MICHIGAN U.S.A.

RESUMO

O método de elementos finitos é aplicado na solução da formulação modificada do método de matriz resposta para efetuar cálculos de reatores em malhas grossas obtendo-se resultados satisfatórios com tempo de processamento bastante reduzido. O método é aplicável a problemas onde heterogeneidades são dominantes e também a problemas de evolução em malhas grossas, onde a taxa de queima é variável dentro de uma mesma malha grossa, fazendo com que a seção de choque varie espacialmente com a evolução. (autor).

SOLUÇÃO DO MÉTODO DE MATRIZ RESPOSTA PARA TÉCNICA DE ELEMENTOS FINITOS

INTRODUÇÃO

No presente trabalho o método de elementos finitos é aplicado na solução da formulação modificada do método de matriz resposta para efetuar um cálculo de malhas grossas com resultados satisfatórios.

A idéia básica do método é construir para cada malha grossa (da ordem do elemento de combustível), dois tipos de matrizes resposta através da utilização do método de elementos finitos resolvendo o problema de fonte fixa, com aproximação de teoria de difusão, sujeita à condição de contorno de corrente incidente arbitrária na superfície da malha grossa. A primeira matriz resposta fornece a corrente parcial emergente devida à difusão da corrente parcial incidente e a segunda a corrente parcial emergente difundindo da fonte existente dentro da malha. Essas matrizes resposta são projetadas sobre funções bases independentes e a solução global é obtida através do balanceamento das correntes parciais definidas sobre essas funções base. As transformações entre distribuições de corrente local e global (e vice-versa) são efetuadas no processo de iteração global, produzindo a distribuição de corrente global que leva em conta as heterogeneidades locais que são capazes de serem resolvidas pelas malhas finas usadas para o cálculo da matriz resposta, mas que são possíveis de serem resolvidas pela malha no cálculo global. A utilização do método de elementos finitos para implementar o método de matriz resposta permite a inclusão de seções de choque variáveis espacialmente, contribuindo para melhoria do cálculo de burn-up. Quantidades locais tais como fluxo e densidade de potência são definidas explicitamente sobre todo o núcleo mesmo em elementos heterogêneos (ex: buracos de água ou barras de veneno queimável) pelo método de elementos finitos nos cálculos locais. Ademais o uso de dois tipos de matrizes resposta, para correntes e fontes, permite o tratamento de problemas de multigrupo pelas técnicas convencionais.

MÉTODO DE MATRIZ RESPOSTA

A formulação do método de matriz resposta apropriada para ser implementada por elementos finitos é descrita abaixo seguindo a formulação convencional de Weisse Lindahl (3).

O domínio V do problema é subdividido em N subdomínios V_i , $i=1.., N$, que serão chamadas de malhas grossas. Cada malha grossa é limitada por su-

perfície S_i com vetor normal \underline{n} (\underline{r}_s), onde \underline{r}_s é a posição do vetor sobre S_i .

É assumido que é conhecida a solução da equação não homogênea de difusão

$$D_i \nabla^2 \phi_i - \Sigma a_i \phi_i + Q_i = 0, \quad i=1, \dots, N$$

dentro do módulo V_i sujeito à condição de contorno sobre S_i , correspondente à irradiação por corrente arbitrária J_i^- (\underline{r}_s). A corrente parcial emergente J_i^+ (\underline{r}_s) em S_i pode ser obtida através da solução do fluxo de neutrons.

Devida à linearidade da equação de difusão, a dependência de J_i^+ (\underline{r}_s) a J_i^- (\underline{r}_s) e Q_i (\underline{r}_s) pode ser expressada pela transformação linear

$$J_i^+(\underline{r}_s) = \oint_{S_i} R_i^s(\underline{r}'_s \rightarrow \underline{r}_s) J_i^-(\underline{r}'_s) d\underline{r}'_s + \int_{V_i} R_i^v(\underline{r} \rightarrow \underline{r}_s) Q_i(\underline{r}) d\underline{r} \quad (1)$$

onde $R_i^s(\underline{r}'_s \rightarrow \underline{r}_s)$ é a função de Green da corrente parcial devida à difusão de corrente incidente,

$R_i^v(\underline{r} \rightarrow \underline{r}_s)$ é a função de Green devida à difusão de neutrons produzidos dentro de V_i (ex: auto espalhamento, fissão ou fonte externa),

$Q_i(\underline{r})$ é a produção de neutrons dentro de V_i

Definindo-se $H_{ij}(\underline{r}'_s \rightarrow \underline{r}_s)$ como a probabilidade de que um neutron deixando a superfície S_j chegue até à superfície S_i , temos a equação de compatibilidade,

$$J_i^-(\underline{r}_s) = \sum_{j=1}^N H_{ij}(\underline{r}'_s \rightarrow \underline{r}_s) J_j^+(\underline{r}'_s), \quad i=1, \dots, N \quad (2)$$

O fluxo de neutrons dentro da malha grossa V_i é dada por

$$\Phi_i(\underline{r}) = \oint_{S_i} M_i^s(\underline{r}_s \rightarrow \underline{r}) J_i^-(\underline{r}_s) d\underline{r}_s + \int_{V_i} M_i^v(\underline{r}' \rightarrow \underline{r}) Q_i(\underline{r}') d\underline{r}', \quad i=1, \dots, N, \quad (3)$$

onde $M_i^s(\underline{r}_s \rightarrow \underline{r})$ e $M_i^v(\underline{r}' \rightarrow \underline{r})$ são funções de Green devidas à corrente incidente e fonte de neutrons, respectivamente.

