



ESTUDO DO PROBLEMA TÉRMICO NA CONDUÇÃO DE CALOR  
BIDIMENSIONAL NA VARETA COMBUSTÍVEL COM SIMULAÇÃO  
MULTIMÉTODOS ( ELEMENTOS FINITOS E DIFERENÇAS FINITAS )

Stéfano Grandi Bombonato

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

Orientador: D.Sc. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Rio de Janeiro  
Janeiro de 2026

ESTUDO DO PROBLEMA TÉRMICO NA CONDUÇÃO DE CALOR  
BIDIMENSIONAL NA VARETA COMBUSTÍVEL COM SIMULAÇÃO  
MULTIMÉTODOS (ELEMENTOS FINITOS E DIFERENÇAS FINITAS)

Stéfano Grandi Bombonato

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO  
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU  
DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Orientador: D.Sc. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Aprovada por: Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Prof. Cláudio Márcio do Nascimento Abreu Pereira

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JANEIRO DE 2026

Bombonato Grandi, Stéfano

Estudo do problema térmico da condução de calor bidimensional na vareta combustível com simulação multimétodos (elementos finitos e diferenças finitas) / Stéfano Grandi Bombonato. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2026.

0, 80 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: D.Sc. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2026.

Referências Bibliográficas: p. 75 – 79

1. Condução de Calor. 2. Vareta combustível. 3. Simulação MEF/MDF. I. Do Carmo, Eduardo *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Dedico este trabalho à minha  
esposa que esteve comigo em  
todas as etapas de meus  
estudos.*

# Agradecimentos

Aos meus queridos pais Stanis e Nádia que através da educação e disciplina me transformaram em uma pessoa honesta, digna e melhor.

Aos meus queridos irmãos Laila e Giácomo que sempre amei e que guardo no coração como meus melhores amigos.

À minha querida esposa Gianna que sempre acreditou em mim e nas minhas capacidades, estando presente nos momentos de dificuldades, me apoiando no dia a dia, transformando o meu ambiente de estudo e o nosso lar em um local de muita paz e harmonia.

À minha querida Avó materna Luciana, mulher de fibra e caráter que me ensinou o valor do trabalho, respeito à vida e as pessoas; sempre serei grato.

À minha querida Tia Liliana, que sempre foi como minha mãe, dando-me conselhos e educando.

À minha querida Elisbene, carinhosamente chamada de Bene, que me criou desde tenra idade, torcendo pelo meu sucesso.

Ao meu querido Avô paterno que sempre foi uma pessoa alegre e extrovertida ensinando que a vida pode ser leve e divertida.

Ao Professor Eduardo Gomes Dutra do Carmo, pela compreensão, companheirismo e ensinamentos transmitidos, indispensáveis ao meu crescimento profissional e pessoal.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear da Universidade Federal do Rio de Janeiro, pelos conhecimentos transmitidos, apoio e cordialidade no processo ensino-aprendizagem.

À Marinha do Brasil, pela oportunidade de realizar o mestrado com apoio em todas as etapas do processo.

*“A persistência é o menor  
caminho do êxito”. (Charles  
Chaplin)*

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

ESTUDO DO PROBLEMA TÉRMICO NA CONDUÇÃO DE CALOR  
BIDIMENSIONAL NA VARETA COMBUSTÍVEL COM SIMULAÇÃO  
MULTIMÉTODOS (ELEMENTOS FINITOS E DIFERENÇAS FINITAS)

Stéfano Grandi Bombonato

Janeiro/2026

Orientador: D.Sc. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Programa: Engenharia Nuclear

O objetivo do presente trabalho é propor uma simulação da transferência de calor linear estacionária em uma vareta combustível focado na utilização do método inovador desenvolvido por Santos e Dutra do Carmo et al. em [1] que acopla elementos finitos e diferenças finitas de forma não iterativa. Como exemplo para aplicação desta metodologia foi considerado um reator do tipo PWR com as suas características construtivas/operacionais obtidos de Todreas em [2]. Inicialmente construiu-se a geometria e malha através do software Gmsh [3] no qual posteriormente foram realizadas simulações utilizando a metodologia de acoplamento EF/DF comparando-se com simulações convencionais através do método dos elementos finitos (MEF). Todos os experimentos numéricos foram realizados em software desenvolvido no PEN/COPPE no qual verificou-se o tempo de montagem das matrizes e resolução do problema, perda da acurácia na solução e erro percentual. Ressalta-se que os resultados encontrados foram satisfatórios com diminuição dos tempos de processamento e CPU, precisão/acurácia elevada na comparação entre EF/DF e EF com baixo erro percentual, comprovando que o acoplamento foi vantajoso em todos os experimentos realizados para esta classe de problema.

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

STUDY OF THERMAL PROBLEM IN HEAT CONDUCTION  
TWO-DIMENSIONAL ON THE FUEL ROD WITH SIMULATION  
MULTIMETHODS (FINITE ELEMENTS AND FINITE DIFFERENCES)

Stéfano Grandi Bombonato

January/2026

Advisor: D.Sc. Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Department: Nuclear Engineering

The objective of this work propose a simulation of steady-state linear heat transfer in a fuel rod, focusing on the use of the innovative method developed by Santos and Dutra do Carmo et al. in [1], which couples finite elements and finite differences in a non-iterative way. As an example for the application of this methodology, a PWR type reactor was considered, with its constructive/operational characteristics obtained from Todreas in [2]. Initially, the geometry and mesh were constructed using the Gmsh software [3], in which simulations were subsequently performed using the FE/FD coupling methodology, comparing them with conventional simulations using the finite element method (FEM). All numerical experiments were performed using software developed in PEN/COPPE, in which the assembly times of the matrices and problem resolution, loss of accuracy in the solution, and percentage error were verified. It is worth noting that the results found were satisfactory, with a decrease in processing and CPU times, high precision/accuracy in the comparison between FE/FD and FE, and low percentage error, proving that coupling was advantageous in all experiments performed for this class of problem.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xvii</b>
<b>1 Revisão Bibliográfica</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução . . . . .	1
1.2 Reatores do tipo PWR . . . . .	3
1.3 Condução de calor . . . . .	5
1.3.1 Geração e transferência de calor na vareta combustível . . . . .	6
1.3.2 Efeito da radiação nos materiais do reator . . . . .	7
1.3.3 Os elementos componentes da vareta combustível . . . . .	8
1.3.3.1 Pastilha cerâmica . . . . .	9
1.3.3.2 Gap pressurizado com hélio . . . . .	10
1.3.3.3 Revestimento de zircaloy . . . . .	11
1.4 Simulação computacional . . . . .	12
1.5 Erro . . . . .	14
1.6 Consistência . . . . .	14
1.7 Estabilidade . . . . .	15
1.8 Convergência . . . . .	15
1.9 Métodos numéricos e analíticos . . . . .	15
1.9.1 Tipos de métodos numéricos empregados . . . . .	17
1.10 Malhas aplicadas na solução dos métodos numéricos . . . . .	19
1.10.1 Tipo de malhas . . . . .	20

1.10.1.1	Malhas estruturadas . . . . .	20
1.10.1.2	Malhas não estruturadas . . . . .	21
1.10.1.3	Malhas híbridas . . . . .	21
1.10.2	Aplicação dos métodos numéricos em malhas discretizadas . . . . .	21
1.11	Condições de contorno . . . . .	22
1.11.1	Condição de contorno de Dirichlet . . . . .	22
1.11.2	Condição de contorno de Neumann . . . . .	23
1.11.3	Condição de contorno de Robin . . . . .	23
1.12	Métodos das diferenças finitas . . . . .	24
1.12.1	Derivações no método das diferenças finitas . . . . .	24
1.12.2	Métodos das diferenças finitas aplicados ao caso bidimensional . . . . .	26
1.13	Método dos elementos finitos . . . . .	27
1.13.1	Funções de aproximação . . . . .	28
1.13.2	Método de Galerkin . . . . .	29
1.14	Método de acoplamento MEF + MDF . . . . .	30
1.14.1	A decomposição do domínio em subdomínios EF/DF . . . . .	32
1.14.2	Elementos terminais aplicados ao acoplamento EF/DF . . . . .	33
<b>2</b>	<b>Equacionamento matemático da vareta combustível</b>	<b>35</b>
2.1	Pastilha combustível . . . . .	35
2.2	Gap pressurizado . . . . .	36
2.3	Revestimento de zircaloy . . . . .	36
2.3.1	Condições de contorno de Robin . . . . .	37
2.3.1.1	Parte externa do revestimento . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Formulação por diferenças finitas e elementos finitos</b>	<b>38</b>
3.1	Diferenças finitas . . . . .	38
3.1.1	Modelagem por diferenças finitas da condução de calor na pastilha combustível . . . . .	38
3.2	Modelagem pelo método de acoplado de elementos finitos e diferenças finitas . . . . .	40
3.3	Modelagem por elementos finitos . . . . .	41
3.3.1	Modelagem por elementos finitos da pastilha combustível . . . . .	42

3.3.2	Modelagem por elementos finitos do gap pressurizado . . . . .	44
3.3.3	Modelagem por elementos finitos do revestimento de zircaloy . . . . .	47
3.4	Equação geral para o domínio de elementos finitos . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Experimento numérico</b>	<b>52</b>
4.1	Metodologia do experimento . . . . .	53
4.2	Considerações impostas . . . . .	55
4.3	Termo de fonte variando com posição e ângulo . . . . .	56
4.4	Temperatura do refrigerante variando em função do ângulo . . . . .	58
4.5	Condutividade média da pastilha combustível . . . . .	59
4.6	Condutividade do revestimento de zircaloy . . . . .	60
4.7	Verificação experimental das condutividades térmicas adotadas por Todreas . . . . .	61
4.7.1	Resultado dos experimentos com valores da condutividade do combustível fixas e variação da condutividade do revestimento de zircaloy . . . . .	62
4.7.2	Resultado dos experimentos com valores da condutividade do revestimento de zircaloy fixas e variação da condutividade do combustível . . . . .	64
4.7.3	Análise dos valores das condutividades térmicas dos experimentos . . . . .	65
4.8	Resultados da simulação computacional . . . . .	65
4.8.1	Tempo computacional . . . . .	65
4.8.2	Erro nos experimentos numéricos . . . . .	67
4.8.3	Precisão entre os métodos . . . . .	68
4.8.4	Comportamento das curvas de temperatura . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>73</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Malhas desenvolvidas no Gmsh</b>	<b>80</b>
<b>B</b>	<b>Linearização via série de Taylor do termo difusivo</b>	<b>83</b>

# Lista de Figuras

1.1	Exemplos de fontes de energias renováveis e não renováveis [4]. . . . .	1
1.2	Emissões de CO2 equivalente em toda a cadeia energética por fonte de energia primária [5]. . . . .	2
1.3	Exemplo de planta PWR [7]. . . . .	4
1.4	Exemplo de elemento combustível [8]. . . . .	5
1.5	Fluxo de calor na vareta combustível [11]. . . . .	7
1.6	Vareta combustível em corte de seção transversal [12]. . . . .	8
1.7	Representação da distribuição de temperatura do gap [11]. . . . .	11
1.8	Geração de malhas [24]. . . . .	19
1.9	Malha estruturada com elementos quadrados [28]. . . . .	20
1.10	Aproximação de derivadas de primeira ordem [34]. . . . .	25
1.11	Aproximação de derivadas de segunda ordem [34]. . . . .	25
1.12	Grade bi-dimensional para aplicação do MDF [34]. . . . .	26
1.13	Diagrama do Método dos Elementos Finitos. . . . .	28
1.14	Diagrama das Funções de Aproximação. . . . .	29
1.15	Exemplo de domínio composto por dois subdomínios retangulares ( $\Omega_{fd,1}$ e $\Omega_{fd,2}$ ) com arestas paralelas aos eixos coordenados e ao subdomínio irregular ( $\Omega_{no,fd}$ ). Os contornos de $\Omega_{fd,1}$ e $\Omega_{fd,2}$ são dados por $\Gamma_{fd,1}$ e $\Gamma_{fd,2}$ , respectivamente. As regiões $\Gamma_D$ , $\Gamma_N$ e $\Gamma_R$ compõem o contorno externo [1]. . . . .	33
1.16	Um domínio com um subdomínio retangular $\Omega_{fd,1}$ e o subdomínio irregular $\Omega_{no,fd}$ . Os elementos terminais são indicados com a letra t. Os pontos de $P_{fd,1}$ e os pontos $P_{fem}$ são indicados por $\circ$ e $\bullet$ , respectivamente [1]. . . . .	34

3.1	Diagrama do acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF). . . . .	41
4.1	Termo de fonte variando para os ângulos $\theta = 0^{\circ}, 30^{\circ}, 45^{\circ}, 60^{\circ}$ . . . . .	58
4.2	Temperatura do fluido refrigerante variando angularmente ao redor da vareta combustível. . . . .	59
4.3	Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de $0^{\circ}$ . . . . .	69
4.4	Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de $30^{\circ}$ . . . . .	69
4.6	Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de $60^{\circ}$ . . . . .	69
4.5	Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de $45^{\circ}$ . . . . .	70
4.7	Curvas de temperatura para os ângulos de $0^{\circ}, 30^{\circ}, 45^{\circ}$ e $60^{\circ}$ . . . . .	71
4.8	Curvas de temperatura obtidos por Farha e Sahadath et al. em [47]. . . . .	71
4.9	Comparação da temperatura no centro do combustível considerando análise linear e não linear por Farha e Sahadath et al. em [47]. . . . .	72
A.1	Malha com Refino Grosseiro. . . . .	80
A.2	Malha com Refino Intermediário. . . . .	81
A.3	Malha com Refino Avançado. . . . .	82

# Lista de Tabelas

1.1	Trabalhos referentes ao acoplamento MEF/MDF. . . . .	31
4.1	Seabrook Station PWR Reactor. . . . .	52
4.2	Experimentos numéricos realizados . . . . .	53
4.3	Tabela comparativa dos valores das condutividades calculadas conforme equações da norma da AIEA [14] e valores médios utilizados na simulação obtidos de Todreas [2]. . . . .	62
4.4	Valores da condutividade da pastilha e revestimento de zircaloy obtidos de Todreas [2]. . . . .	62
4.5	Experimento 1 - Condutividade do $UO_2$ fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy. . . . .	63
4.6	Experimento 2 - Condutividade do $UO_2$ fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy. . . . .	63
4.7	Experimento 3 - Condutividade do $UO_2$ fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy. . . . .	63
4.8	Experimento 4 - Condutividade do $UO_2$ fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy. . . . .	63
4.9	Experimento 5 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do $UO_2$ . . . . .	64
4.10	Experimento 6 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do $UO_2$ . . . . .	64
4.11	Experimento 7 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do $UO_2$ . . . . .	64
4.12	Experimento 8 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do $UO_2$ . . . . .	65

4.13	Custo computacional para $\theta = 0^\circ$ . . . . .	65
4.14	Custo computacional para $\theta = 30^\circ$ . . . . .	66
4.15	Custo computacional para $\theta = 45^\circ$ . . . . .	66
4.16	Custo computacional para $\theta = 60^\circ$ . . . . .	66
4.17	Erro percentual em relação a solução analítica $\theta = 0^\circ$ . . . . .	67
4.18	Erro percentual em relação a solução analítica $\theta = 30^\circ$ . . . . .	68
4.19	Erro percentual em relação a solução analítica $\theta = 45^\circ$ . . . . .	68
4.20	Erro percentual em relação a solução analítica $\theta = 60^\circ$ . . . . .	68

# Lista de Símbolos

$C^2(\bar{\Omega})$	Representa o espaço constituído por todas as funções quadráticas $\phi \in C^m(\Omega)$ , no qual $D^\alpha\phi$ é limitado e uniformemente contínua em $\Omega$ para $0 \leq  \alpha  \leq m$ , p. 38, 41, 42, 44, 47
$C^m(\Omega)$	Representa o espaço constituído das funções continuamente diferenciáveis $\phi$ , juntamente com todas as suas derivadas parciais $D^\alpha\phi$ da ordem $ \alpha  \leq m$ contínuas em $\Omega$ , p. xv
$H^1(\Omega)$	Representa o espaço de Sobolev das funções quadradas integráveis com derivadas fracas quadradas integráveis, p. 41–45, 48
$H_{div}(\Omega)$	Representa o espaço de Sobolev com produto interno, no qual as funções vetoriais são quadradas integráveis e possui divergência quadrada integrável; ambos pertencem à $L^2(\Omega)$ sendo também um espaço de Hibert. $H_{div}(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega); \text{div}(u) \in L^2(\Omega)\}$ , p. 42, 45, 48
$L^2(\Omega)$	Espaço das funções quadráticas mensuráveis integráveis a Lebesgue de $\Omega \in \mathbb{R}^2$ , p. 42
$N_{fd}$	Número de subdomínios regulares (retangular/quadrado no caso 2D) para ser inseridos em $\Omega$ , p. xvi, 39
$\Gamma$	Representa o contorno de um domínio, p. 23
$\Gamma_D$	Representa o contorno na condição de Dirichlet, p. xi, 33, 42, 45, 48

$\Gamma_N$	Representa o contorno na condição de Neumann, p. xi, 33, 42, 45, 48
$\Gamma_R$	Representa o contorno na condição de Robin, p. xi, 33, 42, 45, 48
$\Gamma_{fd,i}$	Contorno dos subdomínios regulares (retangular/quadrado no caso 2D) inseridos em $\Omega$ , p. 39
$\Omega_c$	Representa o subdomínio espacial de trabalho referente ao revestimento de zircaloy 4 inserido em $\Omega$ , p. 35, 36, 42, 44, 47, 48, 50
$\Omega_f$	Representa o subdomínio espacial de trabalho referente a pastilha combustível inserido em $\Omega$ , p. 35, 39, 42, 44, 48, 50
$\Omega_{fd,i}$	Subdomínios regulares (retangular/quadrado no caso 2D) em $\Omega$ ( $i \in \{1, \dots, N_{fd}\}$ ), p. 32, 39
$\Omega_{gap}$	Representa o subdomínio espacial de trabalho referente ao gap (espaço anular) pressurizado inserido em $\Omega$ , p. 35, 36, 42, 44, 48, 50
$\Omega_{no,fd}$	Subdomínio restante onde não será aplicado o método das diferenças finitas (MDF), p. xi, 33
$\mathbb{R}^n$	Representa o conjunto dos números reais ou espaço real euclidiano, p. xvi
$\bar{\Omega}$	Representa o conjunto fechado de $\Omega$ no $\mathbb{R}^n$ definido como $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ , p. xv, 38, 41, 42, 44, 47

# Lista de Abreviaturas

CAD	computer aided design (projeto assistido por computador), p. 54
DF	diferenças finitas, p. 30–33, 38–40, 54, 55
EDP	equações diferenciais parciais, p. 15, 16, 22, 23, 26, 27, 30, 31, 35, 39, 67
EF	elementos finitos, p. vi, xii, 29–33, 38, 40, 55, 56, 65–70
EF/DF	acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas, p. vi, xii, 31–33, 39–41, 52, 55, 56, 65–70, 73, 74
IAEA	International Atomic Energy Agency, p. 2
MDF	método das diferenças finitas, p. xi, xvi, 24, 26, 30, 31, 40, 83
MEF	método dos elementos finitos, p. vi, 17, 27, 30, 44, 47, 50, 66, 67, 70, 73, 74, 83
PEN/COPPE	Programa de Engenharia Nuclear do Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, p. vi, vii, 35, 54, 72, 74
PVC	problema de valor de contorno, p. 21, 26, 27, 30, 42, 44, 47
PVI	problema de valor inicial, p. 30
PWR	reator de água pressurizada, p. vi, vii, 3, 5, 8, 9, 54, 58

UO<sub>2</sub> Material combustível cerâmico composto de Dióxido de Urânio ( $U^{238}$  + até 5% de concentração do isótopo de  $U^{235}$ ) e outros elementos estabilizantes, p. 8, 9, 35, 38, 52, 70

# Capítulo 1

## Revisão Bibliográfica

### 1.1 Introdução

A revolução industrial no início do século XIX, trouxe mudanças significativas no cotidiano das pessoas, elevando a qualidade de vida pelos processos de mecanização e implementação de infraestrutura nos setores de transporte e urbanística.

Inicialmente as primeiras máquinas desenvolvidas neste período utilizavam como fonte de energia o carvão (combustível fóssil) para produzir trabalho mecânico através do vapor. Atualmente utiliza-se a energia elétrica em larga escala, oriunda de uma diversa matriz com inúmeras fontes conforme ilustrado na figura 1.1.



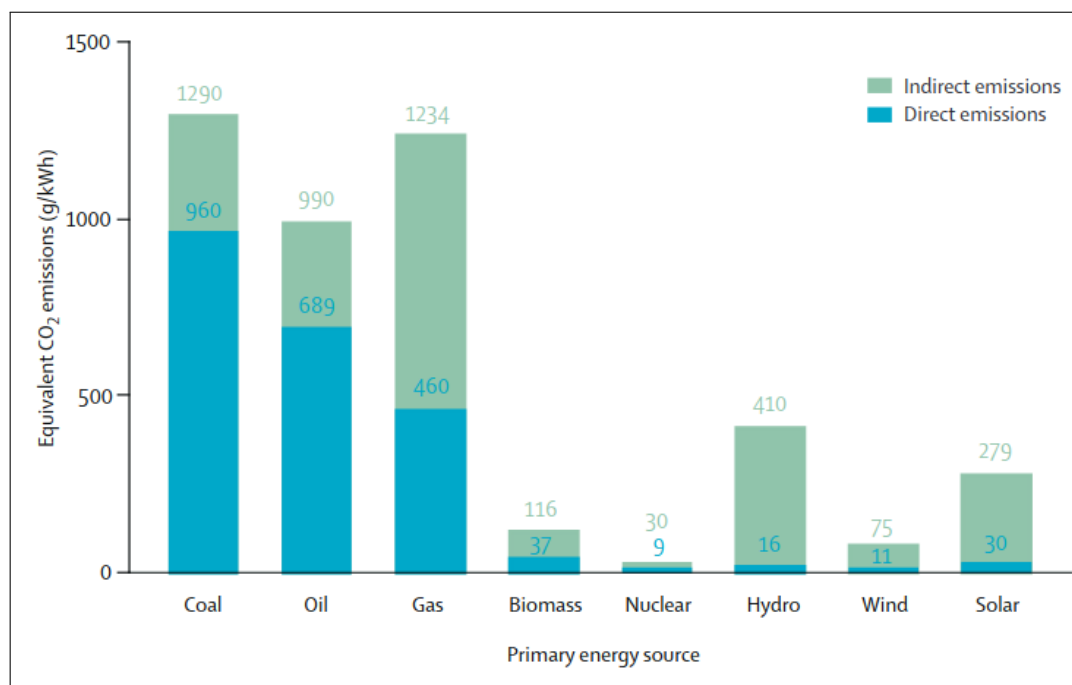
**Figura 1.1:** Exemplos de fontes de energias renováveis e não renováveis [4].