Expandindo as correntes parciais, o fluxo e a fonte das Equações'

(1) - (3) em polinômios base válidos para todo o domínio do problema, obtemos' as equações matriciais

$$\underline{J}_i^+ = \underline{R}_i^s \cdot \underline{J}_i^- + \underline{R}_i^v \cdot \underline{Q}_i, \quad \underline{J}_i^- = \sum_{j=1}^N H_{ij} \cdot \underline{J}_j^+$$

e

$$\underline{\Phi}_i = \underline{M}_i^s \cdot \underline{J}_i^- + \underline{M}_i^v \cdot \underline{Q}_i, \quad i=1, \dots, N.$$

Uma representação compacta das equações matriciais pode ser obtida definindo os seguintes vetores e matrizes :

$$\underline{J}^\pm = \text{col}(\underline{J}_1^\pm, \underline{J}_2^\pm, \dots, \underline{J}_N^\pm)$$

$$\underline{\Phi} = \text{col}(\underline{\Phi}_1, \underline{\Phi}_2, \dots, \underline{\Phi}_N)$$

$$\underline{Q} = \text{col}(\underline{Q}_1, \underline{Q}_2, \dots, \underline{Q}_N)$$

e $\underline{R}^s, \underline{R}^v, \underline{M}^s, \underline{M}^v, \underline{H}$ = matriz bloco $N \times N$ com elementos $\underline{R}_i^s, \underline{R}_i^v, \underline{M}_i^s, \underline{M}_i^v, \underline{H}_{ij}$ respectivamente.

O problema global é então expresso como :

$$\underline{J}^+ = \underline{R}^s \cdot \underline{J}^- + \underline{R}^v \cdot \underline{Q} \quad (4)$$

$$\underline{J}^- = \underline{H} \cdot \underline{J}^+ \quad (5)$$

$$\underline{\Phi} = \underline{M}^s \cdot \underline{J}^- + \underline{M}^v \cdot \underline{Q} \quad (6)$$

e a solução é obtida por método iterativo, método de Gauss-Seidel para iterações internas e método de potência com aceleração para iterações externas.

As equações (4) e (5) fornecem a solução para problemas de fonte fixa

$$\underline{J}^{+(t)} = \underline{R}^s \cdot \underline{H} \cdot \underline{J}^{+(t-1)} + \underline{R}^v \cdot \underline{Q}, \quad t=1,2,\dots \quad (7)$$

Para problemas de autovalor, a fonte de neutrons é dada por

$$\underline{Q} = \frac{1}{k_{eff}} \underline{F} \cdot \underline{\Phi}, \quad \text{onde } \underline{F} \text{ tem como elementos as seções de choque de produção de neutrons, e o algoritmo para iterações externas é dado por :}$$

$$\underline{J}^{+(t)} = \underline{R}^s \cdot \underline{H} \cdot \underline{J}^{+(t-1)} + \underline{R}^v \cdot \underline{Q}^{(n-1)}, \quad t=1,2,\dots \quad (8.a)$$

$$\underline{Q}^{(r)} = \frac{1}{k_{eff}^{(r-1)}} \underline{F} \cdot (\underline{M}^s \cdot \underline{H} \cdot \underline{J}^{+(t)} + \underline{M}^v \cdot \underline{Q}^{(r-1)}), \quad r=1,2,\dots \quad (8.b)$$

onde t e r são índices para iterações internas e externas, respectivamente.

GERAÇÃO DE MATRIZES RESPOSTAS

As equações de matriz resposta (4) e (6) podem ser resolvidas somente se as matrizes resposta forem computáveis. Em particular a geração de matrizes resposta pelo Método de Elementos Finitos conforme descrito abaixo apresenta alguns aspectos atraentes, por exemplo, ampla liberdade na escolha de geometria, capacidade de tratar elementos altamente heterogêneos e facilidade de incluir seções de choque espacialmente variáveis. Além disso, a escolha de funções base é facilitada porque as definições são somente locais, i.é., em domínios discretos e as condições de contorno naturais não precisam ser satisfeitas pelas funções base na formulação fraca adotada pelo método de elementos finitos.

A equação de difusão a ser resolvida dentro da malha grossa V_n é

$$-\nabla D_m(\underline{x}) \nabla \phi_m(\underline{x}) + \Sigma_{\alpha m}(\underline{x}) \phi_m(\underline{x}) = q_m(\underline{x}), \quad \underline{x} \in V_m, \quad m=1,\dots,N \quad (9.a)$$

sujeita à irradiação por uma corrente parcial arbitrária $\vec{j}_m^-(\underline{r}_s)$ na superfície

$$S_n^m, \quad \vec{j}_m^-(\underline{r}_s) = \frac{1}{4} \phi_m(\underline{r}_s) + \frac{1}{2} D_m(\underline{r}_s) \nabla \phi_m(\underline{x}) \Big|_{\underline{x}=\underline{r}_s} \cdot \underline{n}(\underline{r}_s), \quad \underline{r}_s \in S_m, \quad m=1,\dots,N. \quad (9.b)$$

A solução é assumida no espaço H_E definida por

$$H_E = \left\{ f(\underline{x}) \in C^0 \mid \int_{V_m} [\nabla f(\underline{x}) + f(\underline{x})]^2 d\underline{x} < \infty \right\}, \quad (10)$$

e definindo $\psi_m(\Omega)$, um elemento arbitrário do espaço H_E , a formulação fraca do problema (9) corresponde a achar a solução $\phi_m(\Omega)$ no espaço H_E para

$$\int_{V_m} D_m(\Omega) \nabla \phi_m(\Omega) \nabla \psi_m(\Omega) d\Omega + \int_{V_m} \Sigma_a(\Omega) \phi_m(\Omega) \psi_m(\Omega) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_m} \phi_m(r_s) \psi_m(r_s) d r_s =$$

$$\int_{V_m} q_m(\Omega) \psi_m(\Omega) d\Omega + 2 \int_{S_m} j_m^-(r_s) \psi_m(r_s) d r_s ; \phi_m(\Omega) \in H_E, \text{ para todo } \psi_m(\Omega) \in H_E, m=1, \dots, N. \quad (11)$$

A solução das Equações (9) por elementos finitos é obtida da formulação fraca definindo as funções dentro de um particular espaço S^h contido em H_E . A equação matricial resultante é

$$\underline{A}_m \cdot \underline{\phi}_m = \underline{q}_m + \underline{j}_m^-, \quad m=1, \dots, N, \quad (12)$$

$$\text{onde } \underline{A}_m = \left[\int_{V_m} D_m(\Omega) \nabla \psi_{mi}^h(\Omega) \nabla \psi_{mj}^h(\Omega) d\Omega + \int_{V_m} \Sigma_a(\Omega) \psi_{mi}^h(\Omega) \psi_{mj}^h(\Omega) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_m} \psi_{mi}^h(r_s) \psi_{mj}^h(r_s) d r_s \right]_{ij} ; i, j=1, \dots, N_e;$$

$\underline{q}_m = \int_{V_m} q_m(\Omega) \psi_m^h(\Omega) d\Omega$ e $\underline{j}_m^- = 2 \int_{S_m} j_m^-(r_s) \psi_m^h(r_s) d r_s$
e como \underline{A}_m é simétrico e positivo definido para $D_m(\Omega) > 0, \Sigma_a(\Omega) \geq 0$, a solução pode ser determinada como

$$\underline{\phi}_m = \underline{A}_m^{-1} \cdot \underline{q}_m + \underline{A}_m^{-1} \cdot \underline{j}_m^-, \quad m=1, \dots, N. \quad (13)$$

As matrizes respostas locais, i.é., para a malha grossa V_n , podem ser obtidas pela aproximação de difusão para correntes parciais

$$j_m^+(r_s) = \frac{1}{4} \phi_m(r_s) - \frac{1}{2} D_m(r_s) \nabla \phi_m(\Omega) \Big|_{\Omega=r_s} \cdot \underline{\omega}(r_s). \quad (14)$$

Em termos dos coeficientes de expressão a equação (14), definindo-se funções base locais, torna-se:

$$\underline{j}_m^+ = \underline{R}_{q_m} \cdot \underline{q}_m + \underline{R}_{j_m} \cdot \underline{j}_m^-, \quad m=1, \dots, N \quad (15)$$

onde \underline{R}_{q_m} e \underline{R}_{j_m} são as matrizes respostas locais.

A solução do problema no domínio de interesse pode ser obtida definindo-se funções base globais $\psi_g(\Omega)$ para a expansão do fluxo de neutrons e funções base $\psi_{gk}(r_s)$ para expansão das correntes parciais globais. E desde que $\underline{q}_m(\Omega)$ e $\underline{j}_m^-(\Omega)$ são arbitrários, definem-se como $\underline{Q}_m(\Omega)$ e $\underline{J}_m^-(\Omega)$ na base global, e a equação (15) torna-se

$$\underline{j}_m^+ = \underline{R}_{q_m} \cdot \underline{Q}_m + \underline{R}_{j_m} \cdot \underline{J}_m^-, \quad m=1, \dots, N. \quad (16)$$

Geralmente a corrente parcial local $j_m^+(r_s)$ é expandida em funções base local cujo grau é maior do que as funções base global onde é definida a corrente parcial global $J_m^+(r_s)$, de tal modo que os coeficientes de expansão \underline{J}_m^+ podem ser somente aproximados, por exemplo, por resíduos ponderados, dando

$$\underline{J}_m^+ = \underline{T}_{J} \cdot \underline{j}_m^+ \quad (17)$$

e a equação final das matrizes respostas é dada por

$$\underline{J}_m^+ = \underline{R}_m^V \cdot \underline{Q}_m + \underline{R}_m^S \cdot \underline{J}_m^-, \quad m=1, \dots, N, \quad (18)$$

onde \underline{R}_m^V e \underline{R}_m^S são as matrizes respostas finais.