Entretanto a maioria das fontes utilizadas para geração de energia elétrica emitem dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), sendo um dos maiores responsáveis pelo efeito estufa,

elevando a temperatura global com as seguintes consequências:

- Alteração dos ciclos biológicos e ciclo das águas;
- Mudanças geográficas como desertificação e/ou alagamentos;
- Elevação do nível dos oceanos, podendo atingindo cidades costeiras;
- Interferência na produção de alimentos e cadeia do agronegócio.

Neste cenário a energia nuclear tem ganhado cada vez mais destaque devido a baixíssima emissão de gases de efeito estufa, exemplificado pela figura 1.2 de Markandya [5] obtido de compilação de dados da International Atomic Energy Agency (IAEA).



**Figura 1.2:** Emissões de CO2 equivalente em toda a cadeia energética por fonte de energia primária [5].

A análise do gráfico acima mostra o potencial da energia nuclear, sendo a menor emissora de gases de efeito estufa, mesmo se comparado com outras fontes renováveis como solar, eólica e biomassa. Cabe ressaltar que a mesma possui elevada capacidade de geração de energia elétrica ocupando um espaço geográfico menor com elevada densidade de potência ( $W/m^2$  de área horizontal de superfície terrestre ou aquática) conforme aborda McCombie [6] em valores reais conforme descrito abaixo:

- Nuclear até  $4.000 W/m^2$ ;

- Solar fotovoltaica 4 - 10  $W/m^2$ ;
- Eólica 0.5 - 1.5  $W/m^2$ ;
- Biomassa 0.5 - 0.6  $W/m^2$ .

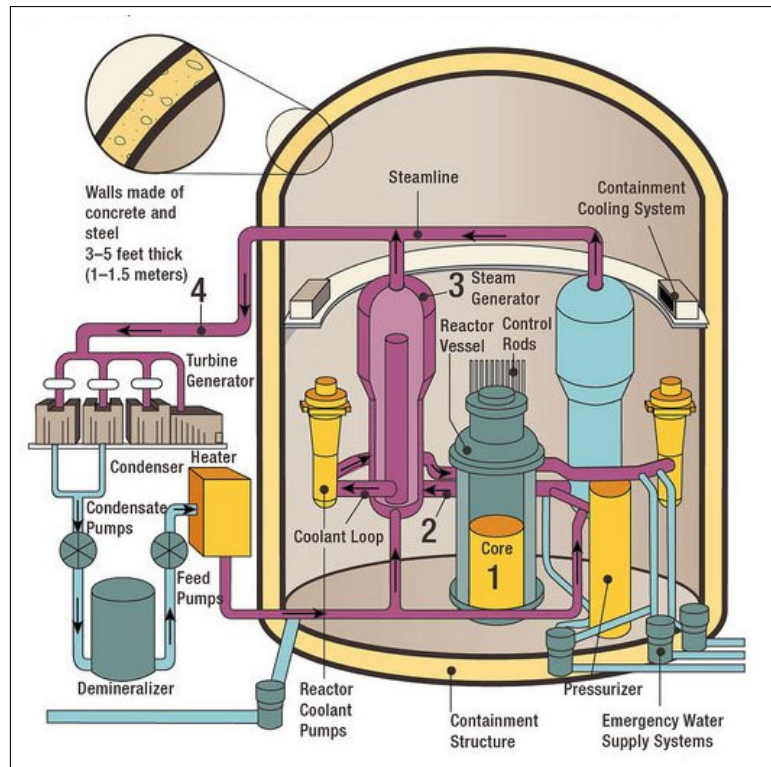
Ao longo das ultimas décadas, as nações e seus governantes, chegaram a um consenso de que a produção de energia elétrica com baixa geração de gases de efeito estufa é pauta inadiável e de responsabilidade de todos. Sendo assim a energia nuclear torna-se destaque neste processo de transição energética a fim de coexistirmos de forma harmoniosa e menos danosa com meio ambiente.

Esta dissertação está dividida em 5 capítulos, onde iniciou-se no capítulo 1 com as justificativas para utilização da energia nuclear visando a transição energética; posteriormente serão tratados os fenômenos de transferência de calor, considerações de engenharia além de simulações computacionais. No capítulo 2 será desenvolvido o equacionamento matemático considerando apenas uma equação diferencial governante (condução) com descontinuidade das propriedades físicas dos materiais. No capítulo 3 será elaborada a formulação por diferenças finitas e elementos finitos nas regiões da vareta combustível para a simulação. No capítulo 4 será explorado o experimento numérico considerando a condutividade térmica da pastilha combustível e do revestimento de zircaloy tomados como valores médios constantes. O termo de fonte e temperatura do fluido refrigerante irão variar através de relações matemáticas hipotéticas, visando trazer o problema mais próximo da realidade. No capítulo 5 finaliza-se o trabalho com as conclusões dos resultados obtidos.

## 1.2 Reatores do tipo PWR

A energia nuclear origina-se das reações de fissão (quebra de núcleos pesados em núcleos menores através do nêutron) gerando grande quantidade de energia térmica, a qual é retirada através de algum meio (refrigerante) dentro de um reator; sendo este, o princípio básico de funcionamento.

Plantas do tipo PWR possuem basicamente um sistema primário e um secundário que não se misturam e apenas trocam calor evitando possíveis contaminações radioativas conforme figura 1.3. Os principais componentes do sistema que compõem uma planta PWR seguem descritos abaixo:



**Figura 1.3:** Exemplo de planta PWR [7].

- Sistema primário:

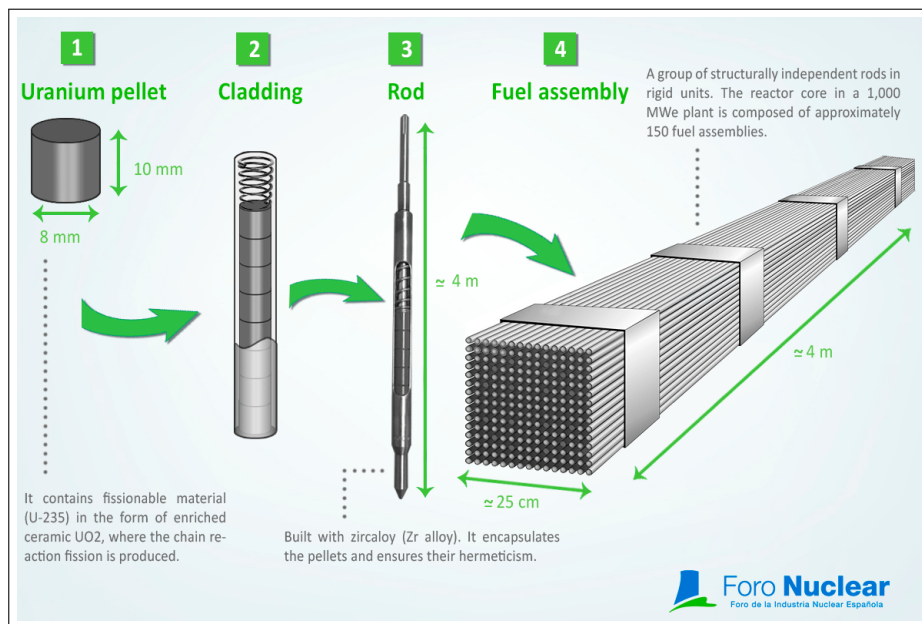
1. Vaso de Pressão: contenção do núcleo do reator;
2. Bombas de Recirculação: promovem convecção forçada do fluido refrigerante atravessando os elementos combustíveis removendo calor do núcleo;
3. Pressurizador: evita variação brusca de pressão dentro do vaso prevenindo a formação de bolhas;
4. Fluido Refrigerante: remove calor do núcleo além de atuar como moderador (termalização do nêutron aumentando a probabilidade de promulgar novas reações de fissão nuclear) e refletor;
5. Elemento Combustível: estrutura em forma de grade que sustenta as varetas combustíveis conforme figura 1.4;
6. Varetas Combustíveis: revestimento cilíndrico de zircaloy, compostos de diversas pastilhas de dióxido de urânio  $UO_2$  empilhadas e pressurizadas com gás hélio. É responsável por conter os produtos de fissão e evitar contaminação no sistema como um todo.
7. Barras de Controle: responsável por controlar a reação de fissão mantendo

o controle do reator.

8. Gerador de vapor: Responsável geração de vapor que acionará as turbinas no sistema secundário;

• Sistema secundário:

1. Turbinas;
2. Condensador;
3. Bomba de retorno de condensado;



**Figura 1.4:** Exemplo de elemento combustível [8].

Reatores do tipo PWR são amplamente empregados devido a sua maior segurança operacional, baixo histórico de incidentes/acidentes e elevada densidade de potência, sendo uma opção viável para realização da transição energética.

### 1.3 Condução de calor

O processo de geração e transformação de energia térmica, provavelmente é um dos mais importantes no quesito de aplicações diárias, pois toda a cadeia produtiva e econômica baseia-se na geração de energia elétrica, o qual é oriunda em sua grande parte, da transformação de processos físicos de condução, convecção e radiação em trabalho mecânico e por conseguinte em eletricidade.

Conforme aborda Hahn [9], condução é um modo específico de transferência de calor no qual essa troca de energia termodinâmica (energia em nível atômico

através de estados eletrônicos, vibracionais e rotacionais) ocorre em sólidos ou fluidos quiescentes (sem movimento) da região de alta para baixa temperatura através de um gradiente dentro do sistema.

O autor mencionado anteriormente também define que a energia trocada pelas partículas (átomos, moléculas ou elétrons livres) de uma região com temperatura local maior (maior função de energia termodinâmica) para uma região com uma temperatura local menor é chamada de calor.

Por fim o termo calor pode ser interpretado de forma prática como um trânsito/fluxo de energia de um ponto para outro, sendo regido por uma lei particular que governa a relação entre o fluxo de calor e o campo de temperatura para um sólido (homogêneo, isotrópico) e com geração de calor. Essa relação foi desenvolvida por Fourier sendo conhecida como equação geral da condução de calor, oriunda de balanço de energia em um volume de controle diferencial, conforme segue descrito na notação vetorial abaixo:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + q''' = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.1)$$

onde  $k$  ( $W/m \cdot ^\circ C$ ) é a condutividade térmica do material,  $c$  ( $J/m \cdot k$ ) é o calor específico,  $\rho$  ( $kg/m^3$ ) é a densidade de massa e  $q'''$  ( $W/m^3$ ) como sendo a taxa volumétrica de geração de energia interna (nuclear, química, elétrica,...).

### **1.3.1 Geração e transferência de calor na vareta combustível**

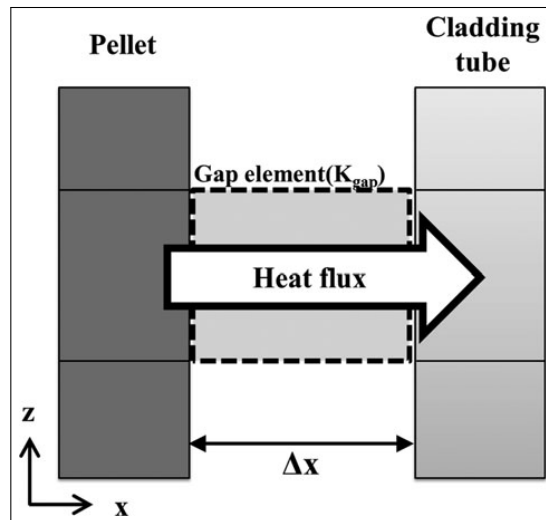
A maioria do calor gerado dentro do reator ocorre na pastilha combustível sendo oriundo da energia cinética dos fragmentos de fissão. Calor adicional também é produzido pela desaceleração e absorção da radiação, além do decaimento dos produtos de fissão (gera calor por longos períodos).

Um dado interessante abordado por Zudans [10] é que 1 grama de urânico em fissão gera aproximadamente 1 MWd de energia, sendo que as temperaturas na pastilha podem chegar a mais de 2.000  $^\circ C$ . A energia nuclear além de gerar muito calor, possui alta densidade de energia fornecendo o potencial real para resolver problemas de demanda energética atuais conforme foi explorado inicialmente na seção 1.1.

Os produtos de fissão, partículas alfa  $\alpha$  e Beta  $\beta$ , percorrem pequenas distâncias

(mícrons) e o freiamento destas ocorre no combustível. Porém a radiação Gama  $\gamma$  e o nêutron oriundos dos produtos de fissão, percorrem distâncias maiores interagindo e liberando energia térmica em outros pontos do reator (refrigerante, refletores, vaso de pressão e material estrutural). Cabe ressaltar que o nêutron é o elemento que sustenta a reação de fissão em cadeia, sendo termalizado (redução na energia cinética) no refrigerante (atua também como moderador) e assim nas outras varetas combustíveis, irá promover novas reações de fissão.

De uma forma geral o calor de interesse é gerado no elemento combustível sendo transferido pelo processo de condução ao gap (caracterizado por um salto térmico), posteriormente o calor é transferido para o revestimento que por condução é transferido ao refrigerante. Logo o mecanismo de transferência de calor governante na vareta combustível é a condução, conforme é exemplificado na figura 1.5 abaixo:



**Figura 1.5:** Fluxo de calor na vareta combustível [11].

### 1.3.2 Efeito da radiação nos materiais do reator

A radiação altera as propriedades físicas, químicas e mecânicas dos materiais utilizados no reator, sendo esta a principal característica que transforma a área nuclear em um ramo de elevada complexidade. Em Zudan [10] será abordado de forma descritiva os efeitos da radiação conforme segue:

- O revestimento da vareta combustível é responsável por conter os produtos de fissão para não contaminar o sistema com elementos radioativos que sofram decaimento, prejudicando o funcionamento e degradando a segurança operacional;

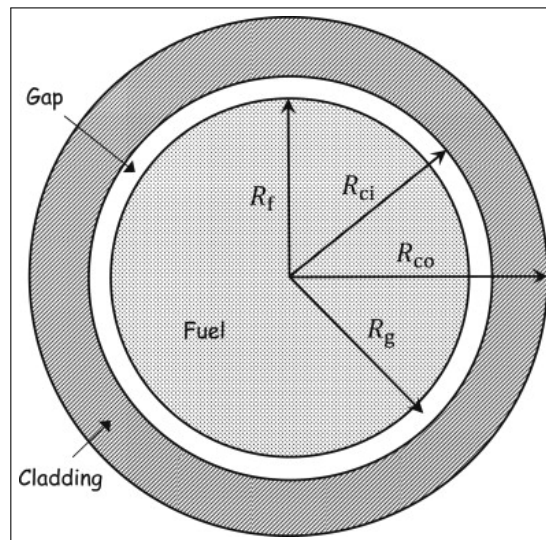
- Radiação beta  $\beta$  e gama  $\gamma$  são de interesse geralmente nos materiais não metálicos.
- Os nêutrons são de interesse no moderador, refrigerante, controle e materiais estruturais. Cabe ressaltar que o nêutron reduz a ductilidade da maioria dos materiais estruturais com propósito de contenção dentro do reator.

No geral metais irradiados apresentam aumento na resistência elétrica, resistência a tração e dureza, maiores limites de escoamento, baixa porcentagem de alongamento e elevadas temperaturas de transição dúctil-frágil.

A operação de um reator deve estar em regime permanente com pequenos ajustes dos transites, evitando mudanças bruscas de potência; prevenindo choques térmicos e acionamento de gatilhos de fragilidades estruturais (propagação de trincas) que esteja ocorrendo ao longo do tempo no reator.

### 1.3.3 Os elementos componentes da vareta combustível

O núcleo de reatores de potência do tipo PWR geralmente são compostos de varetas combustíveis circulares projetadas com os seguintes elementos: pastilha combustível sólida de  $\text{UO}_2$ , gap pressurizado com hélio e revestimento de zircaloy, conforme exemplificado na figura 1.6 abaixo.



**Figura 1.6:** Vareta combustível em corte de seção transversal [12].

Os componentes da vareta combustível têm peculiaridades que se tornam pontos críticos para o entendimento dos fenômenos de transferência de calor na área nuclear

e viabilizar o funcionamento de um reator de forma segura. Abaixo segue uma descrição das características dos elementos componentes de uma vareta.

### 1.3.3.1 Pastilha cerâmica

Atualmente boa parte dos reatores de potência PWR convencionais em operação, utilizam pastilhas sólidas de dióxido de urânio  $UO_2$  empilhadas e enclausuradas dentro de um revestimento para conter os produtos de fissão e gases gerados no processo.

A decisão de se utilizar um elemento combustível de natureza cerâmica deve-se as seguintes vantagens.

- O  $U^{238}$  captura 6 nêutrons sendo responsável pelo efeito Doppler, significativo para a segurança do reator pois controla a reatividade. Cabe ressaltar que o boro solúvel também é injetado no reator como elemento de controle da reatividade ao longo do período de queima.
- Alta densidade que retarda a desintegração e pulverização do combustível, promovendo melhoras na condutividade térmica. Cabe ressaltar que mesmo assim, rachaduras grosseiras no combustível irão surgir devido a fragilidade e baixa condutividade dos materiais cerâmicos atrelado aos elevados gradientes térmicos;
- A porosidade do combustível ajuda na acomodação dos gases provenientes das reações de fissão;
- Facilidade de fabricação através de processos de sinterização e metalurgia do pó;
- Elevado ponto de fusão;
- Estabilidade química com a maioria dos refrigerantes e materiais de revestimento;
- Estabilidade à radiação.

Um ponto importante a ser mencionado é que as propriedades físicas do combustível variam fortemente com a temperatura e devem ser levados em consideração nos cálculos reais/operacionais de um reator. Diversas correlações

matemáticas oriundas de experimentos foram desenvolvidas, considerando o burnup (queima) e são reunidos em [13] e [14].

### 1.3.3.2 Gap pressurizado com hélio

O gap (espaço anular) entre a pastilha e o revestimento é pressurizado com gás hélio com as seguintes funções:

- Manter a estabilidade estrutural (equilibrar a pressão com o vaso de pressão) nas condições normais de operação;
- Alojamento dos gases de fissão que escapam da matriz cerâmica da pastilha combustível;
- Acomodar as expansões térmicas do combustível e revestimento conforme aborda Todreas [2].

Dentre o que foi mencionado nota-se que o espaço anular é complexo com diversas funções que podem interagir entre elas, alterando o processo de transferência de calor. Além de tudo que foi exposto, existe o processo de rachadura do combustível que provoca variação circunferencial na lacuna, entrando em contato com o revestimento. Este fato aumenta a condutância térmica como um todo, mesmo que os gases de fissão (xenônio e criptônio) juntamente com o hélio, reduzam a condutividade térmica ao longo do tempo conforme ocorre a queima (burnup) do combustível. O valor do coeficiente de convecção total do gap é dado na relação abaixo:

$$h_{gap} = h_{gás} + h_{Contato} + h_{Radiação} \quad (1.2)$$

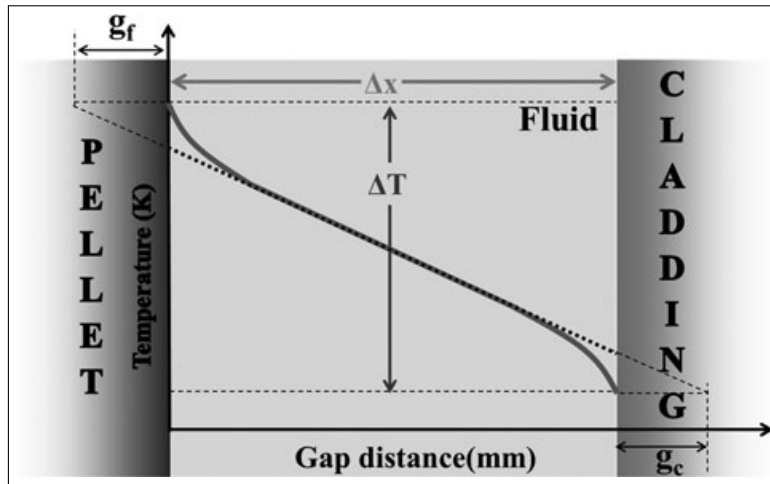
Kang em [11] irá explorar a problemática do gap na transferência de calor na vareta combustível, abordando que a condutância da lacuna é muito sensível a variação da espessura que geralmente é mais estreita que 0,1 mm. O referido autor aborda que a condutividade do gás é responsável por grande parte da transferência de calor, sendo que o efeito da convecção é restrito, devido a pequena espessura do gap. Sendo assim, a transferência de calor não pode ser calculada através da consideração do efeito da convecção normal e sim através da lei de condução de Fourier considerando como valor de condutividade no gap calculado pela equação 1.3.

$$k_{gap} = h_{gap} \cdot \Delta X \quad (1.3)$$

Onde  $\Delta X$  é a espessura do gap.

Outra peculiaridade interessante sobre a transferência de calor no gap; é que a mesma ocorre através do movimento molecular do gás, onde a distribuição de temperatura na superfície externa da pastilha e na superfície interna do revestimento não é linear. Isso se deve a uma queda brusca de temperatura nestas áreas pelo deslizamento viscoso hidrodinâmico que afeta a condução de calor através do gás.

Essa descontinuidade que ocorre dentro do caminho livre médio das paredes é chamada de distância de salto de temperatura ( $g_f + g_c$ ) conforme figura 1.7:



**Figura 1.7:** Representação da distribuição de temperatura do gap [11].

Considerando experimentações e o conceito de salto térmico em reatores de água leve, chegou-se a um valor limite inferior real para o coeficiente de transferência de calor por convecção que considera a composição da mistura gasosa, pressão e variação do espaço anular durante o burnup no gap, conforme menciona Akimoto [15] de forma conservadora, o valor é de  $h_{gap} = 5.7 \times 10^3 \text{ (W/m}^2\text{K)}$ .

### 1.3.3.3 Revestimento de zircaloy

O revestimento de zircaloy é responsável por conduzir o calor da pastilha combustível e gap para o refrigerante, além de conter os produtos de fissão, evitando contaminações do sistema. O mesmo opera em condições de trabalho com elevadas temperaturas e pressões na parte interna e externa, sofrendo também processos corrosivos na parede em contato com o refrigerante. Cabe ressaltar que devido a

radiação, as propriedades físicas variam com a temperatura.

Alshareef em [16] realizará um estudo de como a radiação interfere nas características de ligas de zircônio aplicados em varetas combustíveis, aos quais são de interesse para área nuclear as ligas de Zr-Sn-Fe-Ni-Cr (Zircaloy 2), Zr-Sn-Fe-Cr (Zircaloy 4) e Zr-Sn-NbFe-Cr (Zircaloy 2.5). O referido autor explora o fato de que os revestimentos de zircônio apresentam instabilidades dimensionais devido a exposição à irradiação de alta temperatura, crescimento da irradiação, fluência da irradiação e fragilização por hidrogênio; logo o revestimento sofre solicitações mecânicas elevadas e deve ser dimensionado para tais condições.

O motivo pelo qual este material é amplamente empregado é devido a sua alta resistência a corrosão, baixa seção de choque de absorção macroscópica para os nêutrons e boa condutividade térmica.