De modo análogo as matrizes respostas para a solução do fluxo de nêutrons são obtidas como

$$\underline{\Phi}_m = \underline{M}_m^V \cdot \underline{Q}_m + \underline{M}_m^S \cdot \underline{J}_m^-, \quad m=1, \dots, N. \quad (19)$$

RESULTADOS OBTIDOS

O presente método foi testado em problemas bi-dimensionais com malhas grossas retangulares próprias para aplicação em reatores tipo PWR.

As funções base escolhidas são as funções de Serendipity ⁽¹⁾ de 2º grau para base local e de 2º ou 3º grau para base global.

Os problemas de autovalores são resolvidos pelo método de iterações de fonte e várias técnicas de aceleração convencionais foram testadas: método de aceleração por extrapolação de fonte, rebalanceamento em malhas supergrossas e método de aceleração por polinômios de Chbyshev. Os resultados apresentados abaixo são os obtidos por método de polinômios de Chebyshev por este ter apresentado melhor eficiência no presente trabalho.

Dois reatores idealizados foram tomados para o teste do presente método: 2-D IAEA ⁽²⁾ e Biblis ⁽³⁾. Os resultados são apresentados nas tabelas 1 e 2, onde a abreviação N/M quadrático (ou cúbico) refere-se a N malhas finas por malha grossa e M malhas grossas por elemento combustível e os tempos de computação são os relativos ao computador AMDAHAL/V-8 da Universidade de Michigan.

Alguns casos são ilustrados nas Figuras 1 a 4 onde são mostrados os valores médios de potência e os fluxos neutrônicos em cada elemento de combustível em comparação com os dados publicados.

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos são em geral satisfatórios e estão dentro da margem de erro esperados por métodos de malhas grossas ao mesmo tempo econômicos comparados com programas de diferenças finitas ⁽²⁾ (duas ordens de grandeza mais rápidos).

A presente formulação alternativa do método de matriz resposta utilizando dois tipos de matrizes resposta, é apropriada para cálculo de autovalores e é necessário somente calculá-las no início do problema não necessitando reavaliação temporária como nos métodos convencionais de matriz resposta.

A definição de funções base local e global conforme o método de elementos finitos propiciou o tratamento de quantidades locais, tal como fluxo em elementos heterogêneos, implicitamente pelas iterações no nível global, e permite o mapeamento de fluxo em elementos contendo buracos de água ou barras de veneno queimável.

No presente estágio do desenvolvimento do trabalho, o método está sendo estendido para efetuar o cálculo de queima de combustível com seções de choque macroscópicas espacialmente dependentes. A queima é considerada pontualmente variável e o valor da seção de choque é obtida pela interpolação polinomial cujos coeficientes são previamente calculados e fornecidos ao programa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

- 1 . O.C. Zienkiewicz, The Finite Element Method in Engineering Science, McGraw-Hill, London (1971).
- 2 . "Argonne Code Center : Benchmark Problem Book", ANL 7416 - Sup.2, Argonne National Laboratory (1977).
- 3 . M.R.Wagner, Kraftwerk Union AG, Erlangen, Rep.Fed.Alemanha, comunicação pessoal, Junho (1981).
- 4 . Z. Weiss, S.O. Lindahal, "High-Order Response Matrix Equation in Two-Dimensional Geometry", N.S.E., 58, 166 (1975).

TABELA 1 - Resumo dos cálculos em 2D-IAEA (referência (Venture): $k_{ef}=1.02969$)

Aproximação	No. de iterações externas	$\epsilon\phi$	CPU (sec)	k_{eff}	$ \Delta P /P(\%)$ máximo
4/1 quadratic	64	$1.x10^{-5}$	7.1	1.0293	4.25
	51	$1.x10^{-4}$	5.9	1.0293	4.04
9/1 quadratic	66	$1.x10^{-5}$	8.2	1.0296	1.76
	50	$1.x10^{-4}$	6.6	1.0296	1.52
16/1 quadratic	66	$1.x10^{-5}$	10.2	1.0296	.83
	42	$1.x10^{-4}$	7.9	1.0296	.54
9/4 quadratic	150	$3.x10^{-5}$	47.4	1.0295	1.41
	106	$1.x10^{-4}$	34.8	1.0294	1.18
16/4 quadratic	150	$2.x10^{-5}$	49.8	1.0294	.77
	90	$1.x10^{-4}$	32.4	1.0293	.26
4/1 cubic	91	$1.x10^{-5}$	16.3	1.0298	2.04
	72	$1.x10^{-4}$	13.1	1.0298	1.83
9/1 cubic	99	$1.x10^{-5}$	18.3	1.0299	1.35
	64	$1.x10^{-4}$	12.8	1.0299	1.47
16/1 cubic	83	$1.x10^{-5}$	18.0	1.0298	1.16
	59	$1.x10^{-4}$	14.3	1.0298	1.39
9/4 cubic	149	$1.x10^{-5}$	82.9	1.0295	.64
	93	$1.x10^{-4}$	54.3	1.0295	.65
16/4 cubic	150	$1.3x10^{-5}$	86.4	1.0294	.26
	85	$1.x10^{-4}$	53.9	1.0294	.63

TABELA 2 - Resumo dos cálculos em BIBLIS (referência (NEM) : $k_{ef}=1.02511$)

Aproximação	No. de iterações externas	ϵ_ϕ	CPU (sec)	k_{eff}	$\Delta P/P(\%)$ máximo
9/1 quadratic	73	1×10^{-4}	9.9	1.0255	2.79
	99	1×10^{-5}	12.5	1.0255	2.51
16/1 quadratic	66	1×10^{-4}	13.6	1.0253	1.72
	99	3×10^{-5}	16.7	1.0253	1.17
16/4 quadratic	101	1×10^{-4}	41.5	1.0250	.90
	150	3×10^{-5}	55.6	1.0250	.20
9/1 cubic	52	1×10^{-4}	13.9	1.0255	3.67
	99	1×10^{-5}	21.8	1.0255	2.96
16/1 cubic	54	1×10^{-4}	19.9	1.0254	2.11
	99	2×10^{-5}	26.9	1.0254	1.55
16/4 cubic	102	1×10^{-4}	70.5	1.0250	.87
	150	2×10^{-5}	96.8	1.0250	.23

2D IAEA

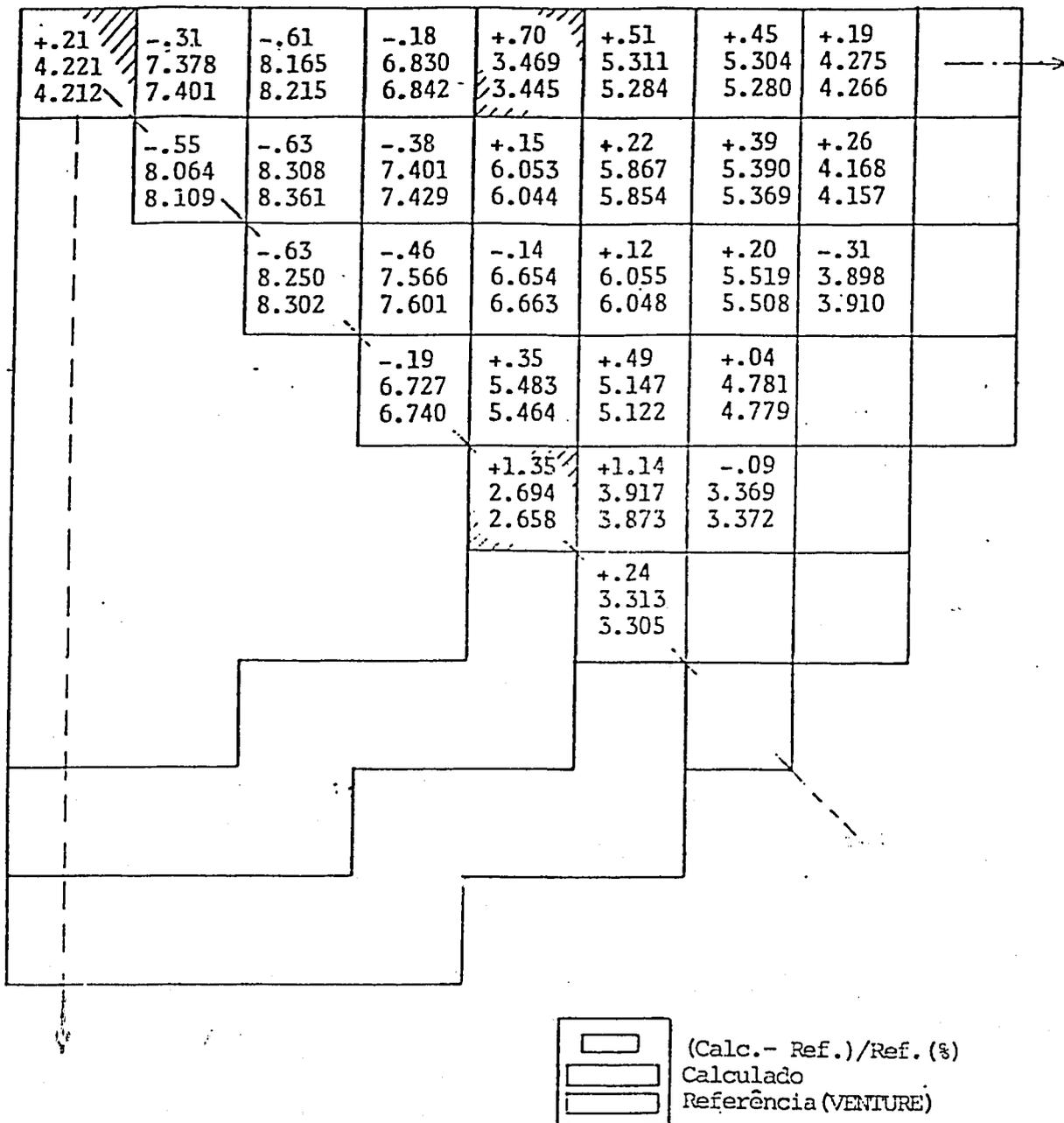


FIGURA 1 - Distribuição de potência média para cada elemento em 2D-IAEA.
 (9/1 cubico, $\epsilon_{\phi} = 10^{-5}$)