Quando trata-se de baixa seção de choque macroscópica, refere-se aos nêutrons térmicos, porém os nêutrons rápidos (1-2 Mev), provocam alterações na liga e propriedades como condutividade térmica que irão variar com o burnup (queima) do combustível. Da mesma forma que ocorre para a pastilha combustível, correlações matemáticas foram desenvolvidas através experimentos, considerando o burnup e efeitos da radiação e são reunidos em [13] e [14].

## 1.4 Simulação computacional

Considerando o que foi mencionado, a simulação computacional dos fenômenos físicos e projetos de engenharia se fazem necessários, a fim de aumentar a eficiência do ciclo termodinâmico, melhoras em segurança operacional (meios passivos) e principalmente, aprimorar e simular os fenômenos de troca de calor (condução/convecção) no interior do núcleo do reator. A simulação traz a vantagem de diminuir a necessidade de prototipagem excessiva de elevado custo financeiro, ainda mais no ramo nuclear onde qualquer experimento demanda elevada preparação e segurança.

Uma simulação computacional para que seja fidedigna com fenômeno físico modelado matematicamente, necessita de análise sobre a solução numérica calculada, para decidir quais resultados são confiáveis em descrever o problema; demandando interpretação e senso crítico conforme explora Winsberg [17].

Em se tratando de modelos matemáticos que representam leis físicas, variáveis

de estado ou condições de contorno, em sua grande maioria são descritas através de equações diferenciais aplicadas com três propósitos: predição, compreensão e exploração, abordado por Murr [18] em problemas complexos de engenharia, sendo divididos pelo referido autor em quatro grupos:

- Simulações baseadas em equações onde uma teoria governante pode orientar a construção de modelos matemáticos baseados em equações diferenciais;
- Equações baseadas em partículas, envolvendo corpos discretos ou conjuntos de equações diferenciais que governam sua interação;
- Equações baseadas em campo, onde um conjunto de equações governa a evolução temporal de um meio;
- Equações baseadas em campo contínuo (velocidade, temperatura, massa, distância, etc).

Quando tratamos de simular a realidade de forma virtual através de algoritmos com modelos matemáticos, a palavra “validação” norteia todo o processo computacional, pois quanto maior for a validade da simulação, mais próximo da realidade ela se aproxima.

Cabe ressaltar que boa parte dos modelos físico-matemáticos são simplificados devido a complexidade/desconhecimento amplo dos fenômenos naturais, atrelado a falta de poder computacional suficiente para operacionalizar cálculos complexos.

Pelo motivo mencionado acima, a “validação” irá comparar o real com o virtual, demandando análise sensata e criteriosa para verificar se mesmo com as simplificações impostas, a simulação computacional consegue entregar o desejado.

Murr em [18, p 10] tece as seguintes considerações sobre validar uma simulação computacional:

“Costuma-se dizer que simulações sem validação nada mais são do que animação. Enquanto a validação, por um lado, envolve o processo de determinar se o modelo selecionado representa a situação real, a verificação, por outro lado, envolve o processo de determinar se a simulação se aproxima de soluções verdadeiras para as equações diferenciais que representam o modelo original.

A validação envolve comparar uma saída do modelo com dados experimentais ou observáveis.”

Em tudo que foi mencionado, pode-se observar a importância de simular a realidade de forma criteriosa, a qual, deve possuir validação para que o modelo físico-matemático represente a realidade. O processo de verificação, conforme já foi descrito aborda a matemática implementada e se esta se aproxima de soluções verdadeiras. Cabe ressaltar que computadores não realizam cálculos de forma analítica e sim de forma numérica, sendo assim, deve-se levar em consideração o erro do cálculo em relação a solução analítica, convergência do método numérico (se a solução está se aproximando de um valor único), taxa de convergência (velocidade na qual o método converge para o resultado no processo iterativo) e a estabilidade (pequenas perturbações na entrada do sistema geram pequenas perturbações nos dados de saída sem amplificação dos erros).

## 1.5 Erro

O erro de uma forma generalizada para qualquer tipo de método numérico, pode ser calculado pelas equações 1.4, 1.5 e 1.6 lembrando que estes são de natureza vetorial. Neste contexto a magnitude (norma) deste vetor é utilizado para verificar se o erro está diminuindo conforme aumenta o refino da malha.

$$\text{Erro Absoluto} = | \text{Solução exata} - \text{Solução numérica} | \quad (1.4)$$

$$\text{Erro Relativo} = \frac{| \text{Solução exata} - \text{Solução numérica} |}{\text{Solução exata}} \quad (1.5)$$

$$\text{Porcentagem de Erro} = \frac{| \text{Solução exata} - \text{Solução numérica} |}{\text{Solução exata}} \times 100 \quad (1.6)$$

## 1.6 Consistência

Conforme Leveque [19], a consistência com a equação diferencial e as condições de contorno é dado por:

$$\| (\text{Erro de truncamento local})^h \| \rightarrow 0, \quad \text{quando } h \rightarrow 0 \quad (1.7)$$

A definição acima nos diz que um problema, irá convergir para a equação

diferencial, quando o tamanho de malha tende a um valor muito pequeno, assim o esquema é consistente conforme abordado por Adak e Mandal [20].

## 1.7 Estabilidade

Adak em [20] estabelece um conceito generalista para a estabilidade de qualquer método numérico linear em problemas estacionários.

“Se a diferença do resultado numérico e o resultado exato tende a zero conforme o número de iterações tende ao infinito, então o método numérico é dito ser estável.”

Para um problema de valor de contorno, o sistema de equações matriciais na forma  $A^h.U^h = F^h$ , onde  $h$  é a largura da malha; é dito estável, se a inversa  $(A^h)^{-1}$  existe para todo  $h$  suficientemente pequeno e se há uma constante  $C$  independente de  $h$  quando  $h \rightarrow 0$ , tal que:

$$\| (A^h)^{-1} \| \leq C, \quad \text{para todo } h \text{ suficientemente pequeno} \quad (1.8)$$

## 1.8 Convergência

Tanto o método dos elementos finitos quanto o método das diferenças finitas são ditos convergentes se  $\| (\text{Erro Global})^h \| \rightarrow 0$  quando  $h \rightarrow 0$ , onde  $h$  representa o tamanho da malha e o Erro Global representa a diferença entre a solução exata e a aproximada.

Cabe ressaltar que para problemas de valor inicial (PVI) a convergência é dado pela relação abaixo:

$$\text{Consistência} + \text{Estabilidade} \Rightarrow \text{Convergência} \quad (1.9)$$

## 1.9 Métodos numéricos e analíticos

Como vem sendo discutido, os métodos numéricos permitem a resolução de equações diferenciais parciais (EDP) lineares e não lineares além de problemas modelados de forma integral; obtendo-se uma solução aproximada que tem um erro associado e depende de fatores como:

- Convergência e taxa na qual ocorre;
- Simplificações do modelo matemático e se este é *bem comportado*.

O termo *bem comportado* aplica-se a funções matemáticas onde não ocorrem mudanças/descontinuidades bruscas em determinados valores. Por exemplo, uma função contínua que em determinado ponto deixa de convergir para um valor e passa a divergir ou tem como resultado uma indeterminação matemática.

O método analítico por outro lado fornece a solução exata de um problema, sendo considerado superior em relação ao método numérico. Em sua natureza básica, métodos numéricos transformam equações diferenciais em equações de diferenças, fornecendo uma metodologia/algoritmo que pode ser implementado em computadores conforme aborda Ardourel [21], que irá discutir até que ponto que o método analítico é superior ou não ao numérico.

O método numérico permite resolver problemas massivos e que demandam muitas operações matemáticas; algo que seria quase impossível se realizado através dos métodos analíticos. Além do mais a fim de corroborar com análise das diferenças entre as modelagens, French e Taylor em [22, p 174] tecem as seguintes considerações sobre as dificuldades da modelagem analítica:

“resolver equações analiticamente requer técnicas matemáticas específicas dependendo da equação em questão. Por exemplo, as técnicas matemáticas para resolver equações diferenciais lineares não são as mesmas que resolver equações não lineares. Da mesma forma, a maneira de resolver equações de primeira ordem não é a mesma que resolver equações diferenciais de segunda ordem. Resolver equações analiticamente é sensível a pequenas modificações nas equações: uma pequena mudança em uma equação resolvida analiticamente pode levar a uma equação analiticamente insolúvel.”

Ardourel em [21] discute sobre superioridade entre os métodos, chegando a conclusão de que o universo numérico é mais generalista para resolver EDP de diversos tipos com uma mesma metodologia, mesmo que seja realizado alterações de parâmetros e variáveis. O autor por fim enumera as principais razões para que o método numérico seja preferível as vezes em relação ao analítico que são:

- (i) Algumas soluções analíticas tem que ser verificadas numericamente para análise do erro e convergência;

- (ii) Soluções analíticas são às vezes uma maquinaria matemática excessivamente sofisticada para o problema em questão;
- (iii) Métodos analíticos não oferecem uma abordagem sistemática para resolver equações de diferentes tipos como métodos numéricos.

Os itens mencionados acima mostram que soluções analíticas apesar de serem exatas, nem sempre nos fornece um resultado desejado e pode apresentar diversas dificuldades no processo; sendo assim no dia a dia em aplicações de engenharia, utiliza-se as soluções numéricas atreladas a computação de alto desempenho para soluções de problemas complexos, utilizando as soluções analíticas quando aplicáveis, para comparação do desvio e erro.

### 1.9.1 Tipos de métodos numéricos empregados

Por volta da metade do século XIX, começou o nascimento dos métodos numéricos e este vieram evoluindo com o tempo até o advento da computação moderna, conforme sintetiza Mahian [23] com suas vantagens e desvantagens para os dois métodos mais utilizados.

- **Diferenças Finitas**

- + Vantagens

- ⇒ Simplicidade;
    - ⇒ Tempo de convergência relativamente pequeno;
    - ⇒ A avaliação numérica da equação de diferença é simples;
    - ⇒ Estruturas de código simples;
    - ⇒ Intuitivo e fácil de implementar para problemas simples.

- + Limitações

- ⇒ Comparado ao MEF, precisa de um grande número de grades para dar uma boa saída;
    - ⇒ Difícil de empregar para geometrias complexas.

- **Elementos Finitos**

- + Vantagens

- ⇒ Método muito geral e usado para resolver uma variedade de problemas;
- ⇒ A matriz de rigidez e o vetor de carga podem ser computados para cada elemento;
- ⇒ A variação espacial das propriedades pode ser manipulada com relativa facilidade;
- ⇒ Regiões irregulares podem ser modeladas com maior precisão;
- ⇒ Adequação para equações não lineares;
- ⇒ Alta flexibilidade na alteração de tamanhos de elementos;
- ⇒ Problemas de valores de contorno mistos são mais fáceis de manusear;
- ⇒ Qualquer geometria moldada pode ser modelada com o mesmo esforço.

#### + Limitações

- ⇒ As equações são matematicamente complexas;
- ⇒ Problemas numericamente intensivos podem levar mais tempo de CPU e espaço de armazenamento de memória;
- ⇒ Mais matemática envolvida e menos significância física;
- ⇒ Estruturas de código complexas.

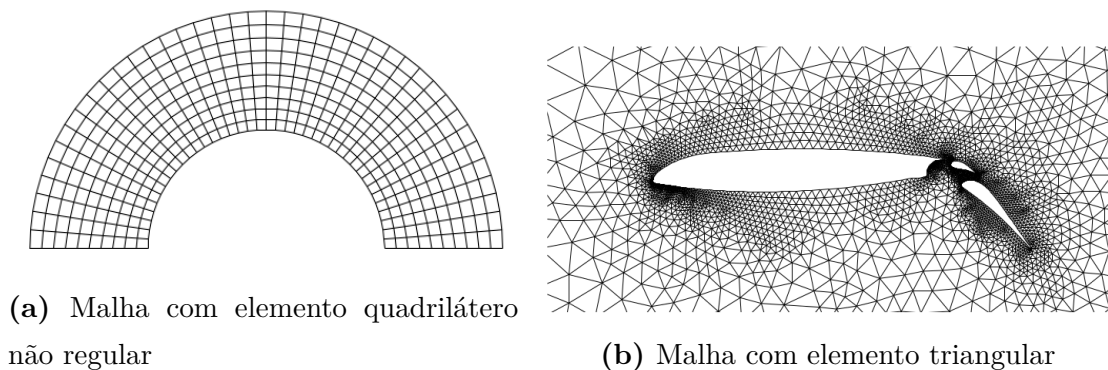
Mesmo com tudo que foi mencionado acima existe uma infinidade de métodos que não serão abordados no escopo deste trabalho como por exemplo, o método dos volumes finitos, método dos contornos e método de Monte Carlos que está na classificação de simulações estatística, sendo muito empregado na área de física nuclear (imagens médicas) e fenômenos de transporte de radiação.

Nesta seção fica claro que para simular e escolher algum método numérico é crucial que se conheça o fenômeno físico e como ele é modelado matematicamente, para uma escolha consciente e assertiva que leva em consideração as limitações computacionais e simplificações impostas no processo.

## 1.10 Malhas aplicadas na solução dos métodos numéricos

Boa parte dos métodos numéricos necessitam da criação de uma grade ou malha a fim de encontrar uma solução numérica para uma equação diferencial parcial ou integral em uma geometria desejada.

Conforme define Bern [24], uma malha é uma discretização (divisão) de um domínio geométrico em pequenas formas simples (subdomínios menores), como triângulos ou quadriláteros em duas dimensões e tetraedros ou hexaedros em três, conforme figura 1.8 abaixo.



**Figura 1.8:** Geração de malhas [24].

Ao gerar uma discretização em específico, não basta apenas utilizar um software para geração de malhas de forma automática, sendo necessário verificar se os critérios abaixo foram satisfeitos conforme Dundar [25] e Babuska [26]:

- (i) A malha deve estar em conformidade com o limite da região, que pode consistir em mais de um componente conectado;
- (ii) A malha deve ser fina o suficiente para produzir uma aproximação adequada à geometria do problema original;
- (iii) Os elementos que constroem a malha devem ser de boa qualidade, pois elementos malformados podem causar matrizes mal condicionadas;
- (iv) O número de elementos não deve ser muito grande, pois malhas refinadas aumentam a complexidade da resolução do problema além de consumir muito

poder computacional.

Além dos pontos mencionados acima, a geometria do elemento na malha também interfere na resolução de problemas. Para o mesmo grau de liberdade, as malhas quadriláteras e hexaédricas são mais adequadas para análise não linear e situações onde o alinhamento dos elementos é importante para a física do problema. Cabe ressaltar que geometrias quadriláteras e hexaédricas reduzem o número de elementos e os tempos de processamento conforme conclui Yildiz em [27]. Malhas triangulares por outro lado se ajustam melhor a geometrias mais complexas.

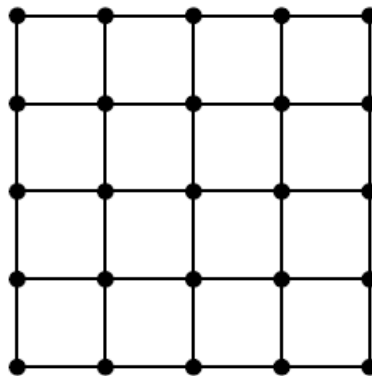
Sendo assim, fica evidente como é importante definir o problema e conhecer as equações que governam o fenômeno físico, para depois definir qual o melhor tipo de elemento da malha considerando o nível de complexidade do domínio geométrico.

### 1.10.1 Tipo de malhas

As malhas podem ser divididas em estruturadas, não estruturadas e híbridas onde o critério de seleção é baseado no tipo de aplicação conforme aborda Yildiz [27].

#### 1.10.1.1 Malhas estruturadas

Malhas estruturadas conforme figura 1.9 são compostas de elementos em que todos os nós internos têm mesmo número de elementos adjacentes (próximos) com as seguintes características:



**Figura 1.9:** Malha estruturada com elementos quadrados [28].

- Possuem elementos quadriláteros em 2D e hexaedros em 3D;
- Facilidade e simplicidade em cálculos numéricos;
- Consome menos armazenamento de memória pois a matriz pode definir a conectividade vizinha implicitamente;

- Alta compatibilidade com algoritmos de diferenças finitas para solução de PVC;
- Malhas estruturadas (tamanho fixo) não se aplicam a domínios de geometria complexa, pois exige uma quantidade maior de elementos do que uma malha não estruturada.

#### **1.10.1.2 Malhas não estruturadas**

Malhas não estruturadas conforme figura 1.8.(b) são compostas de elementos triangulares de vários tamanhos, permitem que qualquer número de elementos se encontre em um único nó, com as seguintes características/vantagens discriminadas por Dundar [25]:

- Comumente são aplicados elementos triangulares e tetraédricos, podendo ser também quadriláteros e hexaédricos;
- Flexibilidade no ajuste de domínios complicados.
- Classificação rápida de elementos pequenos a grandes.
- Fácil refinamento e desrefinamento.

#### **1.10.1.3 Malhas híbridas**

Uma malha híbrida é composta de malhas estruturadas organizadas em um padrão geral não estruturado, sendo aplicadas em problemas com geometrias complicadas.

### **1.10.2 Aplicação dos métodos numéricos em malhas discretizadas**

Após discretizar um domínio geométrico é necessário que as equações globais que regem o fenômeno físico também sejam discretizadas. Isto quer dizer que as equações devem ser rearranjadas para serem aplicadas localmente em cada elemento de um subdomínio, considerando as condições de contornos e a conectividade entre os elementos. Abaixo segue as etapas básicas de aplicação dos métodos numéricos em domínios discretizados conforme explora Yilmaz [29]:

1º Discretização do domínio geométrico em malhas;

- 2º Expressão simbólica da solução dentro de cada subdomínio por um número finito de parâmetros;
- 3º Combinação das equações locais obtidas para cada subdomínio;
- 4º Construção de um conjunto de equações descrevendo toda a geometria;
- 5º Aplicação das condições de contorno;
- 6º Solução do sistema de equações globais para obter a função desconhecida.

## 1.11 Condições de contorno

Quando trata-se de uma condição de contorno aplicada a uma EDP para problemas de bem-posto, estamos nos referindo a uma solução/valor conhecido em um determinado ponto no espaço da fronteira (contorno) do seu domínio; não podendo ser confundido com condição inicial que refere-se a uma solução conhecida em um determinado ponto no tempo. Cabe ressaltar que conforme Strauss [30] problemas bem-postos em uma EDP tem as seguintes características abaixo:

- Existência: Existe pelo menos uma solução  $u(x, t)$  que satisfaz todas essas condições;
- Unicidade: Existe no máximo uma solução;
- Estabilidade: A solução única  $u(x, t)$  depende de forma estável dos dados do problema. Isso significa que se os dados forem alterados um pouco, a solução correspondente muda apenas um pouco.

Pode-se considerar que uma condição de contorno nada mais é do que um tipo de restrição imposta para encontrar soluções únicas (problema bem-posto) em EDP, sendo divididas em 3 classes conforme Stone [31].

### 1.11.1 Condição de contorno de Dirichlet

A condição de contorno de Dirichlet é conhecida como condição prescrita ou do primeiro tipo, no qual o valor da variável dependente é especificado no contorno sendo imposta na EDP; deste modo, os valores que a solução assume ao longo do limite (contorno) são fixos, conforme Cheng [32].

Abaixo segue um exemplo da equação do calor em uma barra de comprimento  $L$  com temperaturas fixas em ambas as extremidades:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{onde } 0 < x < L, t > 0 \\ T(0, t) &= T_1 \quad \text{onde } t > 0 \\ T(L, t) &= T_2 \quad \text{onde } t > 0 \end{aligned} \tag{1.10}$$

Aqui  $T_1$  e  $T_2$  são as temperaturas prescritas em  $x = 0$  e  $x = L$

### 1.11.2 Condição de contorno de Neumann

A condição de contorno de Neumann é conhecida como condição de fluxo prescrito ou do segundo tipo, sendo imposta na EDP, logo a derivada normal da variável dependente é especificada no limite, abordado por Stone [31].

Abaixo segue um exemplo da equação do calor em uma barra de comprimento  $L$  com uma das extremidades isolada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{onde } 0 < x < L, t > 0 \\ \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) &= 0 \quad \text{onde } t > 0 \end{aligned} \tag{1.11}$$

A derivada normal zero em uma das extremidades do exemplo acima, indica que não há fluxo de calor que cruza a fronteira (contorno) do limite do domínio.

### 1.11.3 Condição de contorno de Robin

A condição de contorno de Robin é conhecida como condição mista ou do terceiro tipo, sendo imposta na EDP através de uma combinação linear dos valores de uma função e dos valores de sua derivada normal no limite do domínio. Cabe ressaltar que a condição de Robin é uma combinação ponderada das condições de contorno de Dirichlet e Neumann conforme aborda Akin [33] na modelagem abaixo:

$$\alpha(x)u(x) + \beta(x) \frac{\partial u}{\partial n}(x) = h(x), \quad \text{onde } x \in \Gamma \tag{1.12}$$

$\alpha(x)$ ,  $\beta(x)$  e  $h(x)$  são funções dadas no contorno.

Abaixo segue um exemplo da equação do calor em uma barra de comprimento  $L$  com transferência de calor nas extremidades :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{onde } 0 < x < L, t > 0 \\
-k \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) &= h_1(T(0, t) - T_{amb}), \quad \text{onde } t > 0 \\
+k \frac{\partial T}{\partial x}(L, t) &= h_2(T(L, t) - T_{amb}), \quad \text{onde } t > 0
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Na equação acima  $T_{amb}$  é a temperatura ambiente,  $h_1$  e  $h_2$  são os coeficientes de transferência de calor.

## 1.12 Métodos das diferenças finitas

Euler foi o precursor da utilização do método das diferenças finitas (MDF) para encontrar soluções de equações diferenciais há mais de 200 anos, de acordo com Mahian e Kolsi et al. [23]. As equações governantes do problema físico devem ser convertidas (discretizadas) para a forma algébrica através a série de Taylor com erro de truncamento associado. Isso quer dizer que o MDF procede substituindo as derivadas nas equações diferenciais por aproximações de diferenças finitas, conforme Leveque [19].

Em seguida, o domínio deve ser dividido em nós nas direções coordenadas e um grande sistema algébrico é resolvido no lugar das equações diferenciais por técnicas iterativas. O valor dos parâmetros desejados são obtidos em cada nó onde o método é aplicado em malhas estruturadas, conforme já foi abordado em seção anterior neste trabalho.

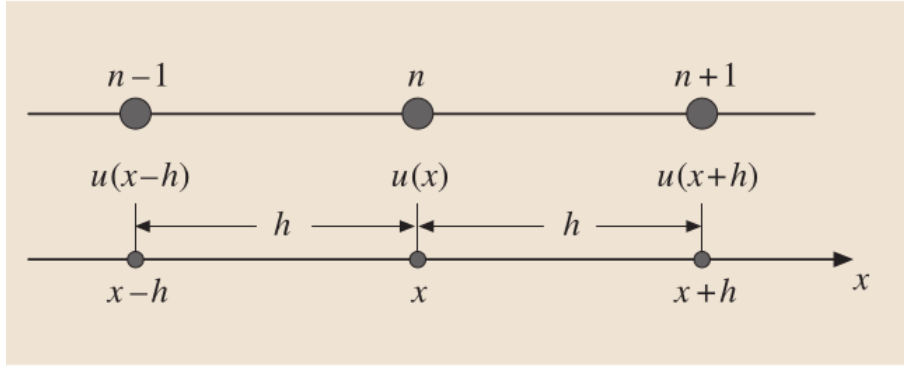
### 1.12.1 Derivações no método das diferenças finitas

Como já foi mencionado anteriormente as derivadas são substituídas pelas chamadas aproximações de diferenças finitas no qual há três maneiras de aproximar a primeira derivada conforme descrito a seguir.

Esquema de diferença atrasada (garante precisão na aproximação da derivada primeira).

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h} \tag{1.14}$$

Esquema de diferença centrada (garante precisão na aproximação da derivada de segunda ordem) exemplificado na figura 1.10.



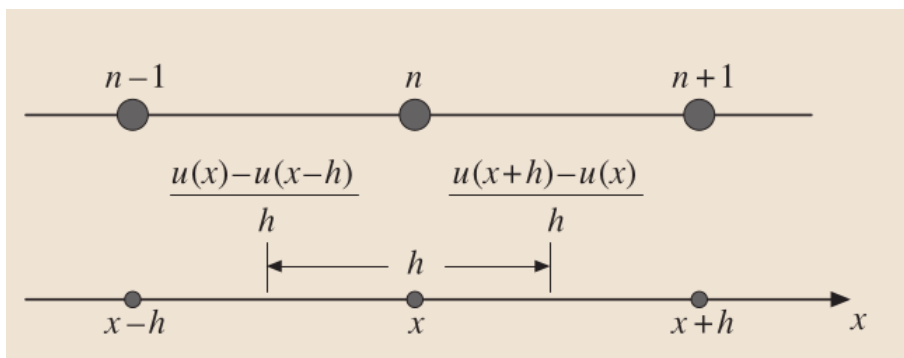
**Figura 1.10:** Aproximação de derivadas de primeira ordem [34].

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} \quad (1.15)$$

Esquema de diferença adiantada (garante precisão para aproximar a derivada primeira).

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad (1.16)$$

Para realizar a aproximação da derivada de segunda ordem aplica-se a relação da diferença atrasada e diferença adiantada na derivada de primeira ordem, considerando-a como ponto de referência para aplicar o conceito de diferença centrada conforme figura 1.11.



**Figura 1.11:** Aproximação de derivadas de segunda ordem [34].

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} \quad (1.17)$$

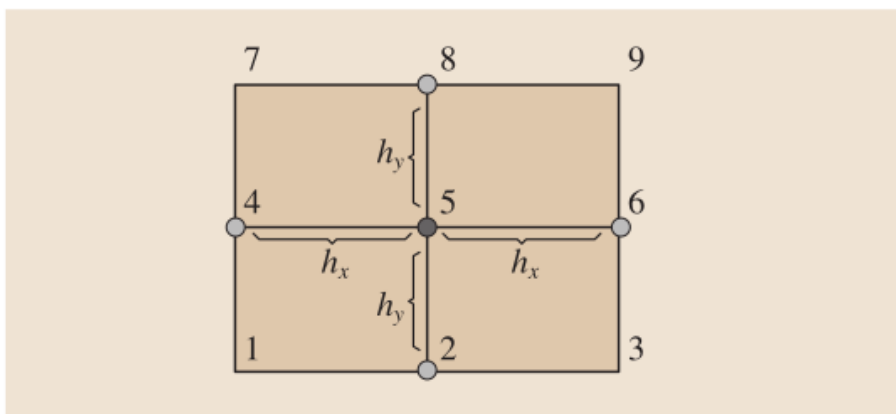
### 1.12.2 Métodos das diferenças finitas aplicados ao caso bidimensional

As aproximações de diferenças finitas para as derivadas de primeira ordem utilizando a figura 1.12 e  $h_x = h_y = h$ , como referência, são:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x}(x, y) &\approx \frac{u(x+h, y) - u(x-h, y)}{2h} \\ \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) &\approx \frac{u(x, y+h) - u(x, y-h)}{2h}\end{aligned}\tag{1.18}$$

As aproximações de diferenças finitas para as derivadas de segunda ordem, utilizando a figura 1.12 como referência e  $h_x = h_y = h$ , são:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) &\approx \frac{u(x+h, y) - 2u(x, y) + u(x-h, y)}{h^2} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) &\approx \frac{u(x, y+h) - 2u(x, y) + u(x, y-h)}{h^2}\end{aligned}\tag{1.19}$$



**Figura 1.12:** Grade bi-dimensional para aplicação do MDF [34].

Quando aplica-se o MDF em problema de valor de contorno (PVC), as EDP terão as suas derivadas substituídas pelas diferenças finitas descritas anteriormente, juntamente com aplicação das condições de contorno, irá gerar um sistema de equações lineares do tipo  $A.U = F$ , onde  $A$  é a matriz pentadiagonal dos coeficientes,

$U$  é o vetor de incógnitas que se deseja encontrar e  $F$  é a matriz do termo de fonte.

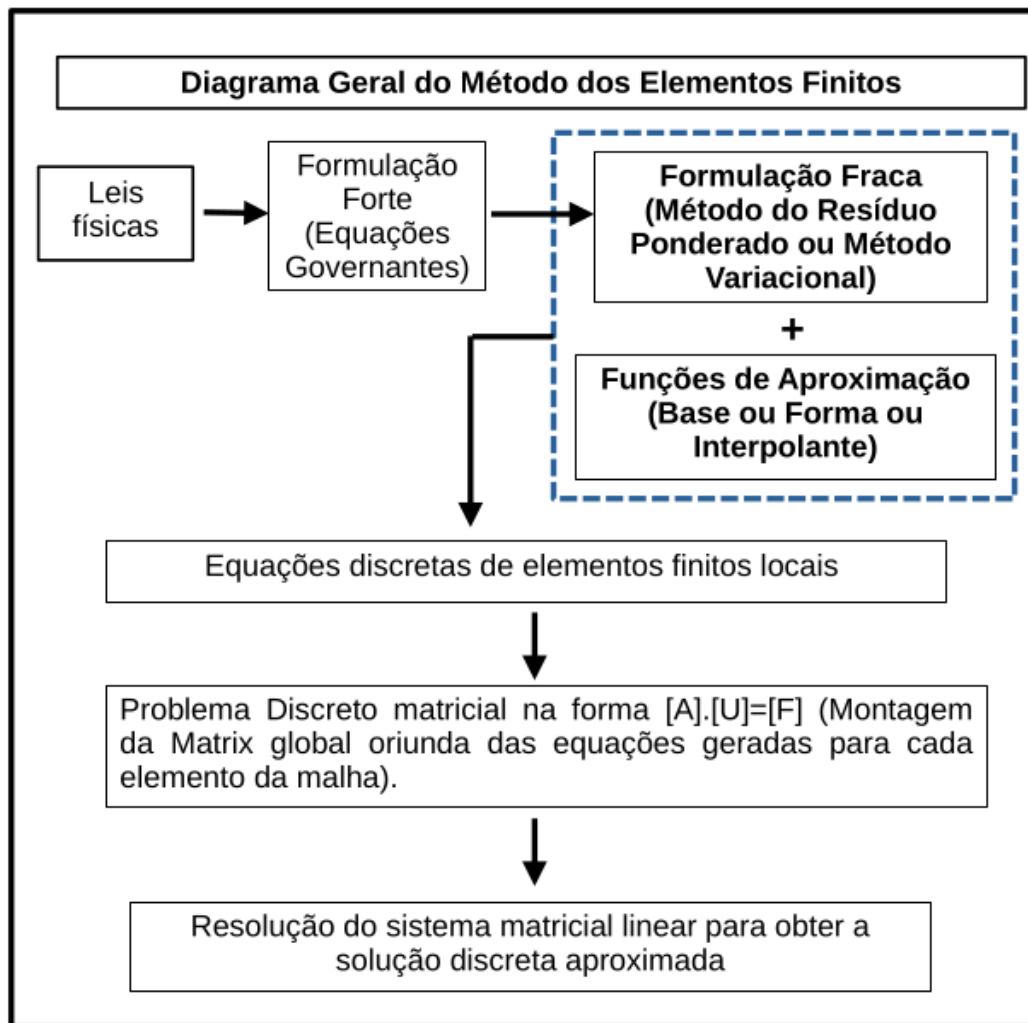
Espera-se que  $A$ ,  $U$  e  $F$  sejam matrizes simétricas, positivo definidas, facilitando a resolução do sistema, porém nem sempre acontece isso e irá depender da natureza do problema e das condições de contorno.

Após montado o sistema linear pentadiagonal, este pode ser resolvido através de diversos métodos da álgebra linear, como por exemplo o método TDMA (ou algoritmo de Thomas).

### **1.13 Método dos elementos finitos**

Atualmente o MEF tem sido um dos mais utilizados na engenharia para simulações em diversos campos do conhecimento. O método tem sido aplicado para analisar o comportamento de sistemas mecânicos complexos, análises de tensão, temperatura, transferência de calor, mecânica dos fluidos, eletromagnetismo, dentre outros.

Geralmente a metodologia é aplicada em domínios com geometrias complexas e diferentes materiais, visando encontrar soluções aproximadas de equações diferenciais parciais (EDP) em problema de valor de contorno (PVC). A fim de elucidar como o processo funciona, segue abaixo na figura 1.13 um esquema básico de construção do método dos elementos finitos (MEF) de forma generalista.



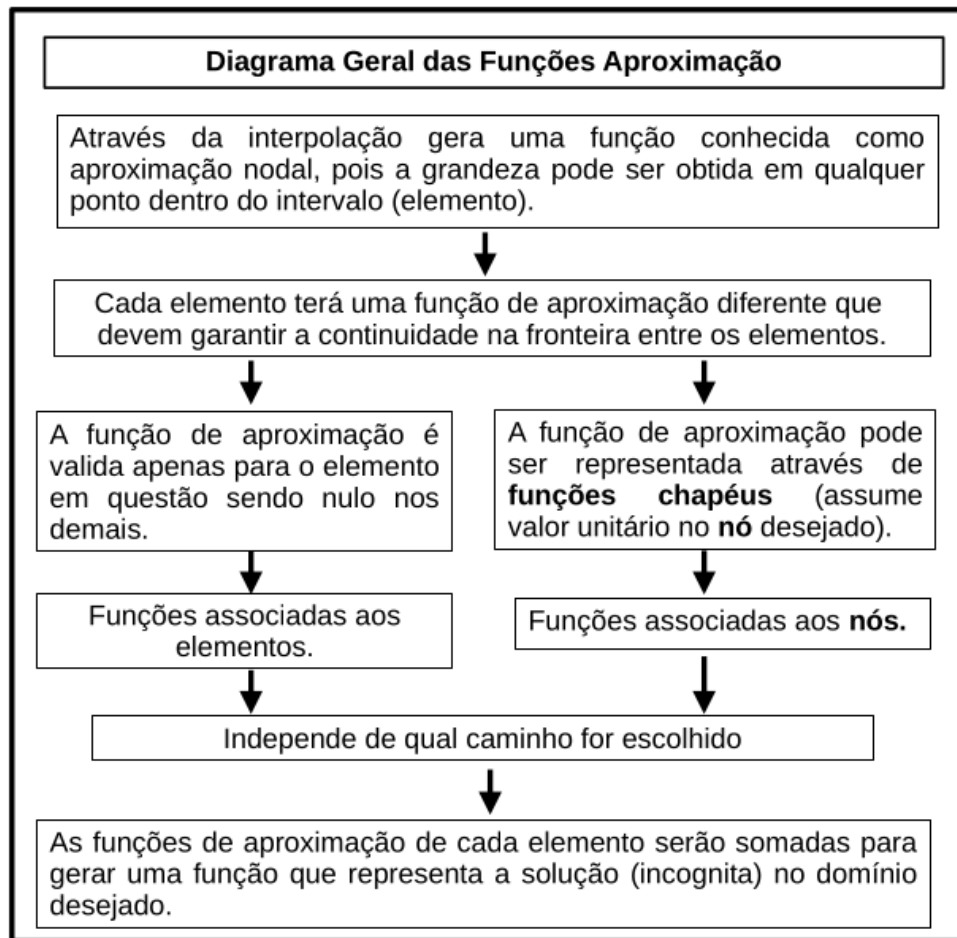
**Figura 1.13:** Diagrama do Método dos Elementos Finitos.

Cabe mencionar que à medida que o número de elementos da malha aumenta as soluções melhoram e tendem no limite para a solução exata.

### 1.13.1 Funções de aproximação

As funções de aproximação ou conhecidas como funções de base, forma ou Interpolante, baseia-se na criação de uma função matemática através de interpolação linear, quadrática, Lagrange, dentre outras, que aproximam o comportamento da solução.

Cada elemento da malha terá uma única função que relaciona a grandeza contínua (incógnita) com a posição (coordenada) do nó na malha. Logo a solução do problema no domínio de interesse constará na soma de todas as funções de aproximação de cada elemento que podem ser construídas conforme diagrama da figura 1.14:



**Figura 1.14:** Diagrama das Funções de Aproximação.

### 1.13.2 Método de Galerkin

Ao se tratar de Galerkin, estamos lidando com uma família de métodos empregados na formulação de elementos finitos (EF), sendo desenvolvida ao longo dos anos conforme aumenta a complexidade dos problemas de engenharia com as seguintes ramificações:

- Galerkin Contínuo (clássico);
- Galerkin (Mínimos Quadrados) Contínuo;
- Galerkin Descontínuo;
- Galerkin Descontínuo hibridizado;
  - Traço Contínuo;
  - Traço Descontínuo.

A principal ideia por trás do método de Galerkin, conforme Ern e Guermond [35], consta na aplicação de um espaço de soluções e um espaço de testes, onde ambos são de dimensões finitas, com a consideração de que a função de teste  $\eta$  seja igual às funções de aproximação.

## 1.14 Método de acoplamento MEF + MDF

Conforme já foi abordado anteriormente, existem diversos métodos numéricos para simular fenômenos físicos modelados matematicamente, através de equações diferenciais parciais EDP para problemas de valor de contorno PVC e problemas de valor inicial PVI que variam no tempo.

Neste contexto novos métodos com ferramentas matemáticas e códigos computacionais elaborados vem sendo desenvolvidos para problemas de natureza cada vez mais complexos. Em paralelo, nasce uma vertente que aproveita as vantagens das metodologias já consolidadas e seguras, reduzindo as suas desvantagens ao utilizar o acoplamento entre elas.

Conforme aborda Santos e Dutra do Carmo et al. em [1], os autores irão utilizar o método das diferenças finitas (MDF) acoplado ao método dos elementos finitos (MEF) em diversos exemplos, provando as vantagens do acoplamento para problemas estacionários com graus de liberdade arbitrários, mantendo a precisão da solução com diminuição do custo computacional e melhoria no desempenho de tempo de CPU comparando-se com o método clássico de elementos finitos (EF).

Cabe ressaltar que o esquema de acoplamento proposto não é iterativo melhorando o tempo de calculo, pois evita loops de iterações na região de acoplamento, através de uma sobreposição adequada em um conceito novo de elemento terminal (permite a sobreposição do elemento terminal de EF e de DF nos subdomínios regulares) desenvolvido por Santos e Dutra do Carmo et al.

Os referidos autores abordam que o método dos elementos finitos tem a desvantagem de ser menos eficiente na montagem da matriz do sistema e termos independentes, devido, as integrações numéricas envolvidas. Entretanto possui a vantagem de operar com diversos tipos de materiais em geometrias de natureza complexa e arbitrária através de uma formulação fraca. O método das diferenças finitas possui alta eficiência computacional na montagem da matriz do sistema e simplicidade de implementação computacional, porém opera somente em malhas

regulares definidas (quadrados ou retângulos), sem variação nas propriedades materiais.

O acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF), permite subdividir o domínio de interesse em diversas partes menores, onde visa ocupar o domínio de trabalho com malhas (grades) regulares o máximo possível para aplicação de DF. O restante do domínio de trabalho onde há descontinuidade das propriedades físicas e geometrias complexas, são ocupadas com malhas (triangulares, retangulares, dentre outras) para aplicação de EF. Para combinar o melhor desempenho entre os dois métodos, diversos trabalhos foram desenvolvidos e tabelados abaixo:

**Tabela 1.1:** Trabalhos referentes ao acoplamento MEF/MDF.

Autores	Revisão bibliográfica
[36, 37]	Caracterizam problemas de acoplamento físico com diferentes tipos de EDP. Os métodos EF/DF são aplicados para resolver diferentes equações EDP independentemente.
[38, 39]	Tratam de exemplos de acoplamentos EF/DF aplicados para resolver problemas governados por um fenômeno EDP .
[38, 40]	Os métodos EF/DF são combinados em problemas estacionários. O Trabalho apresentado por [40] estabelece o acoplamento entre o método das diferenças finitas sem malha e o usual EF.
[41]	Abordam uma extensão para problemas transientes.
[38, 42]	Em [38] foi introduzido um método de decomposição de um domínio EF/DF para avaliar o campo de fluxo de ions em linhas de transmissão de corrente contínua de alta tensão. Conforme [42] foi proposto um algoritmo Neumman-Dirichilet no qual é iterativo sem decomposição entre subdomínios EF e DF.

(Continua na próxima página)

Tabela 1.1 – Trabalhos referente a acoplamento MEF/MDF.

(Continuação da página anterior)

Autores	Revisão bibliográfica
[38, 43]	Os acoplamentos EF/DF são geralmente iterativos aplicando o conceito de decomposição de domínios abordados em [42].
[44]	Abordou a sobreposição entre domínios.

(Fim da Tabela)

O que foi proposto por Santos e Dutra do Carmo et al. difere das mencionadas na tabela 1.1 devido a sua não interatividade no acoplamento com aplicação em problemas gerais de valor de contorno lineares e não lineares, uma vez que sua solução normalmente implica em resolver problemas lineares sucessivos. A metodologia proposta consta nos seguintes passos mencionados abaixo:

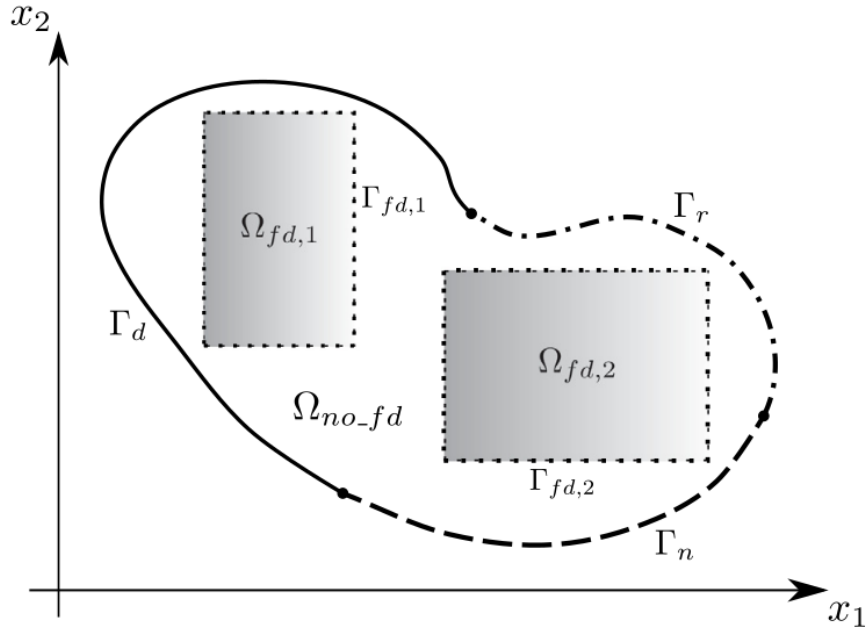
1. Primeiramente será decomposto o domínio do problema em subdomínios de geometria retangular/quadrática (caso 2D) ou cúbica/hexaédrica retangular (caso 3D) para geração de malha e aplicação de DF;
2. No domínio restante, uma malha usual de elementos finitos (EF) é gerado de acordo com as interfaces dos subdomínios.

### 1.14.1 A decomposição do domínio em subdomínios EF/DF

A ideia por trás da metodologia consta de inserir dentro no domínio geométrico de trabalho  $\Omega$ , o máximo possível de subdomínios regulares (malha quadrada ou retangular) com arestas paralelas aos eixos coordenados, conforme exemplo abaixo.

O próximo passo para gerar a malha de elementos finitos, tem as propriedades seguintes:

- (a) Os elementos são bi-linear (caso 2D) ou tri-linear(caso 3D);
- (b) Em todos os subdomínios  $\Omega_{fd,i}$  os elementos são quadrados (caso 2D) ou cubos (caso 3D). Cabe ressaltar que os elementos podem ser retangulares também porém uma geometria simétrica facilita os cálculos;



**Figura 1.15:** Exemplo de domínio composto por dois subdomínios retangulares ( $\Omega_{fd,1}$  e  $\Omega_{fd,2}$ ) com arestas paralelas aos eixos coordenados e ao subdomínio irregular ( $\Omega_{no-fd}$ ). Os contornos de  $\Omega_{fd,1}$  e  $\Omega_{fd,2}$  são dados por  $\Gamma_{fd,1}$  e  $\Gamma_{fd,2}$ , respectivamente. As regiões  $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_N$  e  $\Gamma_R$  compõem o contorno externo [1].

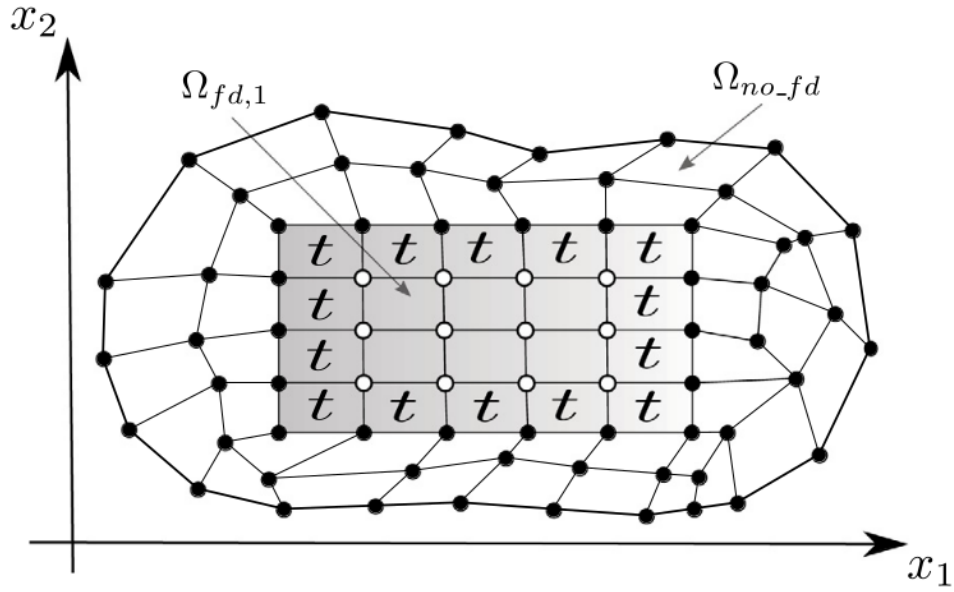
- (c) A malha é conforme (formados por apenas um tipo de polígono regular), sendo assim o método clássico dos EF pode ser implementado.