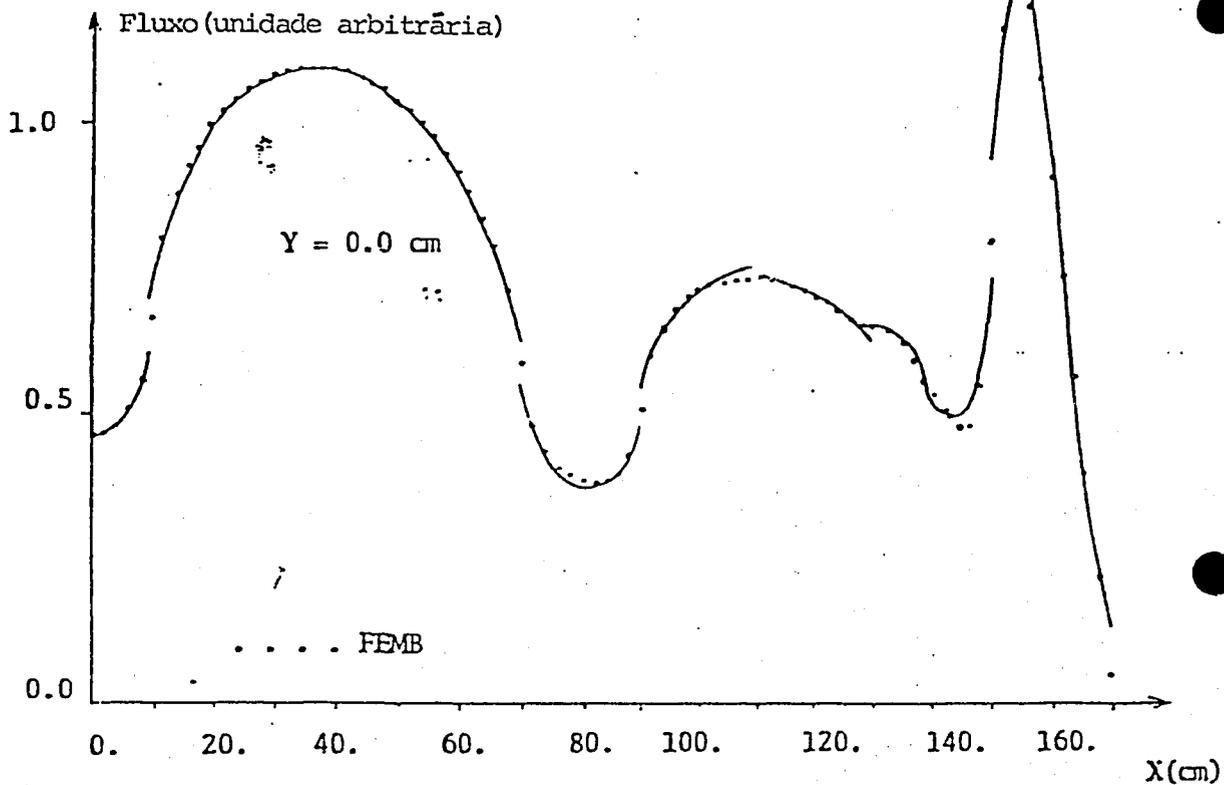
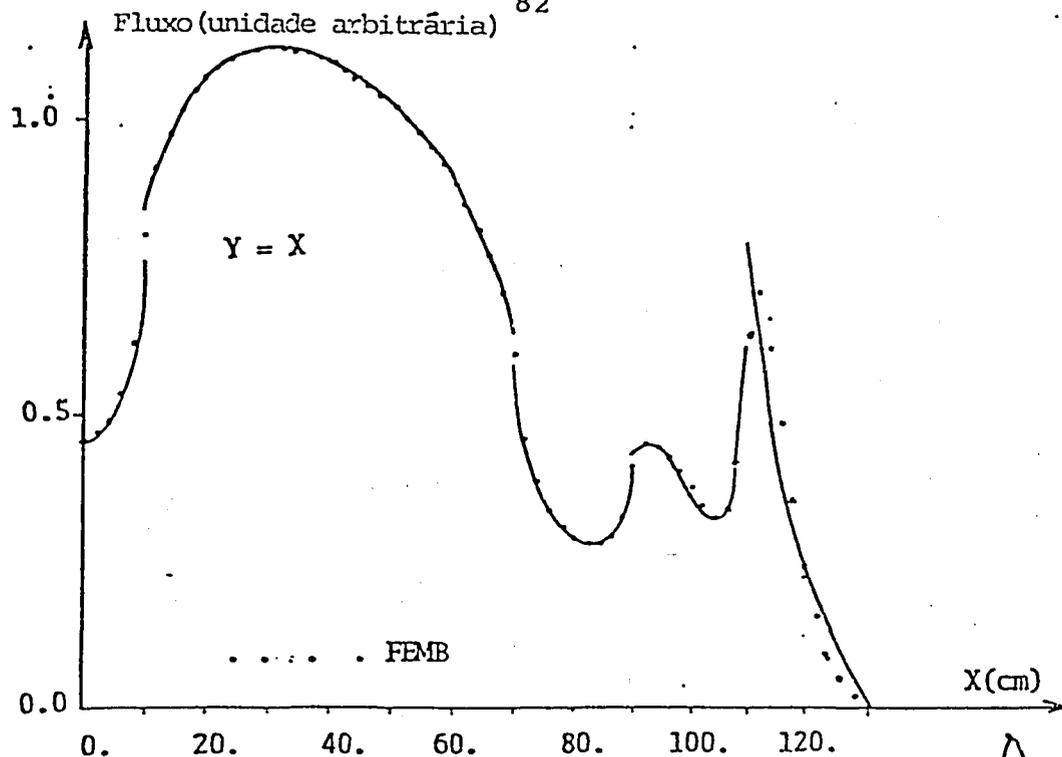