### 1.14.2 Elementos terminais aplicados ao acoplamento EF/DF

Os elementos terminais são aqueles onde EF e DF sobrepõem-se. Para ilustrar essa ideia, um exemplo de malha é apresentado na figura 1.16. A partir disso, pode-se notar que os nós internos dos elementos terminais são responsáveis pela contribuição da matriz global com coeficientes de DF.

Por outro lado, os nós sobre  $\Gamma_{fd,i}$  contribuem para a matriz global com coeficientes de EF. Neste sentido não existe nenhum ponto dentro do subdomínio  $\Omega_{fd,1}$  com equações de EF associadas. Portanto, equações algébricas lineares dadas pelo método EF/DF podem ser reunidos em um único sistema, no qual se garante o aspecto não-iterativo do esquema de acoplamento presente.

Santos e Dutra do Carmo et.al em [1] concluíram após rodar os experimentos computacionais que o tempo de resolução e montagem das matrizes reduzem na ordem de pelo menos 2 vezes para problemas bidimensionais, sem a perda de precisão



**Figura 1.16:** Um domínio com um subdomínio retangular  $\Omega_{fd,1}$  e o subdomínio irregular  $\Omega_{no\_fd}$ . Os elementos terminais são indicados com a letra  $t$ . Os pontos de  $P_{fd,1}$  e os pontos  $P_{fem}$  são indicados por  $\circ$  e  $\bullet$ , respectivamente [1].

se comparado com o método clássico de elementos finitos, com a vantagem de não utilizar métodos iterativos no acoplamento, evitando o risco de baixa convergência ou até mesmo não convergir em determinados pontos da malha.

# Capítulo 2

## Equacionamento matemático da vareta combustível

O problema térmico em questão é composto de 3 regiões físicas ( $\text{UO}_2 + \text{Gap} + \text{Revestimento de zircaloy}$ ) na qual será aplicada uma equação governante (condução de calor) com descontinuidade das propriedades físicas dos materiais. O domínio da vareta combustível é representado por  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_{gap} \cup \Omega_c$  sendo que as equações foram sintetizadas de Todreas [2] e Philip et.al [45].

Cabe ressaltar que o problema térmico em sua natureza é composto de EDP de segunda ordem não linear, no qual é aplicado uma linearização via série de Taylor (apêndice B) do termo difusivo no software desenvolvido no PEN/COPPE.

### 2.1 Pastilha combustível

Equação da condução de calor de Fourier:

$$-\nabla \cdot [k_f \cdot \nabla T_f] = f \text{ em } \Omega_f(x, y) \quad (2.1)$$

onde:

$\Omega_f$  = Subdomínio que representa a pastilha combustível.

$f$  = Termo de fonte variando com posição e ângulo em  $KW/m^3$ .

$k_f$  = Condutividade térmica média da pastilha para 95 % da densidade teórica em  $KW/m.K$ .

$T_f$  = Temperatura da pastilha combustível em  $K$ .

## 2.2 Gap pressurizado

Conforme já abordado anteriormente, o espaço anular entre o combustível e o revestimento tem uma espessura de ordem muito pequena e com peculiaridades únicas. Para o problema em questão conforme [11], será considerado a condução de calor no gap como fenômeno dominante onde a condutividade térmica do gás será calculada conforme relação abaixo:

$$k_{Gap} = h_{Gap} \cdot \Delta X \quad (2.2)$$

onde:

$h_{Gap}$  = Condutância do gap tabelado em 4.1 sendo extraído de Todreas [2].

$\Delta X$  = espessura do gap em metros.

Baseado na premissa acima, o equacionamento do gap será regido pela condução de calor de Fourier:

$$-\nabla \cdot [k_{gap} \cdot \nabla T_{gap}] = 0 \text{ em } \Omega_{gap}(x, y) \quad (2.3)$$

onde :

$\Omega_{gap}$  = Subdomínio que representa o gap pressurizado.

$k_{gap}$  = Condutividade do gap em  $KW/m.K$

$T_{gap}$  = Temperatura no gap em K.

## 2.3 Revestimento de zircaloy

Equação da condução de calor de Fourier:

$$-\nabla \cdot [k_c \cdot \nabla T_c] = 0 \text{ em } \Omega_c(x, y) \quad (2.4)$$

onde :

$\Omega_c$  = Subdomínio que representa o revestimento de zircaloy.

$T_c$  = Temperatura do revestimento de zircaloy em K.

$k_c$  = Condutividade média do revestimento de zircaloy em  $KW/m.K$ .

### 2.3.1 Condições de contorno de Robin

Para o problema em questão a condição de contorno de Robin que define o problema físico é aplicado para parte externa do revestimento de zircaloy, conforme segue abaixo:

#### 2.3.1.1 Parte externa do revestimento

$$[k_c \cdot \nabla T_c] \mathbf{n}_{\mathbf{c}out} + h_m^{Ref} [T_{cout} - T(\alpha)] = 0 \text{ em } \Gamma_{cout}(x, y) \quad (2.5)$$

onde :

$\Gamma_{cout}$  = Contorno externo do revestimento de zircaloy (lado refrigerante).

$T_{cout}$  = Temperatura do revestimento de zircaloy no raio externo em contato com o fluido refrigerante em °C.

$T(\alpha)$  = Temperatura do fluido refrigerante variando com ângulo ao redor da vareta combustível.

$\mathbf{n}_{\mathbf{c}out}$  = Vetor normal unitário apontando do contorno externo do revestimento para o fluido refrigerante.

$h_m^{Ref} = 34 \text{ KW/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$  - Coeficiente de transferência de calor do refrigerante tabelado em 4.1 sendo extraído de Todreas [2].

# Capítulo 3

## Formulação por diferenças finitas e elementos finitos

A fim de realizar a aplicação do método desenvolvido por Santos e Dutra do Carmo et al. em [1], a vareta combustível será dividida em regiões discriminadas por cores conforme descrito abaixo e visualizado figura A.1, A.2 e A.3 do apêndice.

1. Vermelho: Pastilha de Óxido de Urânio ( $\text{UO}_2$ ) - Aplicação de DF (formulação forte)
2. Verde: Pastilha de Óxido de Urânio ( $\text{UO}_2$ ) - Aplicação de EF (formulação fraca)
3. Amarelo: Gap Pressurizado com Hélio - Aplicação de EF (formulação fraca)
4. Roxo: Revestimento de Zircaloy - Aplicação de EF (formulação fraca)

### 3.1 Diferenças finitas

A modelagem por diferenças finitas será aplicada em uma grade quadrada regular conforme descrito anteriormente. Devido a simetria da grade, o tamanho do elemento quadrado nas coordenadas x e y serão iguais a  $h = h_x = h_y$ .

#### 3.1.1 Modelagem por diferenças finitas da condução de calor na pastilha combustível

Abaixo segue a definição do problema relacionado a diferenças finitas na pastilha combustível:

- A solução aproximada para a temperatura  $T \in C^2(\bar{\Omega})$

- $k_f$  = Condutividade térmica média da pastilha para 95 % da densidade teórica em KW/m.K.

- $\Omega_{fd,i}$  ( $i \in \{1, \dots, N_{fd}\}$ ) e  $\Gamma_{fd,i}$  = representam os subdomínios regulares inseridos em  $\Omega_f$ , juntamente com o seu contorno. Cabe ressaltar que o problema em questão terá apenas 1 subdomínio regular onde será aplicado diferenças finitas (DF)

- $N_{fd} = 1$  (Número de subdomínios quadrado/retangular inseridos em  $\Omega_f$ )

Considerando as definições acima e aplicando a equação da condução de calor onde  $i = (1, \dots, \text{número de nós no eixo } x)$  e  $j = (1, \dots, \text{número de nós no eixo } y)$ , segue formulação do problema abaixo:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot [k_f \nabla T_f(x_i, y_j)] &= f(x_i, y_j) \\ -k_f \cdot \nabla^2 T_f(x_i, y_j) &= f(x_i, y_j) \end{aligned} \tag{3.1}$$

Na relação matemática acima, será levado em considerado os termos abaixo:

- $k_f = k_{f_{ij}}$
- $T_f(x_i, y_j) = T_{f_{ij}}$
- $f(x_i, y_j) = f_{ij}$
- $N_{gl} =$  Número de graus de liberdade (variáveis independentes/incógnitas que satisfazem a EDP). Para o problema em questão a variável que satisfaz e soluciona a equação diferencial bidimensional é a temperatura, logo  $N_{gl} = 1$ .
- Índices relacionados aos aos graus de liberdade :  $(i_g, j_g \in \{1, \dots, N_{gl}\})$
- Índices relacionados aos nós e eixos cartesianos :  $(i, j \in \{1, \dots, m_{f_{DF}} - 1\})$ .

Onde  $m_{f_{DF}} =$  números de nós/pontos que pertencem ao subdomínio de diferenças finitas. Cabe ressaltar que a consideração sobre  $m_{f_{DF}} - 1$ , ressalta o fato de que o ultimo ponto de diferenças finitas está na interface entre o acoplamento EF/DF pertencendo a formulação de elementos finitos e não pode ser considerada na diferença finita.

Voltando a equação 3.1 considerando os novos índices, tem-se:

$$\begin{aligned}
-k_f(x_i, y_j) \cdot \nabla^2 T_f(x_i, y_j) &= f(x_i, y_j) \\
-k_{f_{ij}} \cdot \nabla^2 T_{f_{ij}} &= f_{ij} \\
-k_{f_{ij}} \left[ \frac{\partial^2 T_{f_{ij}}}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 T_{f_{ij}}}{\partial y_j^2} \right] &= f_{ij}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

As derivadas parciais deverão ser substituídas por diferenças finitas no eixo x e y conforme segue descrito:

$$\frac{\partial^2 T_{f_{ij}}}{\partial x_i^2} = \frac{T_{f_{(i+1,j)}} - 2.T_{f_{i,j}} + T_{f_{(i-1,j)}}}{h^2} \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial^2 T_{f_{ij}}}{\partial y_j^2} = \frac{T_{f_{(i,j+1)}} - 2.T_{f_{i,j}} + T_{f_{(i,j-1)}}}{h^2} \tag{3.4}$$

Por fim durante todo o desenvolvimento acima, foi suprimido das equações o termo dos graus de liberdade para evitar a poluição do equacionamento. Abaixo será montado o equacionamento comprimido do problema da pastilha combustível onde será aplicado o método das diferenças finitas (MDF).

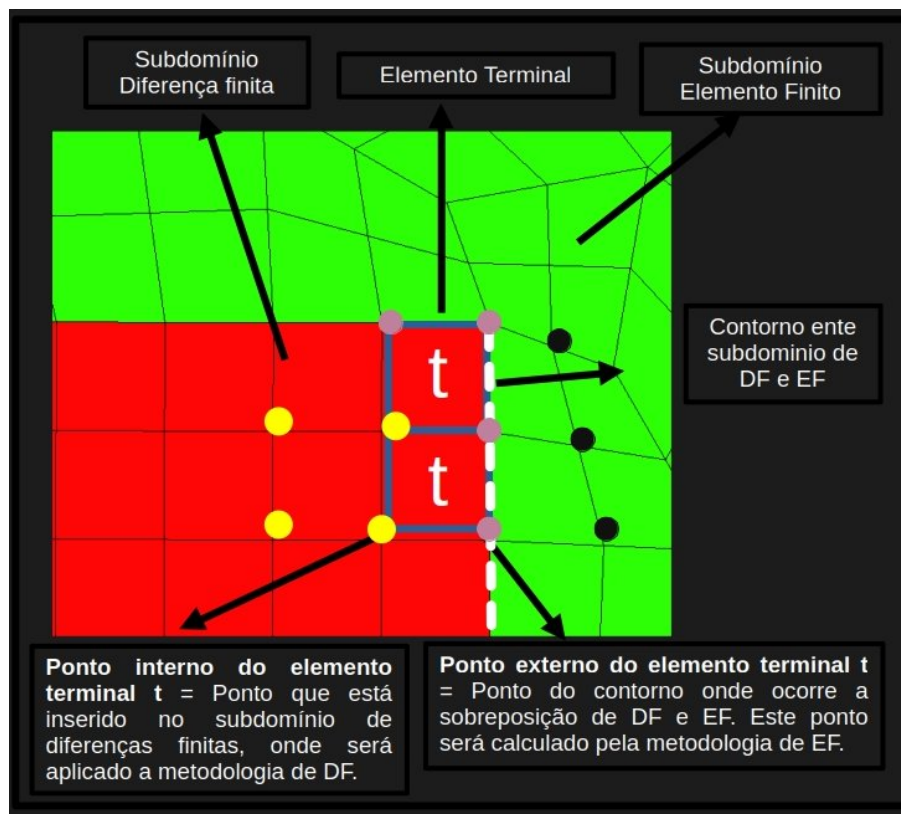
$$- \sum_{\substack{i=1 \\ j=1}}^{(m_{f_{DF}}-1)} \left( \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} k_{f_{i_g i_j}} \left[ \frac{\partial^2 T_{f_{i_g i_j}}}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 T_{f_{i_g i_j}}}{\partial y_j^2} \right] \right) = \sum_{\substack{i=1 \\ j=1}}^{(m_{f_{DF}}-1)} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} f_{i_g i_j} \tag{3.5}$$

Cabe ressaltar que não há condição de contorno neste subdomínio em específico, mas uma interface entre métodos (EF/DF).

## 3.2 Modelagem pelo método de acoplado de elementos finitos e diferenças finitas

A metodologia em questão não envolve um equacionamento em específico e sim uma consideração de qual tipo de cálculo (DF ou EF) será aplicado nos subdomínios e na interface entre estes. Abaixo segue um diagrama ilustrativo sobre o conceito de

elemento terminal e aplicação do método.



**Figura 3.1:** Diagrama do acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF).

Vale frisar que os subdomínios de elementos finitos e diferenças finitas não podem ser de materiais diferentes.

A definição do problema relacionado ao acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF) na pastilha combustível segue descrito abaixo:

- A solução aproximada para a temperatura no subdomínio de diferenças finitas  $T \in C^2(\bar{\Omega})$  e para elementos finitos  $T \in H^1(\Omega)$ ;
- A decomposição do domínio aplicado ao acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF) segue exatamente descrito em 1.14.1 e 1.14.2.

### 3.3 Modelagem por elementos finitos

A modelagem por elementos finitos será aplicada no restante da pastilha combustível, gap e revestimento de zircaloy.

Em termos gerais tem-se um processo de condução de calor com descontinuidade de propriedades materiais (cada região tem uma propriedade física diferente) com apenas uma condição de contorno (parede externa do revestimento de zircaloy que esta em contato com o refrigerante). Abaixo segue o desenvolvimento matemático de todas as regiões.

### 3.3.1 Modelagem por elementos finitos da pastilha combustível

Considere o problema de valor de contorno (PVC) governado pela equação diferencial abaixo:

- $-\nabla \cdot [k_f \nabla T_f] = f$  em  $\Omega_f(x,y) \rightarrow$  a solução está em  $C^2(\bar{\Omega})$ ;
- $T_f =$  Incógnita do problema que se deseja encontrar;
- $k_f =$  Condutividade térmica média da pastilha para 95 % da densidade teórica em KW/m.K;
- $T_f = g$ , em  $\Gamma_D \rightarrow$  condição de Dirichlet ou essencial;
- Função de teste  $\eta \in H^1(\Omega)$  é global sendo aplicada a todo domínio  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_{gap} \cup \Omega_c$
- A solução aproximada  $T \in H^1(\Omega)$
- O termo de fonte  $f \in L^2(\Omega)$
- $\mathbf{n}_f =$  Vetor normal unitário apontando para o gap pressurizado;
- $\mathbf{n}_{gap_{in}} =$  Vetor normal unitário na parte interna do gap pressurizado apontando para a pastilha combustível;
- $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma_f(x,y)$
- $meas(\Gamma_D \cap \Gamma_N) = meas(\Gamma_D \cap \Gamma_R) = meas(\Gamma_N \cap \Gamma_R) = 0$ ;
- $k_f \nabla T_f \in H_{div}(\Omega)$ .

Espaço das variações admissíveis ou espaço das funções de teste:

$$V_{\Gamma_D} = \{\eta \in H^1(\Omega); \eta = 0 \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.6)$$

Espaço do conjunto solução:

$$S_{\Gamma_D} = \{T_f \in H^1(\Omega); T_f = g \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.7)$$

Multiplicando a equação abaixo pela função de teste  $\eta$  e integrando em  $\Omega_f$ .

$$\begin{aligned} -k_f \cdot \nabla^2 T_f &= f \\ - \int_{\Omega_f} [k_f \cdot \nabla^2 T_f] \cdot \eta \, d\Omega &= \int_{\Omega_f} f \cdot \eta \, d\Omega \end{aligned} \quad (3.8)$$

Aplicando integração por partes e o teorema do divergente, chega-se a formulação fraca com o relaxamento da equação diferencial:

$$\int_{\Omega_f} k_f \cdot \nabla T_f \cdot \nabla \eta \, d\Omega - \int_{\Gamma_f} [k_f \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_f] \cdot \eta \, d\Gamma = \int_{\Omega_f} f \cdot \eta \, d\Omega \quad (3.9)$$

Para a garantia da continuidade do fluxo e temperatura no contorno entre a pastilha combustível ( $\Gamma_f$ ) e a parte interna do gap pressurizado ( $\Gamma_{gap_{in}}$ ), as condições abaixo devem ser atendidas para que a condução de calor ocorra:

- $T_f = T_{gap}$  ;
- $k_f \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_f = k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gap_{in}} \rightarrow$  Os termos de fluxo irão se cancelar no equacionamento geral quando considerado o gap.

Aplicando a notação abaixo de produto interno para simplificar as integrais conforme [45], além de algumas considerações, segue:

- $\langle u, \eta \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} u \cdot \eta \, d\Omega$
- $\langle u, \eta \rangle_{\Gamma} = \int_{\Gamma} u \cdot \eta \, d\Gamma$
- Índices relacionado aos nós e eixos cartesianos :  $(i, j \in \{m_{f_{DFu}}, \dots, m_{f_{EF}}\})$ .

$m_{f_{EF}}$  = números de nós/pontos que pertence ao subdomínio de elementos finitos da pastilha combustível.

$m_{f_{DFu}}$  = ultimo nó/ponto referente ao subdomínio de diferenças finitas da pastilha combustível. Conforme mencionado anteriormente, ultimo ponto de  $m_{f_{DF}}$ , será o primeiro ponto pertencente à formulação de elementos finitos.

O equacionamento da seção pertencente pastilha combustível considerando graus de liberdade arbitrário para o método dos elementos finitos (MEF), segue abaixo:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{i=m_{f_{DFu_i}} \\ j=m_{f_{DFu_j}}}}^{m_{f_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{f_{ij}}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{f_{ij}}^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_f} \right] - \\
& \sum_{\substack{i=m_{f_{DFu_i}} \\ j=m_{f_{DFu_j}}}}^{m_{f_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{f_{ij}}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{f_{ij}}^{i_g i_j}, \mathbf{n}_f \rangle_{\Gamma_f} \right] = \\
& \sum_{\substack{i=m_{f_{DFu_i}} \\ j=m_{f_{DFu_j}}}}^{m_{f_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle f_{ij}^{i_g i_j}, \eta \rangle_{\Omega_f} \quad (3.10)
\end{aligned}$$

### 3.3.2 Modelagem por elementos finitos do gap pressurizado

Considere o problema de valor de contorno (PVC) governado pela equação diferencial abaixo:

- $-\nabla \cdot [k_{gap} \nabla T_{gap}] = 0$  em  $\Omega_{gap}(x,y) \rightarrow$  a solução está em  $C^2(\bar{\Omega})$ ;
- Condutividade térmica média do gap calculada através da relação  $k_{Gap} = h_{Gap} \cdot \Delta X$  em KW/m.K;
- $T_{gap}$  = Incógnita do problema que se deseja encontrar;
- $T_{gap} = g$ , em  $\Gamma_D \rightarrow$  condição de Dirichlet ou essencial;
- Função de teste  $\eta \in H^1(\Omega)$  é global sendo aplicada a todo domínio  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_{gap} \cup \Omega_c$

- A solução aproximada  $T \in H^1(\Omega)$
- $\mathbf{n}_f$  = Vetor normal unitário apontando para o gap pressurizado;
- $\mathbf{n}_{gap_{in}}$  = Vetor normal unitário na parte interna do gap pressurizado apontando para a pastilha combustível;
- $\mathbf{n}_{gap_{out}}$  = Vetor normal unitário na parte externa do gap pressurizado apontando para o revestimento de zircaloy;
- $\mathbf{n}_{cin}$  = Vetor normal unitário na parte interna do revestimento de zircaloy apontando para o gap pressurizado;
- $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma_{gap_{in}}(x, y)$
- $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma_{gap_{out}}(x, y)$
- $meas(\Gamma_D \cap \Gamma_N) = meas(\Gamma_D \cap \Gamma_R) = meas(\Gamma_N \cap \Gamma_R) = 0$ ;
- $k_{gap} \nabla T_{gap} \in H_{div}(\Omega)$ .

Espaço das variações admissíveis ou espaço das funções de teste:

$$V_{\Gamma_D} = \{\eta \in H^1(\Omega); \eta = 0 \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.11)$$

Espaço do conjunto solução:

$$S_{\Gamma_D} = \{T_{gap} \in H^1(\Omega); T_{gap} = g \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.12)$$

Multiplicando a equação abaixo pela função de teste  $\eta$  e integrando em  $\Omega_{gap}$ .

$$\begin{aligned} -k_{He} \cdot \nabla^2 T_{gap} &= 0 \\ - \int_{\Omega_{gap}} [k_{gap} \cdot \nabla^2 T_{gap}] \cdot \eta \, d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Aplicando integração por partes e o teorema do divergente, chega-se a formulação fraca com o relaxamento da equação diferencial:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_{gap}} k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \nabla \eta \, d\Omega - \\
& \int_{\Gamma_{gap_{in}}} [k_{gap} \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{gap_{in}}] \cdot \eta \, d\Gamma - \\
& \int_{\Gamma_{gap_{out}}} [k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gap_{out}}] \cdot \eta \, d\Gamma = 0 \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Para a garantia da continuidade do fluxo e temperatura no contorno entre a pastilha combustível ( $\Gamma_f$ ) e a parte interna do gap pressurizado ( $\Gamma_{gap_{in}}$ ); e no contorno entre parte externa do gap pressurizado ( $\Gamma_{gap_{out}}$ ) e a parte interna do revestimento de zircaloy ( $\Gamma_{cin}$ ), as condições abaixo devem ser atendidas:

- $T_{gap} = T_f$  ;
- $k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gap_{in}} = k_f \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_f \rightarrow$  Os termos de fluxo na parte interna do gap pressurizado e do combustível irão se cancelar no equacionamento geral.
- $T_{gap} = T_{cin}$  ;
- $k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gap_{in}} = k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cin} \rightarrow$  Os termos de fluxo na parte externa do gap pressurizado e na parte interna do revestimento de zircaloy irão se cancelar no equacionamento geral.

Aplicando a notação abaixo de produto interno para simplificar as integrais conforme [45], além de algumas considerações, segue:

- $\langle u, \eta \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} u \cdot \eta \, d\Omega$
- $\langle u, \eta \rangle_{\Gamma} = \int_{\Gamma} u \cdot \eta \, d\Gamma$
- Índices relacionados aos nós e eixos cartesianos :  $(i, j \in \{m_{f_{EFu}}, \dots, m_{gap_{EF}}\})$ .  
 $m_{gap_{EF}}$  = números de nós/pontos que pertence ao subdomínio de elementos finitos do gap pressurizado.  
 $m_{f_{EFu}}$  = ultimo nó/ponto da interface que separa os domínios físicos da pastilha e do gap.

O equacionamento da seção pertencente gap pressurizado considerando graus de liberdade arbitrário para o método dos elementos finitos (MEF), segue abaixo:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{i=m_{f_{EF}u_i} \\ j=m_{f_{EF}u_j}}}^{m_{gap_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{gap}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{gap}^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_{gap}} \right] - \\
& \sum_{\substack{i=m_{f_{EF}u_i} \\ j=m_{f_{EF}u_j}}}^{m_{gap_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{gap}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{gap}^{i_g i_j}, \mathbf{n}_{gapin} \rangle_{\Gamma_{gapin}} \right] - \\
& \sum_{\substack{i=m_{f_{EF}u_i} \\ j=m_{f_{EF}u_j}}}^{m_{gap_{EF}}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{gap}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{gap}^{i_g i_j}, \mathbf{n}_{gapout} \rangle_{\Gamma_{gapout}} \right] = 0 \quad (3.15)
\end{aligned}$$

### 3.3.3 Modelagem por elementos finitos do revestimento de zircaloy

Considere o problema de valor de contorno (PVC) governado pela equação diferencial abaixo:

- $-\nabla \cdot [k_c \cdot \nabla T_c] = 0$  em  $\Omega_c(x,y) \rightarrow$  a solução está em  $C^2(\overline{\Omega})$ ;
- $k_c =$  Condutividade média do revestimento de zircaloy em  $KW/m.K$ ;
- $T_c =$  Incógnita do problema que se deseja encontrar;
- $T_c = g$ , em  $\Gamma_D \rightarrow$  condição de Dirichlet ou essencial;
- $[k_c \cdot \nabla T_c] \mathbf{n}_{cout} + h_m^{Ref} [T_{cout} - T(\alpha)] = 0$  em  $\Gamma_{cout}(x,y) \rightarrow$  Condição de Robin ou natural na parte externa do revestimento de zircaloy;
- $\mathbf{n}_{cout} =$  Vetor normal unitário apontando do contorno externo do revestimento de zircaloy para o fluido refrigerante;
- $T_{cout} =$  Temperatura do revestimento de zircaloy no raio externo em contato com o fluido refrigerante em  $^{\circ}C$ ;

- $\mathbf{n}_{cin}$  = Vetor normal unitário na parte interna do revestimento de zircaloy apontando para o gap pressurizado;
- $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma_{cin}(x, y)$
- $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma_{cout}(x, y)$
- $\text{meas}(\Gamma_D \cap \Gamma_N) = \text{meas}(\Gamma_D \cap \Gamma_R) = \text{meas}(\Gamma_N \cap \Gamma_R) = 0$ ;
- $k_c \nabla T_c \in H_{div}(\Omega)$
- Função de teste  $\eta \in H^1(\Omega)$  é global sendo aplicada a todo domínio  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_{gap} \cup \Omega_c$
- A solução aproximada  $T_c \in H^1(\Omega)$

Espaço das variações admissíveis ou espaço das funções de teste:

$$V_{\Gamma_D} = \{\eta \in H^1(\Omega); \eta = 0 \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.16)$$

Espaço do conjunto solução:

$$S_{\Gamma_D} = \{T_c \in H^1(\Omega); T_c = g \text{ em } \Gamma_D\} \quad (3.17)$$

O problema não possui condição de contorno de Dirichlet e Neumann. Multiplicando a equação abaixo pela função de teste  $\eta$  e integrando em  $\Omega_c$ .

$$\begin{aligned} -\nabla k_c \cdot \nabla^2 T_c &= 0 \\ -\int_{\Omega_c} [\nabla k_c \cdot \nabla^2 T_c] \cdot \eta \, d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Aplicando integração por partes e o teorema do divergente, chega-se a formulação fraca conforme segue abaixo:

$$\int_{\Omega_c} k_c \cdot \nabla T_c \cdot \nabla \eta \, d\Omega - \underbrace{\int_{\Gamma_{cin}} [k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cin}] \cdot \eta \, d\Gamma}_{\text{Parte interna revestimento}} - \underbrace{\int_{\Gamma_{cout}} [k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cout}] \cdot \eta \, d\Gamma}_{\text{Parte externa revestimento}} = 0 \quad (3.19)$$

Aplicando a condição de contorno de Robin na parte externa da parede do revestimento de zircaloy que está em contato com o fluido refrigerante:

$$\int_{\Omega_c} k_c \cdot \nabla T_c \cdot \nabla \eta \, d\Omega - \underbrace{\int_{\Gamma_{cin}} [k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cin}] \cdot \eta \, d\Gamma}_{\text{Parte interna revestimento}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{cout}} h_m^{Ref} [T_{cout} - T(\alpha)] \cdot \eta \, d\Gamma}_{\text{Parte externa revestimento}} = 0 \quad (3.20)$$

Para a garantia da continuidade do fluxo e temperatura no contorno entre a parte interna do revestimento de zircaloy ( $\Gamma_{cin}$ ) e a parte externa do gap pressurizado ( $\Gamma_{gapout}$ ); e no contorno entre parte externa revestimento de zircaloy ( $\Gamma_{cout}$ ) e o fluido refrigerante, as condições abaixo devem ser atendidas:

- $T_{cin} = T_{gap}$  ;
- $k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cin} = k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gapin} \rightarrow$  O termo de fluxo na parte interna do revestimento de zircaloy e na parte externa do gap pressurizado irão se cancelar no equacionamento geral;
- $k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cout} = -h_m^{Ref} [T_{cout} - T(\alpha)] \rightarrow$  O termo de fluxo na parte externa do revestimento de zircaloy será substituído pelo termo convectivo do fluido refrigerante conforme já foi demonstrado acima.

Aplicando a notação abaixo de produto interno para simplificar as integrais conforme [45], além de algumas considerações, segue:

- $\langle u, \eta \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} u \cdot \eta \, d\Omega$
- $\langle u, \eta \rangle_{\Gamma} = \int_{\Gamma} u \cdot \eta \, d\Gamma$
- Índices relacionados aos nós e eixos cartesianos :  $(i, j \in \{m_{gapEFu}, \dots, m_{cEF}\})$ .  
 $m_{cEF}$  = números de nós/pontos que pertence ao subdomínio de elementos finitos no revestimento.  
 $m_{gapEFu}$  = ultimo nó/ponto referente ao subdomínio do gap pressurizado.

O equacionamento para o problema da seção pertencente ao zircaloy considerando graus de liberdade arbitrário para o método dos elementos finitos (MEF), segue abaixo:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{i=m_{gapEF} u_i \\ j=m_{gapEF} u_j}}^{m_{cEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle k_c^{i_g i_j} \cdot \nabla T_c^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_c} - \\
& \sum_{\substack{i=m_{gapEF} u_i \\ j=m_{gapEF} u_j}}^{m_{cEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_c^{i_g i_j} \cdot \nabla T_c^{i_g i_j}, \mathbf{n}_{cin} \rangle_{\Gamma_{cin}} \right] + \\
& \sum_{\substack{i=m_{gapEF} u_i \\ j=m_{gapEF} u_j}}^{m_{cEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle h_m^{Ref} (T_{cout}^{i_g i_j} - T(\alpha)_{ij}^{i_g i_j}), \eta \rangle_{\Gamma_{cout}} = 0 \quad (3.21)
\end{aligned}$$

### 3.4 Equação geral para o domínio de elementos finitos

Por fim será realizada a união das equações demonstradas acima para os domínios onde foram aplicados a metodologia de elementos finitos. Os termos de fluxo se anularão nos contornos garantindo continuidade até o fluido refrigerante. Segue abaixo a formulação geral para elementos finitos do domínio  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_{gap} \cup \Omega_c$ :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_f} k_f \cdot \nabla T_f \cdot \nabla \eta \, d\Omega + \int_{\Omega_{gap}} k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \nabla \eta \, d\Omega + \int_{\Omega_c} k_c \cdot \nabla T_c \cdot \nabla \eta \, d\Omega - \\
& \int_{\Gamma_f} [k_f \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_f] \cdot \eta \, d\Gamma \overset{0}{=} - \int_{\Gamma_{gap\,in}} [k_{gap} \cdot \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{gap\,in}] \cdot \eta \, d\Gamma - \\
& \int_{\Gamma_{gap\,out}} [k_{gap} \cdot \nabla T_{gap} \cdot \mathbf{n}_{gap\,out}] \cdot \eta \, d\Gamma - \int_{\Gamma_{cin}} [k_c \cdot \nabla T_c \cdot \mathbf{n}_{cin}] \cdot \eta \, d\Gamma + \\
& \underbrace{\int_{\Gamma_{cout}} h_m^{Ref} [T_{cout} - T(\alpha)] \cdot \eta \, d\Gamma}_{\text{Parte externa revestimento}} - \int_{\Omega_f} f \cdot \eta \, d\Omega = 0 \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Após as simplificações, segue abaixo o equacionamento completo aplicando a

notação de produto interno com graus de liberdade arbitrário retirando os termos de fluxo que se anularam nos contornos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{i=m_{fDF} u_i \\ j=m_{fDF} u_j}}^{m_{fEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{f_{ij}}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{f_{ij}}^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_f} \right] + \\
& \sum_{\substack{i=m_{fEF} u_i \\ j=m_{fEF} u_j}}^{m_{gapEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \left[ \langle k_{gap_{ij}}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{gap_{ij}}^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_{gap}} \right] + \sum_{\substack{i=m_{gapEF} u_i \\ j=m_{gapEF} u_j}}^{m_{cEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle k_{c_{ij}}^{i_g i_j} \cdot \nabla T_{c_{ij}}^{i_g i_j}, \nabla \eta \rangle_{\Omega_c} + \\
& \sum_{\substack{i=m_{gapEF} u_i \\ j=m_{gapEF} u_j}}^{m_{cEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle h_m^{Ref} (T_{cout}^{i_g i_j} - T(\alpha)_{ij}^{i_g i_j}), \eta \rangle_{\Gamma_{cout}} - \sum_{\substack{i=m_{fDF} u_i \\ j=m_{fDF} u_j}}^{m_{fEF}} \sum_{\substack{i_g=1 \\ i_j=1}}^{N_{gl}} \langle f_{ij}^{i_g i_j}, \eta \rangle_{\Omega_f} = 0
\end{aligned} \tag{3.23}$$

onde:

$T_{cout}$  = Temperatura do revestimento de zircaloy no raio externo em contato com o fluido refrigerante em °C;

# Capítulo 4

## Experimento numérico

Este trabalho visa desenvolver uma análise da condução térmica bidimensional linear que ocorre em uma vareta combustível, utilizando uma metodologia de simulação inovadora elaborado por Santos e Dutra do Carmo et al. em [1].

O exemplo que será utilizado para estudo do problema térmico focado na aplicação do método de acoplamento EF/DF, será extraído de Todreas [2, p.971 - 975] e consta dos dados operacionais do reator Seabrook Station PWR que seguem descritos abaixo:

**Tabela 4.1:** Seabrook Station PWR Reactor.

Parâmetros operacionais	Valores	Unidades
Potência térmica do reator ( $\dot{Q}$ )	3.411	MWth
Limite de queima médio (Burn-up)	33.000	MWd/tU
Porcentagem da energia depositada nas barras UO <sub>2</sub>	97,4	%
Porcentagem da densidade teórica da pastilha UO <sub>2</sub>	95	%
Altura aquecida do elemento combustível	3,658	m
Comprimento da Pastilha combustível ( $C_{fo}$ )	9,8	mm
Diâmetro da Pastilha Combustível ( $D_{fo}$ )	8,192	mm
Espessura do Gap (frio)	0,0826	mm
Espessura do Revestimento de Zircaloy 4	0,572	mm
Diâmetro da vareta combustível completa ( $D_{co}$ )	9,5	mm
Número de elementos combustíveis	193	Un
Número de varetas por elemento combustível	264	Un

(Continua na próxima página)

Tabela 4.1 – Seabrook Station PWR Reactor.

(Continuação da página anterior)

Parâmetros operacionais	Valores	Unidades
Temperatura de entrada no núcleo ( $T_{in}$ )	293,1	°C
Temperatura de saída do núcleo ( $T_{out}$ )	326,8	°C
$\Delta T_{\text{Núcleo}}$ (entrada - saída) vertical	33,7	°C
Condutância do Gap ( $h_{Gap}$ )	5.7	KW/m <sup>2</sup> °C
Condutividade térmica pastilha combustível ( $k_f$ )	2.163	W/mK
Condutividade térmica revestimento zircaloy 4 ( $k_c$ )	13.85	W/mK
Coef de transferência de calor do refrigerante ( $h_m^{Ref}$ )	34	KW/m <sup>2</sup> °C

(Fim da Tabela)

## 4.1 Metodologia do experimento

Para uma visão global da simulação foram realizados 24 experimentos numéricos que seguem descritos na tabela abaixo. Cabe ressaltar que os ângulos foram propostos para simular o comportamento do fluxo neutrônico e burnup desiguais que naturalmente ocorrem no reator, influenciando no termo de fonte que será calculado posteriormente.

Tabela 4.2: Experimentos numéricos realizados

Ângulo $\theta$	Refino de Malha	Método	Total de Experimentos
0°	Grossoiro Intermediário Avançado	MEF MEF+MDF	6
30°	Grossoiro Intermediário Avançado	MEF MEF+MDF	6
45°	Grossoiro Intermediário Avançado	MEF MEF+MDF	6
60°	Grossoiro Intermediário Avançado	MEF MEF+MDF	6

Como metodologia aplicada nos experimentos acima, serão utilizados os seguintes passo na sequência abaixo:

1º Baseado nos parâmetros operacionais do reator PWR Seabrook Station, serão utilizados os valores geométricos da vareta combustível para gerar um modelo computacional bidimensional no software Gmsh [3] (gerador de malha de código aberto com um mecanismo CAD e pós-processador integrados);

2º Após realizar a programação no Gmsh gerando a geometria e malha, serão criados três refinamentos diferentes conforme descrito abaixo e exemplificado na figura A.1, A.2 e A.3 do apêndice:

- Grosseira:

Número de elementos	Número de pontos
12800	12951

- Intermediária:

Número de elementos	Número de pontos
25216	25395

- Avançada:

Número de elementos	Número de pontos
44276	44501

- Tamanho da grade regular quadrada onde será aplicado DF:

Refino da malha	Tamanho da Grade h
Grosso	6.826E-05
Intermediário	4.512E-05
Avançado	3.370E-05

3º Para cada malha gerada, o software Gmsh irá criar um arquivo contendo os pontos (coordenadas), elementos e conectividades. Cabe ressaltar que os arquivos gerados pelo Gmsh devem ser tratados para criar um novo arquivo gabarito específico, que irá alimentar o software de simulação computacional desenvolvido pelo PEN/COPPE;

- 4º Após concluir as etapas anteriores, serão realizados 3 simulações (uma para cada tipo de malha), aplicando o método de acoplamento entre elementos finitos (EF) e diferenças finitas (DF);
- 5º Posteriormente serão realizadas mais 3 simulações considerando apenas o método de elementos finitos clássico (Galerkin);
- 6º Os procedimentos acima serão repetidos para os ângulos fixos propostos na tabela 4.2.
- 7º Por fim serão realizados os cálculos dos erros, tempo de processamento de CPU e precisão/acurácia, visando comparar os métodos de acoplamento EF/DF e EF.

## 4.2 Considerações impostas

Para a realização do experimento, visando facilitar o processo de simulação, foram impostas algumas considerações/simplificações permitindo realizar uma análise linear do problema térmico. O fato mencionado permite focar no método computacional proposto visando uma análise conservadora focada na segurança; abaixo segue as considerações:

- O problema baseia-se na condução de calor linear bidimensional em regime estacionário (não varia no tempo) em uma vareta combustível em corte na seção transversal;
- Na vareta combustível cada pastilha empilhada possui uma geometria abaulada no centro e o contato na vertical entre elas será mínimo, sendo assim não haverá condução de calor na direção longitudinal, facilitando os cálculos;
- Será considerado um corte na seção transversal na metade do comprimento da vareta combustível, onde ocorre a máxima geração de calor e temperatura. Cabe ressaltar que esta consideração visa facilidade de cálculos, pois na realidade a máxima temperatura e geração de calor ocorrem em uma posição  $Z_{max}$  um pouco acima da metade do comprimento da vareta combustível;
- A pastilha combustível não rachará e não entrará em contato com o revestimento de zircaloy;

- No gap pressurizado será considerado apenas o gás hélio, onde os gases provenientes da fissão ficarão retidos nas porosidades da matriz cerâmica sinterizada da pastilha combustível;
- O revestimento de zircaloy não sofrerá variações dimensionais, distorções estruturais e processos de corrosão devido ao calor e radiação;
- Com relação ao termo de fonte, será proposta uma relação matemática hipotética que se aproxima da realidade para medir a vantagem da utilização do método de acoplamento EF/DF. Esta consideração será ampliada na seção 4.3;
- Para a temperatura do fluido refrigerante será proposta uma função matemática hipotética, visando simular um comportamento mais próximo da realidade sendo explorada na seção 4.4;
- A condutividade térmica da pastilha combustível e revestimento de zircaloy serão tomados como valores médios e as análises destas considerações seguem descritas nas seções 4.5 e 4.6. Para verificar se os valores médios considerados estão corretos, será realizado um experimento numérico em paralelo com simulação em EF da sensibilidade das condutividades térmicas na seção 4.7;

### **4.3 Termo de fonte variando com posição e ângulo**

A geração de calor interna devido à fissão é não uniforme variando com a posição, ângulo e fluxo neutrônico do reator, sendo de natureza complexa e calculado através de softwares de neutrônica específicos. Estes programas fornecem os termos de fonte atrelados as porcentagens de enriquecimentos, queima (burnup) irregulares e diversos outros fatores.

Na prática o ramo da neutrônica entrega os valores dos termos de fonte para o campo da termo hidráulica que utiliza para o calculo da temperatura da pastilha combustível, vazões mássicas e parâmetros operacionais diversos. Logo a neutrônica trabalha desacoplada da termo hidráulica.

Como primeiro passo, será realizado o calculo conforme descrito abaixo da taxa volumétrica média de geração de calor conforme aborda Todreas [2]. Posteriormente

este valor será aplicado na relação matemática desenvolvida para ajuste do termo de fonte variando com posição e ângulo.

- Taxa linear média de geração de calor:

$$q' = \frac{\dot{Q} \cdot \nu}{(N_{EC} \cdot N_{Varetas/EC}) \cdot L} = \frac{(3.411 \times 10^3) 0,974}{(193 \times 264) 3,658} = 17,8252545025 \text{ KW/m}$$

- $\nu$  = Porcentagem de potência deposita na vareta combustível
- $N_{EC}$  = Número total de elementos combustíveis
- $N_{Varetas/EC}$  = Número de varetas por elemento combustível
- $L$  = Altura ativa/aquecida da vareta combustível

- Taxa volumétrica média de geração de calor para uma vareta combustível (posteriormente esse valor irá variar com o ângulo):

$$q_o''' = \frac{q'}{\pi \cdot \frac{D_{fo}^2}{4}} = \frac{17,8252545025}{\pi \cdot \frac{(8,192 \times 10^{-3})^2}{4}} = 338.194,056265824 \text{ KW/m}^3$$

Conforme já mencionado anteriormente, será proposto uma equação matemática hipotética que visa simular o comportamento do termo de fonte de forma mais realística, assim pode-se focar os esforços deste trabalho na aplicação do método numérico desenvolvido em [1]. Como ponto de partida foi utilizada a relação matemática descrita em [46] que segue descrita abaixo:

$$f = q_o''' \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

Cabe ressaltar que a malha do problema está discretizada em coordenadas cartesianas, sendo assim a equação acima será adaptada utilizando a equação da circunferência abaixo:

$$(x - a)^2 + (y - b)^2 = r^2 \quad (4.2)$$

onde:

$(a, b)$  = centro da circunferência.