FIGURA 2 - Distribuição do fluxo neutrônico em 2D - IAEA.
(16/1 cubico, $\epsilon_p = 10^{-5}$)

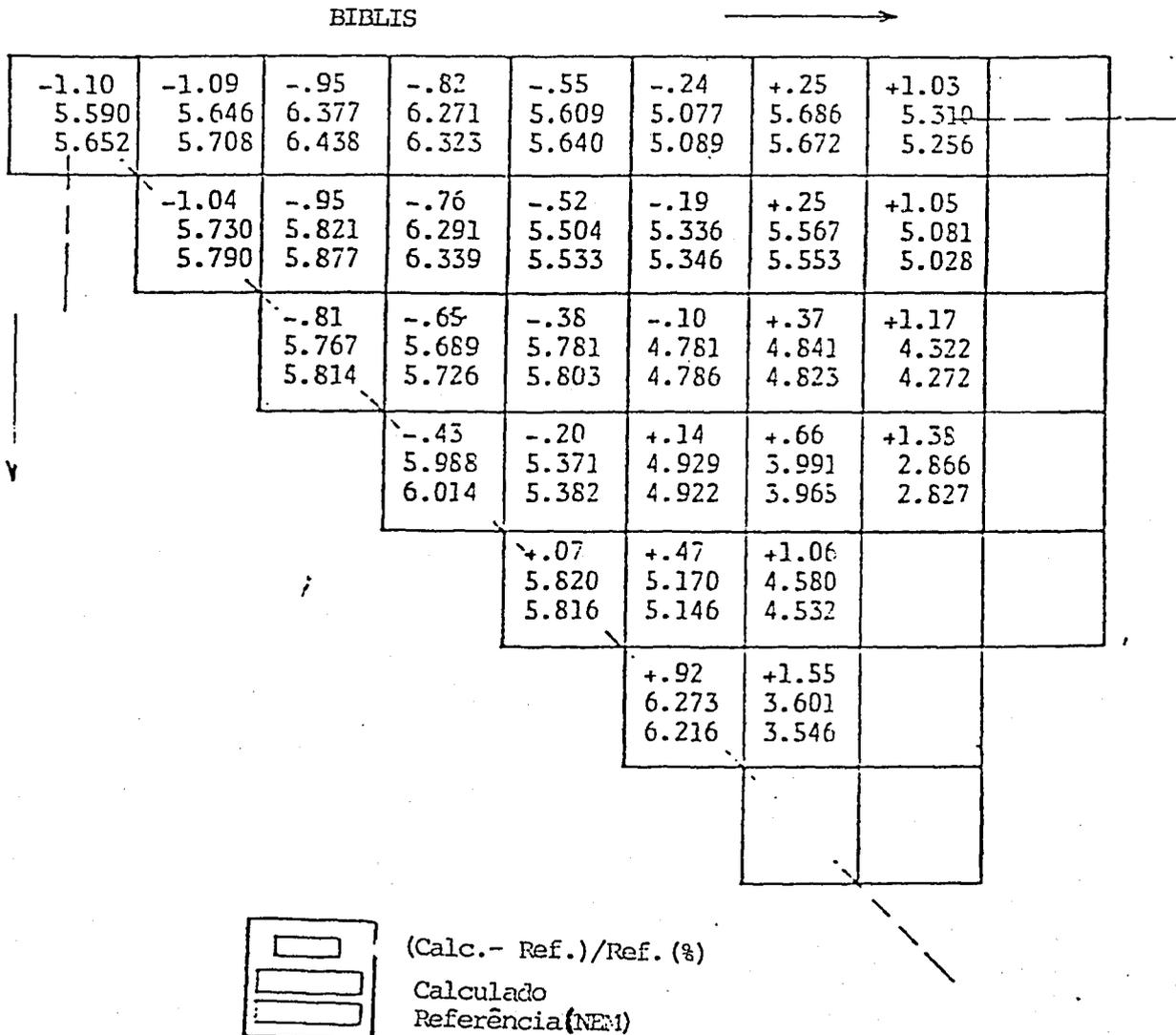


FIGURA 3 - Distribuição de potência média para cada elemento em BIBLIS.
 (16/1 cubico, $\epsilon\phi = 2 \cdot 10^{-5}$)