A vareta combustível desenvolvida no Gmsh [3] é composta de circunferências concêntricas centradas na origem, logo  $a = b = 0$ . O equacionamento para o termo de fonte do problema torna-se:

$$f(x_i, y_j) = q_0''' \cdot \left[ 1 - \left( \frac{x_i^2 + y_j^2}{X_f^2 + Y_f^2} \right) \right] \text{ em } KW/m^3 \quad (4.3)$$

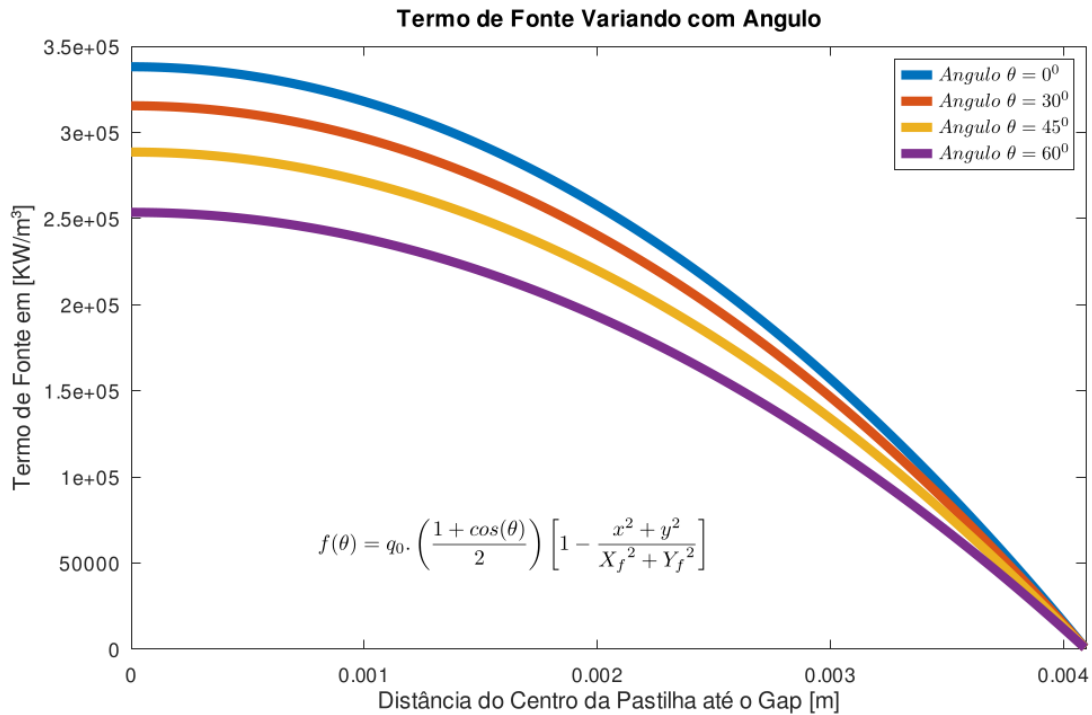
onde:

$$q_0''' = 338.194,056265824 \text{ KW}/m^3.$$

$$X_f = Y_f = \frac{D_{fo}}{2} : \text{ Raio da pastilha combustível.}$$

A partir deste ponto será proposta a relação matemática abaixo considerando o fator angular como uma correção do termo de fonte simulando vários enriquecimentos/burnup, sendo exemplificado graficamente na figura 4.1.

$$f(x_i, y_j, \theta) = q_0''' \cdot \left( \frac{1 + \cos(\theta)}{2} \right) \cdot \left[ 1 - \left( \frac{x_i^2 + y_j^2}{X_f^2 + Y_f^2} \right) \right] \text{ em } KW/m^3 \quad (4.4)$$



**Figura 4.1:** Termo de fonte variando para os ângulos  $\theta = 0^0, 30^0, 45^0, 60^0$ .

## 4.4 Temperatura do refrigerante variando em função do ângulo

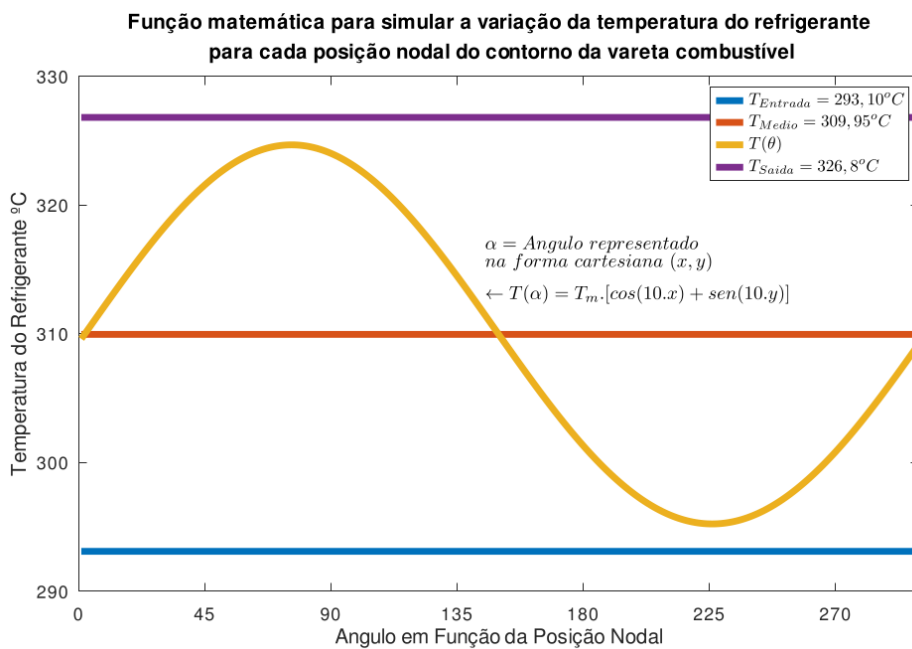
Reatores do tipo PWR operam com grandes vazões mássicas de refrigerante confinadas em canais estreitos, sofrendo variações de temperatura oriundas do fluxo

neutrônico e burnup desiguais. Neste contexto não é razoável a consideração de uma temperatura constante para o refrigerante.

Baseado na mesma premissa utilizada para o termo de fonte, será considerado neste trabalho a variação da temperatura do fluido refrigerante ao redor da vareta combustível. A correlação matemática desenvolvida é hipotética e visa simular um comportamento mais próximo da realidade. Cabe ressaltar que o ângulo considerado é obtido pelas posições nodais do contorno, assim para cada ponto nodal ao redor da vareta combustível, haverá uma temperatura diferente que oscila em torno de uma média, não ultrapassando a temperatura de entrada e saída do fluido refrigerante no reator. Abaixo segue a relação matemática descrita com a sua curva característica.

$$T(\alpha) = T_m^{Ref} \cdot [\cos(10 \cdot x) + \text{sen}(10 \cdot y)] \quad (4.5)$$

$$T_m^{Ref} = T_{in} + \frac{\Delta T_{\text{Núcleo}}}{2} = 309,95^\circ\text{C}$$



**Figura 4.2:** Temperatura do fluido refrigerante variando angularmente ao redor da vareta combustível.

## 4.5 Condutividade média da pastilha combustível

Em problemas de natureza nuclear a equação da condutividade térmica para a pastilha combustível varia com a temperatura conforme relação recomenda pela IAEA em [14, p.148] que segue abaixo. Cabe ressaltar que esta equação é válida

para burnup até 75 MWd/Kg UO<sub>2</sub>.

$$k_f = \frac{1}{K_1 + K_2 + K_3.T_f} + K_4.e^{K_5.T_f} \text{ em } W/m.K \quad (4.6)$$

onde :

B = 33.0 MWd/Kg UO<sub>2</sub> (Seabrook Station PWR Reactor).

T<sub>f</sub> = Temperatura da pastilha combustível em °C.

$$K_1 = 0.1148$$

$$K_2 = 0.0035.B$$

$$K_3 = 2.475 \times 10^{-4}.(1 - 0.00333.B)$$

$$K_4 = 0.0132$$

$$K_5 = 0.00188$$

Para o problema em questão de natureza linear a condutividade não varia com a temperatura, sendo assim, uma aproximação aceitável é o calculo da condutividade térmica média para uma determinada faixa de temperatura.

Considerando uma faixa de 700 à 2280°C aplicado na formula acima, foram calculados diversos valores para a condutividade da pastilha, com o valor médio obtido de 2,1586 W/m.K.

No problema utilizado nesta dissertação de Todreas [2] descrito na tabela 4.1, o valor médio da condutividade é de 2,163 W/m.K, representado um erro percentual 0,2014 % . Sendo assim devido ao baixo erro, o valor adotado para a simulação será o valor proposto por Todreas.

Farha e Sahadath et al. em [47] realiza uma analise semelhante considerando um valor médio da condutividade para uma simulação linear.

## 4.6 Condutividade do revestimento de zircaloy

A equação da condutividade térmica para o revestimento de zircaloy varia com a temperatura conforme relação recomenda pela IAEA em [14, p.249] que segue abaixo. Cabe ressaltar que esta equação é válida para faixa de temperatura de 300 à 1800 K.

$$k_c = 12.767 - 5.4348 \times 10^{-4} T_c + 8.9818 \times 10^{-6} T_c^2 \quad (4.7)$$

onde:

$k_c$  = Condutividade térmica do revestimento em W/mK

$T_c$  = Temperatura do revestimento de Zircaloy em K.

Conforme tabela descrita na norma da IAEA em [14, p.253], foram calculadas as condutividades do zircaloy para as diversas temperaturas dentro faixa válida (300 à 1800 K) da equação 4.7. Observou-se que a condutividade é muito sensível a variação de temperatura com valores de 13,41 W/m.K para 300 K até 40,89 W/m.K para 1800 K.

Baseado na premissa acima, para um valor médio conservador, considerou-se a faixa de temperatura de 300 à 480 K aplicado na formula 4.7, obtendo-se o valor médio de 13,946 W/m.K. No problema extraído de Todreas descrito na tabela 4.1 o referido autor utiliza o valor de 13,85 W/m.K com erro percentual de 0,6909 %.

Em termos de engenharia, ao se adotar uma baixa condutividade para o revestimento de zircaloy, remove-se uma quantidade menor de calor do combustível, sendo assim este terá uma temperatura maior na linha centro.

Esta consideração é uma abordagem conservadora adotada por Todreas que visa segurança, neste contexto, será adotado como condutividade média do revestimento de zircaloy, o valor proposto na tabela 4.1 de 13,85 W/m.K. Cabe ressaltar que Farha e Sahadath et al. em [47] utiliza a mesma analogia descrita acima.

## **4.7 Verificação experimental das condutividades térmicas adotadas por Todreas**

Após a análise das condutividades térmicas realizadas acima, será proposto uma verificação através de experimentos numéricos em paralelo, visando confirmar se as considerações adotadas permitirão obter dados seguros para o experimento proposto nesta dissertação. O foco está na observação da variação da temperatura da linha de centro do combustível, conforme se varia a condutividade do  $UO_2$  e revestimento de zircaloy. As condutividades foram calculadas de acordo com a norma da IAEA em [14] através das relações matemáticas 4.6 e 4.7. Abaixo na tabela 4.3 seguem as condutividades calculadas para o experimento.

**Tabela 4.3:** Tabela comparativa dos valores das condutividades calculadas conforme equações da norma da AIEA [14] e valores médios utilizados na simulação obtidos de Todreas [2].

Temperatura para calculo do $k_f$ em [ $^{\circ}C$ ]	$k_f$ Equação 4.6 em [W/m.K]	$k_f$ médio Todreas	Temperatura para calculo do $k_c$ em [ $K$ ]	$k_c$ Equação 4.7 em [W/m.K]	$k_c$ médio Todreas
977	2,3273	2,163 W/m.K	349	13,671	13,85 W/m.K
1077	2,2387		364	13,759	
1277	2,1002		394	13,947	
1377	2,0496		409	14,047	

Serão realizados ao todo 32 experimentos numéricos considerando a malha menos refinada e ângulo de  $0^{\circ}$  com aplicação do método dos elementos finitos. Abaixo segue tabela com os valores de referência e a temperatura da linha de centro do combustível obtido através de simulação, sendo a base para o calculo do erro.

**Tabela 4.4:** Valores da condutividade da pastilha e revestimento de zircaloy obtidos de Todreas [2].

Referência Todreas	$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}C$ )
	2,163	13,85	1068,87632534061

#### 4.7.1 Resultado dos experimentos com valores da condutividade do combustível fixas e variação da condutividade do revestimento de zircaloy

A primeira parte do experimento consta em fixar os valores da condutividade térmica do combustível e variar as condutividades térmicas do revestimento de zircaloy. Para cada variação obtêm-se uma temperaturas da linha de centro da pastilha combustível conforme seguem descritas nas tabelas abaixo.

**Tabela 4.5:** Experimento 1 - Condutividade do  $\text{UO}_2$  fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy.

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}\text{C}$ )	Erro Percentual
2,3273	13,671	1026,75149432123	3,94103882934787
	13,759	1026,59695311536	3,95549711626152
	13,947	1026,27332810888	3,98577423989199
	14,047	1026,18110129047	3,99440262993333

**Tabela 4.6:** Experimento 2 - Condutividade do  $\text{UO}_2$  fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy.

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}\text{C}$ )	Erro Percentual
2,2387	13,671	1048,93122220337	1,86598792249274
	13,759	1048,70766868851	1,88690273831943
	13,947	1048,38404265956	1,95465419609595
	14,047	1048,21542922718	1,93295478846406

**Tabela 4.7:** Experimento 3 - Condutividade do  $\text{UO}_2$  fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy.

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}\text{C}$ )	Erro Percentual
2,1002	13,671	1087,16321655022	1,71085192702558
	13,759	1087,00867410418	1,69639352408599
	13,947	1086,68504648007	1,66611615556031
	14,047	1086,51643220948	1,65034124628457

**Tabela 4.8:** Experimento 4 - Condutividade do  $\text{UO}_2$  fixa com variação da condutividade do revestimento de zircaloy.

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}\text{C}$ )	Erro Percentual
2,0496	13,671	1102,44723003657	3,14076604561903
	13,759	1102,29268731514	3,12630761691559
	13,947	1101,96905910921	3,09603019395648
	14,047	1101,80044453286	3,08025525607516

#### 4.7.2 Resultado dos experimentos com valores da condutividade do revestimento de zircaloy fixas e variação da condutividade do combustível

Nesta parte da análise será realizado o oposto, onde a condutividade térmica do revestimento de zircaloy será fixada com variação da condutividade da pastilha. Abaixo seguem os resultados tabelados.

**Tabela 4.9:** Experimento 5 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do  $UO_2$ .

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}C$ )	Erro Percentual
2,3273	13,671	1026,75149432123	3,94103882934787
2,2387		1048,86221037888	1,87244440607778
2,1002		1087,16321655022	1,71085192702558
2,0496		1102,44723003657	3,1407660456192

**Tabela 4.10:** Experimento 6 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do  $UO_2$ .

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}C$ )	Erro Percentual
2,3273	13,759	1026,59695311536	3,95549711626152
2,2387		1048,70766868851	1,88690273831943
2,1002		1087,00867410418	1,69639352408633
2,0496		1102,29268731514	3,1263076169155

**Tabela 4.11:** Experimento 7 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do  $UO_2$ .

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}C$ )	Erro Percentual
2,3273	13,947	1026,27332810888	3,98577423989199
2,2387		1048,38404265956	1,91717995760828
2,1002		1086,68504648007	1,66611615556037
2,0496		1101,96905910921	3,09603019395669

**Tabela 4.12:** Experimento 8 - Condutividade do revestimento de zircaloy fixa com variação da condutividade do  $UO_2$ .

$k_f$	$k_c$	Temperatura do centro da pastilha ( $^{\circ}C$ )	Erro Percentual
2,3273	14,047	1026,10471521363	4,00154902049593
2,2387		1048,21542922718	1,93295478846406
2,1002		1086,51643220948	1,65034124628485
2,0496		1101,80044453286	3,08025525607542

### 4.7.3 Análise dos valores das condutividades térmicas dos experimentos

Ao analisar os dados acima obteve-se um erro percentual máximo de 4,0015 % para as temperaturas da linha de centro da pastilha combustível, sendo considerado como erro aceitável em termos de engenharia por estarem abaixo de 5 %. Sendo assim os valores adotados por Todreas em [2], são razoáveis e seguros conforme explorado inicialmente nas seções 4.5 e 4.6 com posterior simulação. Logo os valores adotados por Todreas serão utilizados nos experimentos numéricos nesta dissertação.

## 4.8 Resultados da simulação computacional

Após todas as simplificações impostas e considerações acerca da condutividade térmica média adota; as simulações foram executadas e tratadas nos softwares Octave [48] e Paraview [49]. Segue abaixo os resultados e análises.

### 4.8.1 Tempo computacional

Os tempos computacionais para os ângulos de  $0^{\circ}$ ,  $30^{\circ}$ ,  $45^{\circ}$  e  $60^{\circ}$  são fornecidos ao final de cada simulação e seguem tabelados abaixo.

**Tabela 4.13:** Custo computacional para  $\theta = 0^{\circ}$

Tipo de Malha	n <sup>o</sup> Pontos	n <sup>o</sup> Elementos	Montagem (s)		Solver (s)	
			EF	EF/DF	EF	EF/DF
Grosseiro	12951	12800	6.5	1.2	1.2	1.1
Intermediário	25395	25216	6.1	2.3	3.0	3.5
Avançado	44501	44276	9.8	3.9	9.4	12.2

**Tabela 4.14:** Custo computacional para  $\theta = 30^\circ$ 

Tipo de Malha	n° Pontos	n° Elementos	Montagem (s)		Solver (s)	
			EF	EF/DF	EF	EF/DF
Grosseiro	12951	12800	3.8	2.0	1.4	0.94
Intermediário	25395	25216	5.3	2.3	2.7	3.1
Avançado	44501	44276	7.1	3.6	6.9	9.4

**Tabela 4.15:** Custo computacional para  $\theta = 45^\circ$ 

Tipo de Malha	n° Pontos	n° Elementos	Montagem (s)		Solver (s)	
			EF	EF/DF	EF	EF/DF
Grosseiro	12951	12800	2.1	1.4	0.74	1.06
Intermediário	25395	25216	3.6	2.7	2.2	4.0
Avançado	44501	44276	6.5	3.6	6.6	1.03

**Tabela 4.16:** Custo computacional para  $\theta = 60^\circ$ 

Tipo de Malha	n° Pontos	n° Elementos	Montagem (s)		Solver (s)	
			EF	EF/DF	EF	EF/DF
Grosseiro	12951	12800	10.9	2.7	0.90	1.5
Intermediário	25395	25216	3.6	2.2	2.4	3.4
Avançado	44501	44276	6.0	3.6	6.3	9.3

Ao analisar os dados acima, chega-se a conclusão de que o acoplamento EF/DF é muito superior no quesito do tempo computacional gasto para montagem das matrizes e termos independentes. Esse fato fica mais evidente conforme se aumenta o refino da malha com ganhos de até duas vezes melhores que o MEF.

Com relação ao tempo gasto para solução do problema, em alguns caso o MEF teve melhores resultados; porém ao se analisar os tempos como um todo, o MEF+MDF recupera o tempo com ganho real líquido.

## 4.8.2 Erro nos experimentos numéricos

O calculo do erro conforme já abordado anteriormente na revisão bibliográfica, está geralmente atrelado a uma solução analítica ou experimental que permite validar os experimentos numéricos.

Entretanto para o caso em análise, composto de equações diferenciais parciais (EDP) de segunda ordem com termos de fonte e temperatura do fluido refrigerante variando com posição e ângulo; não há solução analítica exata para o problema em questão.

Baseado nos fatos anteriores, considerou-se como uma solução analítica aceitável os resultados obtidos através da simulação por elementos finitos para uma malha com refinamento ultra elevado, conforme descrito no quadro que se segue:

Número de elementos	Número de pontos
119124	119571

Essa consideração foi utilizada pois o método dos elementos finitos é consagrado e extremamente confiável, sendo que ao elevar-se o refino de uma malha para o MEF a solução converge para a analítica. Com isso consegue-se validar e verificar o problema, não eximindo do processo experimental ou dados reais para comparação definitiva.

Para o calculo do erro dos experimentos numéricos, será utilizado o erro percentual já abordado na revisão bibliográfica através da equação 1.6 para os ângulos de  $0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $60^\circ$  conforme tabelados abaixo.

**Tabela 4.17:** Erro percentual em relação a solução analítica  $\theta = 0^\circ$

Tipo de Malha	n <sup>o</sup> Pontos	n <sup>o</sup> Elementos	Erro EF/DF	Erro EF
Grosseiro	12951	12800	0.222	0.215
Intermediário	25395	25216	0.374	0.391
Avançado	44501	44276	0.281	0.385

**Tabela 4.18:** Erro percentual em relação a solução analítica  $\theta = 30^\circ$ 

Tipo de Malha	n <sup>o</sup> Pontos	n <sup>o</sup> Elementos	Erro EF/DF	Erro EF
Grosseiro	12951	12800	0.217	0.211
Intermediário	25395	25216	0.366	0.383
Avançado	44501	44276	0.276	0.377

**Tabela 4.19:** Erro percentual em relação a solução analítica  $\theta = 45^\circ$ 

Tipo de Malha	n <sup>o</sup> Pontos	n <sup>o</sup> Elementos	Erro EF/DF	Erro EF
Grosseiro	12951	12800	0.211	0.205
Intermediário	25395	25216	0.356	0.373
Avançado	44501	44276	0.268	0.367

**Tabela 4.20:** Erro percentual em relação a solução analítica  $\theta = 60^\circ$ 

Tipo de Malha	n <sup>o</sup> Pontos	n <sup>o</sup> Elementos	Erro EF/DF	Erro EF
Grosseiro	12951	12800	0.202	0.196
Intermediário	25395	25216	0.341	0.357
Avançado	44501	44276	0.257	0.351

Ao analisar o erro para todos ângulos, nota-se valores baixíssimo de erro percentual além de verificar que o erro está diminuindo conforme se refina mais a malha. Este fato mostra que há convergência dos resultados para a solução analítica.

### 4.8.3 Precisão entre os métodos

Quando trata-se de precisão estamos nos referindo a acurácia de um processo, ou seja, o quanto que este se aproxima de uma referência desejada.

A acurácia nesta dissertação será verificada por construção dos perfis de temperatura para os ângulos de  $0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $60^\circ$  para todos os refinamentos de malhas e métodos, conforme segue nas figuras 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 abaixo:

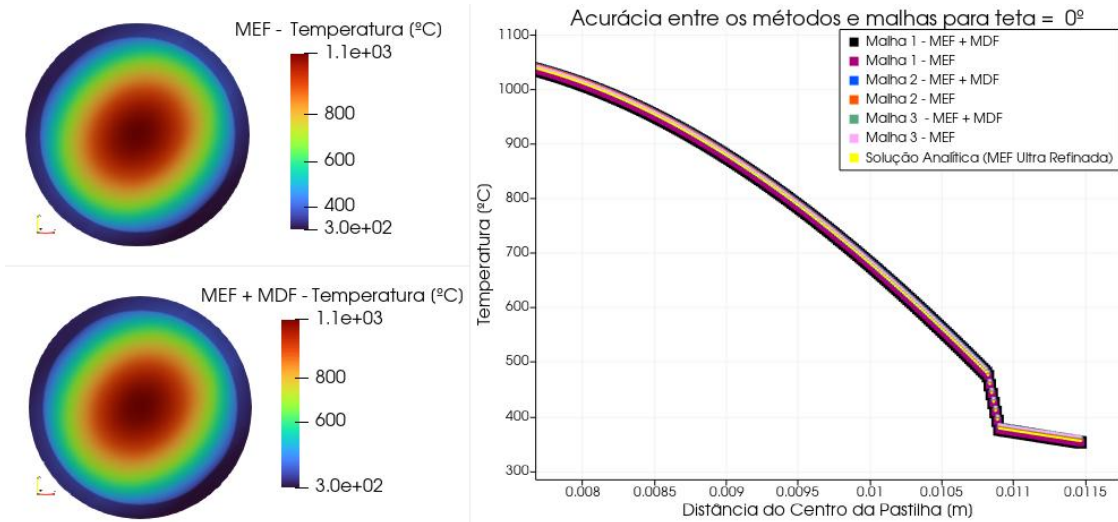


Figura 4.3: Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de 0°.