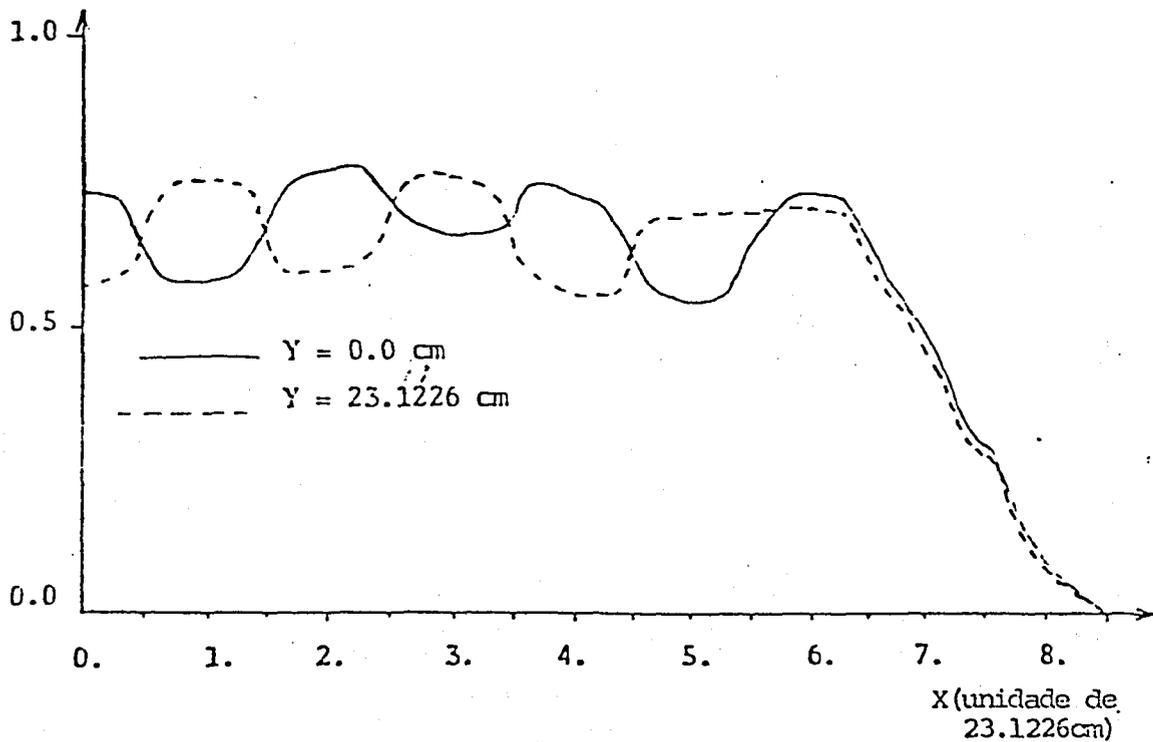
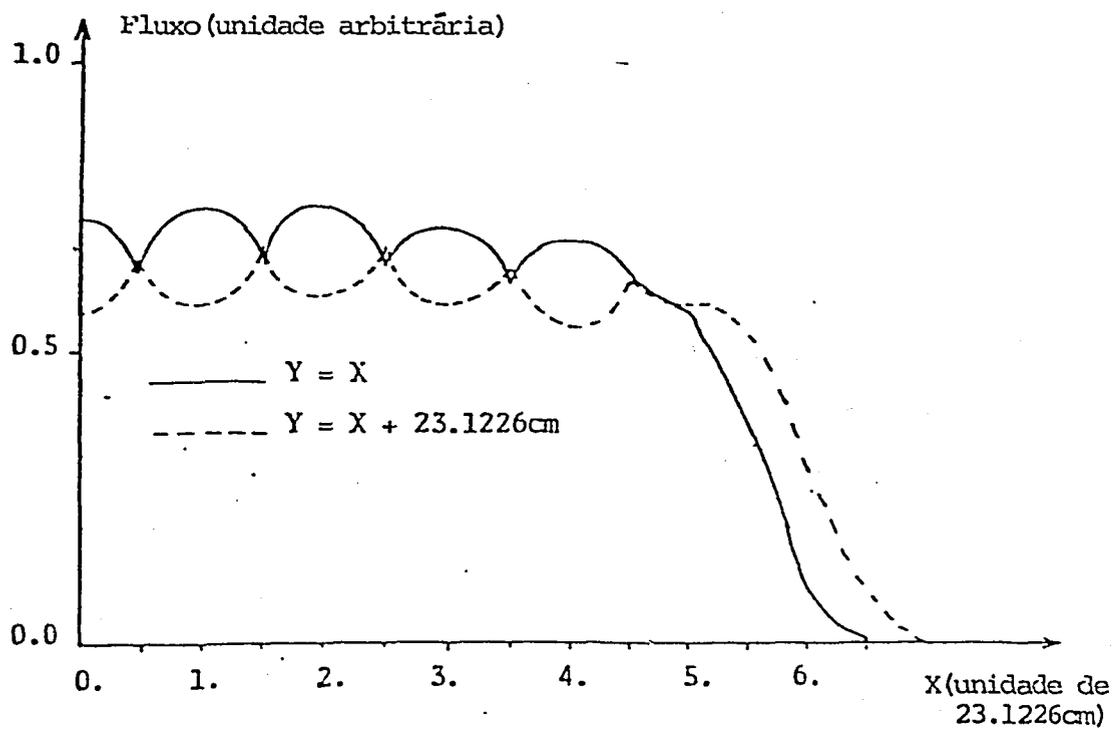


FIGURA 4 - Distribuição do fluxo neutrônico em BIBLIS.
(16/4 cubico, $\epsilon_{\phi} = 2 \times 10^{-5}$)