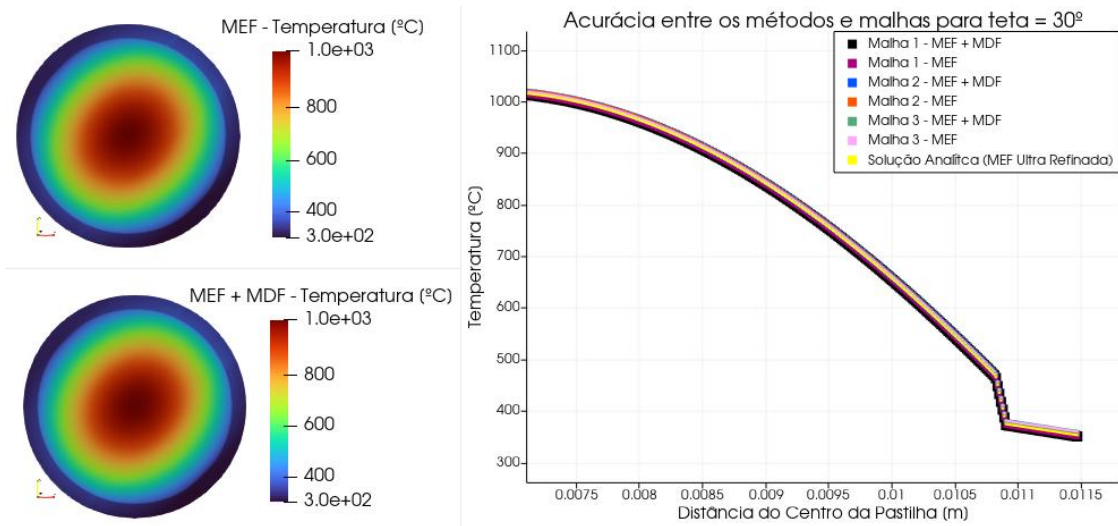


Figura 4.4: Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de 30°.

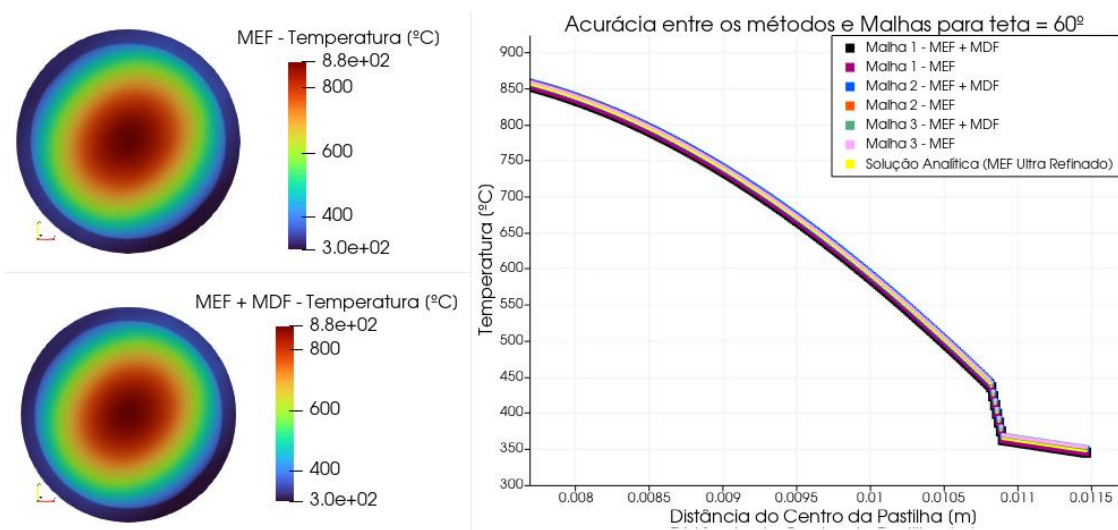
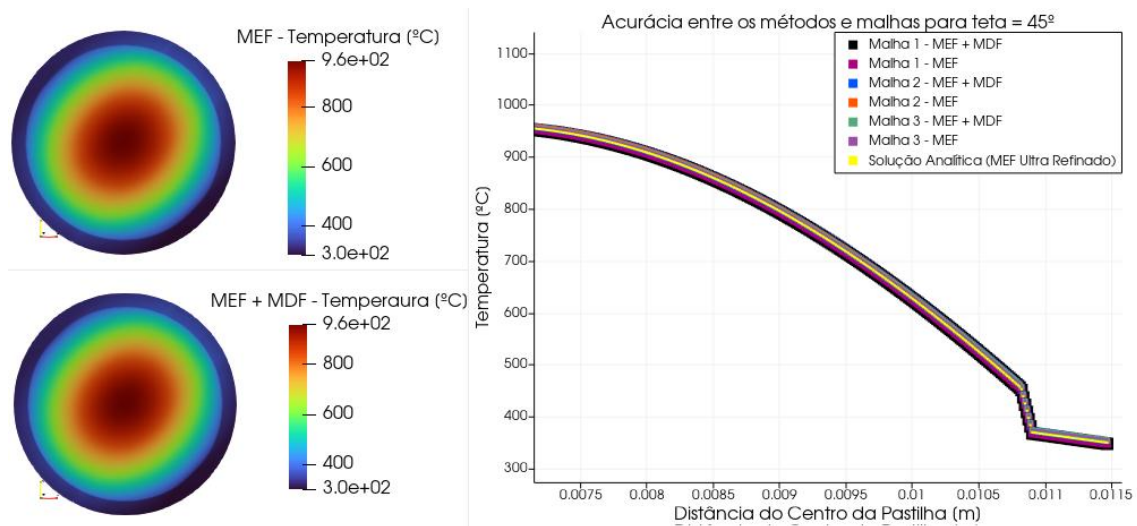


Figura 4.6: Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de 60°.



**Figura 4.5:** Acurácia entre EF e EF/DF para o ângulo de 45°.

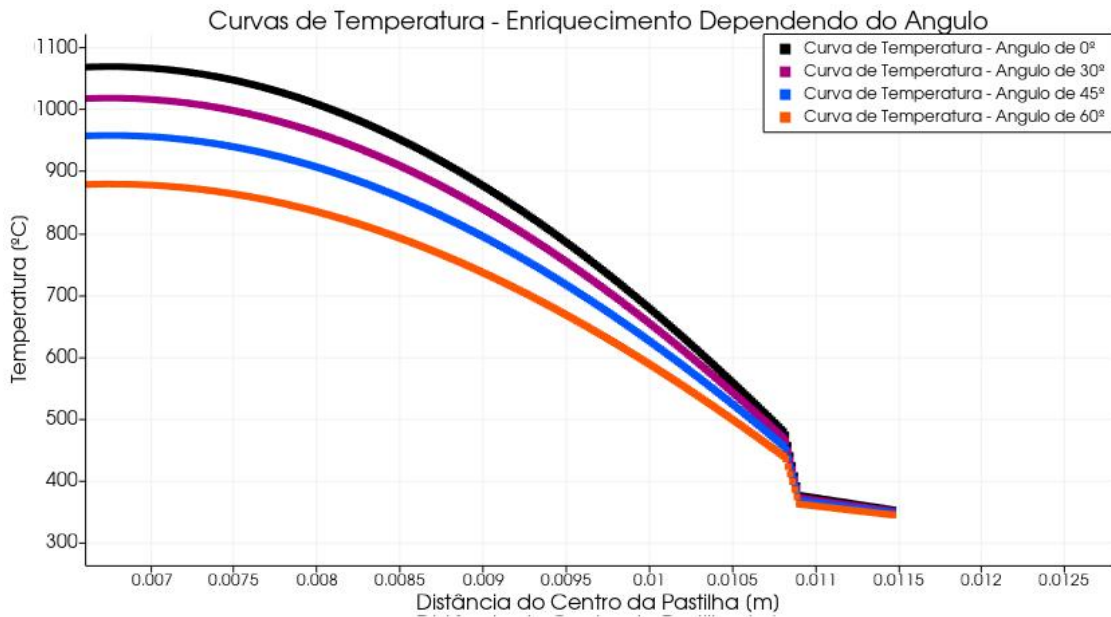
Ao verificar-se as curvas acima, conclui-se que o MEF e o MEF + MDF tem uma acurácia elevada, mostrando que os métodos são precisos pois as curvas estão casadas uma em cima da outra. Outro ponto importante a ser mencionado é que as curvas batem em cima da solução analítica considerada, sendo assim, conclui-se que além da acurácia todos os refinamentos de malha considerados são satisfatórios, podendo-se escolher a malha com baixo refinamento pois a mesma representa bem o processo. O fato mencionado acima diminui os gastos computacionais caso haja mudanças em outros parâmetros que necessitem de novas simulações.

#### 4.8.4 Comportamento das curvas de temperatura

Para cada ângulo, um novo termo de fonte é gerado conforme abordado na seção 4.3, isso implica na variação da temperatura e nos permite investigar se para um dado ângulo específico, haverá uma temperatura elevada no centro da pastilha que seja crítica.

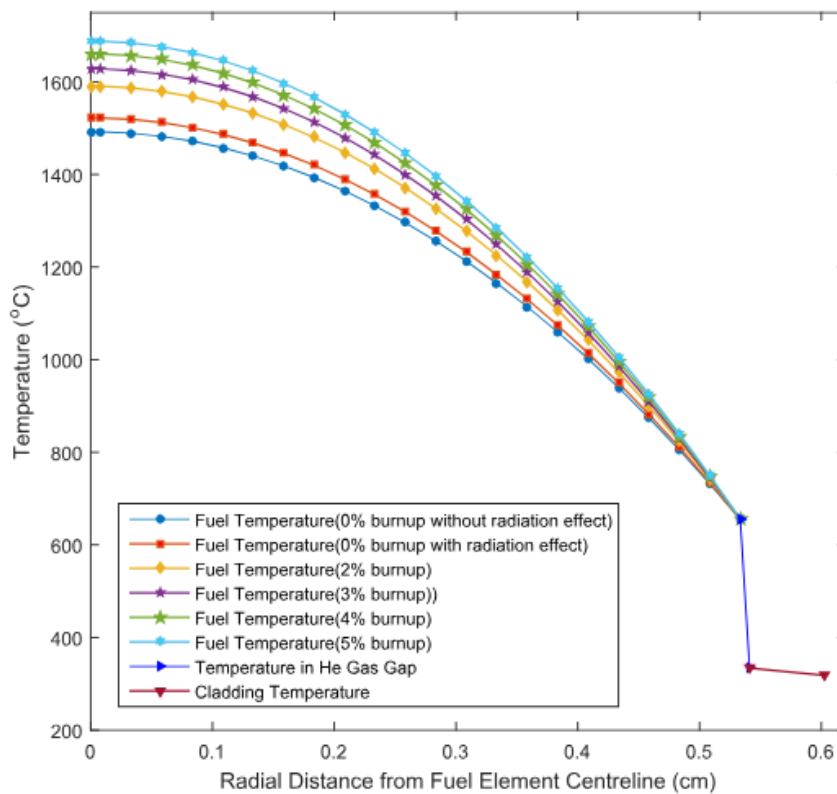
A faixa de operação geralmente está entre 950°C à 2280°C, não podendo chegar a fusão da matriz cerâmica de UO<sub>2</sub> em valores próximos de 2800°C. Abaixo na figura 4.7 seguem as curvas de temperatura para diversos ângulos:

As curvas mostram que as temperaturas máximas não ultrapassaram os 1100°C, representando um valor aceitável operacional para temperatura no centro da pastilha combustível. Conforme aborda Farha e Sahadath et al. em [47] a temperatura na linha central do combustível diminui na forma de um sino como uma função do quadrado da distância radial do centro.



**Figura 4.7:** Curvas de temperatura para os ângulos de 0°, 30°, 45° e 60°.

Cabe ressaltar que as referidas autoras realizaram uma análise linear da transferência de calor em vareta combustível, obtendo o mesmo comportamento das curvas acima conforme figura 4.8 abaixo.

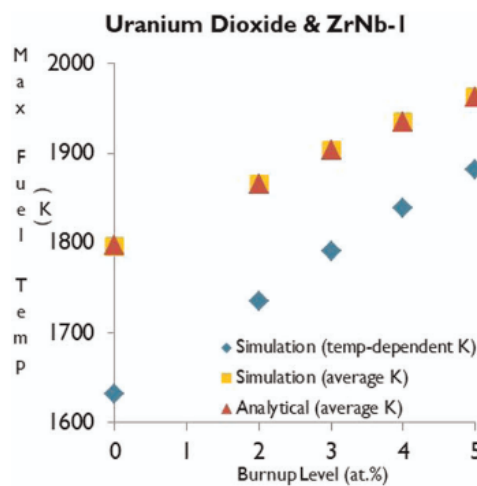


**Figura 4.8:** Curvas de temperatura obtidos por Farha e Sahadath et al. em [47].

Qualitativamente o comportamento das temperaturas são semelhantes em ambos os trabalhos, denotando concordância nos resultados encontrados ao utilizar o software desenvolvido no PEN/COPPE e o ANSYS.

Com relação ao revestimento de zircaloy, o comportamento da curva é uma queda suave demonstrando a boa condutividade térmica dos metais. Isso quer dizer que o calor é transferido em maior quantidade para o refrigerante e assim o metal não retem calor em sua estrutura apresentando uma queda suave com baixa temperatura.

Farha e Sahadath et al. em [47] ao realizar uma análise não linear, obtiveram valores menores de temperatura da linha central da pastilha combustível se comparado com a análise linear conforme figura 4.9 abaixo. Este resultado denota que ao se considerar condutividades térmicas médias em um problema linear, estamos trabalhando de forma conservativa. Sendo assim a linearização é um ponto de partida seguro para análises térmicas desta natureza.



**Figura 4.9:** Comparação da temperatura no centro do combustível considerando análise linear e não linear por Farha e Sahadath et al. em [47].

# Capítulo 5

## Conclusões

A proposta deste trabalho foi realizar a simulação computacional utilizando um método inovador desenvolvido por Santos e Dutra do Carmo et al. em [1], aplicado a um problema real bidimensional de condução de calor linear estacionário em uma vareta combustível, com variação do termo de fonte e temperatura do fluido refrigerante dependendo do ângulo.

Por dificuldades de encontrar relações matemáticas para o termo de fonte e temperatura do refrigerante, foi proposto de forma hipotética a construção de funções matemáticas para variar estes comportamentos, trazendo o problema para uma condição mais realística. Devido também a não utilização de softwares da área de neutrônica, foi associado ângulos fixos que representam os enriquecimentos e queimas (burnup) da pastilha combustível, gerando diversos termos de fonte para análise de comportamento da temperatura.

Com o foco da dissertação voltado para aplicação do método de acoplamento EF/DF em comparação com o método dos elementos finitos. Obteve-se excelentes resultados com relação aos tempos computacionais de montagem das matrizes e termos independentes juntamente com o tempo de solução do sistema matricial.

Observou-se que conforme aumenta o refino da malha, os tempos do acoplamento EF/DF chegam a ser superiores em até duas vezes se comparado com MEF para problemas bidimensionais. Para malhas massivas e tridimensionais, espera-se que o ganho no tempo computacional seja muito melhor.

Nos poucos casos em que o tempo de solução do sistema de matrizes para o MEF foi superior ao EF/DF, ocorreu uma recuperação nos tempos computacionais para o acoplamento EF/DF, sendo assim a metodologia se mostrou mais vantajosa em

todos os casos coadunando com os resultados encontrados pelo seu desenvolvedor [1].

Devido a consideração do termo de fonte e temperatura do fluido refrigerante variar com o ângulo e posição, o problema não tem solução analítica e por falta de dados experimentais; foi considerado como solução aceitável, uma simulação computacional em MEF para uma malha ultra refinada.

A consideração de uma solução numérica como analítica deve-se ao fato do método dos elementos finitos ser consagrado e exaustivamente testado, chegando a conclusão de que ao se refinar mais a malha, a solução numérica se aproximando muito da analítica. O fato mencionado acima não exige da realização de experimentos para coleta de dados visando confirmar o processo utilizado trazendo mais segurança.

O processo de linearização para problemas não lineares é um ponto de partida para iniciar análises focadas na segurança, conforme explorado por Farha e Sahadath et al. em [47] em seu trabalho.

Cabe ressaltar que a metodologia de acoplamento EF/DF para casos não lineares, ainda não foi implementada no software desenvolvido no PEN/COPPE e por este motivo optou-se pela análise linear para aplicar uma metodologia nova em problemas da área nuclear.

Mesmo com as simplificações e consideração impostas, os resultados para temperatura no centro da pastilha tiveram valores aceitáveis estando dentro das faixas abordadas na literatura.

Por fim como proposta para trabalhos futuros, vislumbra-se a aplicação do acoplamento entre os métodos de elementos finitos e diferenças finitas (EF/DF) para condução de calor bidimensional linear realizando a comparação com a não linear, para o caso transiente e estacionário.

# Referências Bibliográficas

- [1] SANTOS, M., DUTRA DO CARMO, E. *et al.*, “A scheme for the analysis of primal stationary boundary value problems based on FE/FD multi-method”, **Finite Elements in Analysis and Design** v. 209, pp. 103809, 2022.
- [2] TODREAS, N., KAZIMI, M., **Nuclear Systems: Thermal Hydraulic Fundamentals**. 2<sup>a</sup> ed. New York, Taylor & Francis, 2012.
- [3] GEUZAIN, C., REMACLE, J.-F., “Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities”, **International Journal for Numerical Methods in Engineering** v. 79, n. 11, pp. 1309–1331, 2009.
- [4] ENERGÊS, **Diferença entre Matriz Energética e Matriz Elétrica**. Disponível em: < <https://energes.com.br/wp-content/uploads/2021/01/2-768x432.png> >. Acesso em: 10 dez. 2024.
- [5] MARKANDYA, A., WILKINSON, P., “Electricity Generation and Health”, **Series Energy and Health** v. 370, pp. 979–990, 2007.
- [6] MCCOMBIE, C., JEFFERSON, M., “Renewable and nuclear electricity: Comparison of environmental impacts”, **Energy Policy** v. 96, pp. 758–769, 2016.
- [7] NRC, **Pressurized Water Reactors**. Disponível em: < <https://www.nrc.gov/images/pwrsm.jpg> >. Acesso em: 10 dez. 2024.
- [8] EDUCATIVO, R., **Manufacture of a fuel assembly**. Disponível em: < <https://rinconeducativo.org/wp-content/uploads/2022/12/manufacture-fuel-assembly.png> >. Acesso em: 11 dez. 2024.
- [9] HAHN, D., ÖZISIK, M., **Heat Conduction**. 3<sup>a</sup> ed. New Jersey, Wiley, 2012.
- [10] ZUDANS, Z., YEN, T. *et al.*, **Thermal Stress Techniques in the Nuclear Industry.**, American Elsevier Publishing Company, 1965.

- [11] KANG, C.-H., LEE, S.-U. *et al.*, “3D finite element analysis of a nuclear fuel rod with gap elements between the pellet and the cladding”, **Journal of Nuclear Science and Technology** v. 53, n. 2, pp. 232–239, 2016.
- [12] AN, C., MOREIRA, F. C., SU, J., “Thermal analysis of the melting process in a nuclear fuel rod”, **Applied Thermal Engineering** v. 68, n. 1, pp. 133–143, 2014.
- [13] HAGRMAN, D. L., REYMANN, G. A., **MATPRO-Version 11: a handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior**. Idaho National Lab. (INL), Idaho Falls, ID (United States), Fev. 1979.
- [14] IAEA, **Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors**. Vienna, International Atomic Energy Agency, 2006.
- [15] AKIMOTO, H., ANODA, Y. *et al.*, **Nuclear Thermal Hydraulics.**, Springer Japan, 2016.
- [16] ALSHAREEF, A. M. “Review of the Radiation Effect on the Cladding of Zirconium Alloy in Nuclear Reactors”. In: **Proceedings of the Saudi International Conference on Nuclear Power Engineering**, pp. 208–219, Dhahran, Arábia Saudita, Nov. 2023.
- [17] WINSBERG, E., “Simulated Experiments: Methodology for a Virtual World”, **Philosophy of Science** v. 70, n. 1, pp. 105–125, 2003.
- [18] MURR, L. E., “Computer Simulations in Materials Science and Engineering”, In: (ed.), **Handbook of Materials Structures, Properties, Processing and Performance**, Cham, Springer International Publishing, 2016.
- [19] LEVEQUE, R., **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems.**, Society for Industrial e Applied Mathematics, 2007.
- [20] ADAK, M., MANDAL, A., “Numerical Solution of 2nd Order Boundary Value Problems with Dirichlet, Neumann and Robin Boundary Conditions using FDM”, **Communications in Mathematics and Applications** v. 13, pp. 529–537, Ago. 2022.
- [21] ARDOUREL, V., JEBEILE, J., “On the presumed superiority of analytical solutions over numerical methods”, **European Journal for Philosophy of Science** v. 7, Jul. 2016.

- [22] FRENCH, A., TAYLOR, E., **An Introduction to Quantum Physics.**, Taylor & Francis, 1979.
- [23] MAHIAN, O., KOLSI, L. *et al.*, “Recent advances in modeling and simulation of nanofluid flows—Part II: Applications”, **Physics Reports** v. 791, pp. 1–59, 2019.
- [24] BERN, M., PLASSMANN, P., “Mesh Generation”, In: Sack, J.-R., Urrutia, J. (eds.), **Handbook of Computational Geometry**, chapter 6, Amsterdam, North-Holland, 2000.
- [25] DÜNDAR, B. B., **Development of a mesh generation software for computational electromagnetics.** P.hD thesis, Middle East Technical University, 2000.
- [26] BABUŠKA, I., AZIZ, A. K., “On the angle condition in the finite element method”, **SIAM Journal on numerical analysis** v. 13, n. 2, pp. 214–226, 1976.
- [27] YILDIZ, Ö., **Implementation of mesh generation algorithms.** M. Sc dissertation, Middle East Technical University, 2001.
- [28] TECCHIO, C., **Development of numerical methodology for optimization of multi-block meshes for aerospace applications.** Disponível em: < [https://www.researchgate.net/figure/Figura-11-Characterísticas-topológicas-tipicamente-encontradas-em-malhas-estruturada-e\\_fig1\\_318929849](https://www.researchgate.net/figure/Figura-11-Characterísticas-topológicas-tipicamente-encontradas-em-malhas-estruturada-e_fig1_318929849) >. Acesso em: 13 jan. 2025.
- [29] YILMAZ, A. E., **Analysis of electromagnetic scattering problems with the finite element method.** P.hD thesis, Middle East Technical University, 2000.
- [30] STRAUSS, W., **Partial Differential Equations: An Introduction.**, Wiley, 2007.
- [31] STONE, M., GOLDBART, P., **Mathematics for Physics: A Guided Tour for Graduate Students.**, Cambridge University Press, 2009.
- [32] CHENG, A. H.-D., CHENG, D. T., “Heritage and early history of the boundary element method”, **Engineering Analysis with Boundary Elements** v. 29, n. 3, pp. 268–302, 2005.
- [33] AKIN, J., **Finite Element Analysis with Error Estimators: An Introduction to the FEM and Adaptive Error Analysis for Engineering Students.**, Butterworth-Heinemann, 2005.

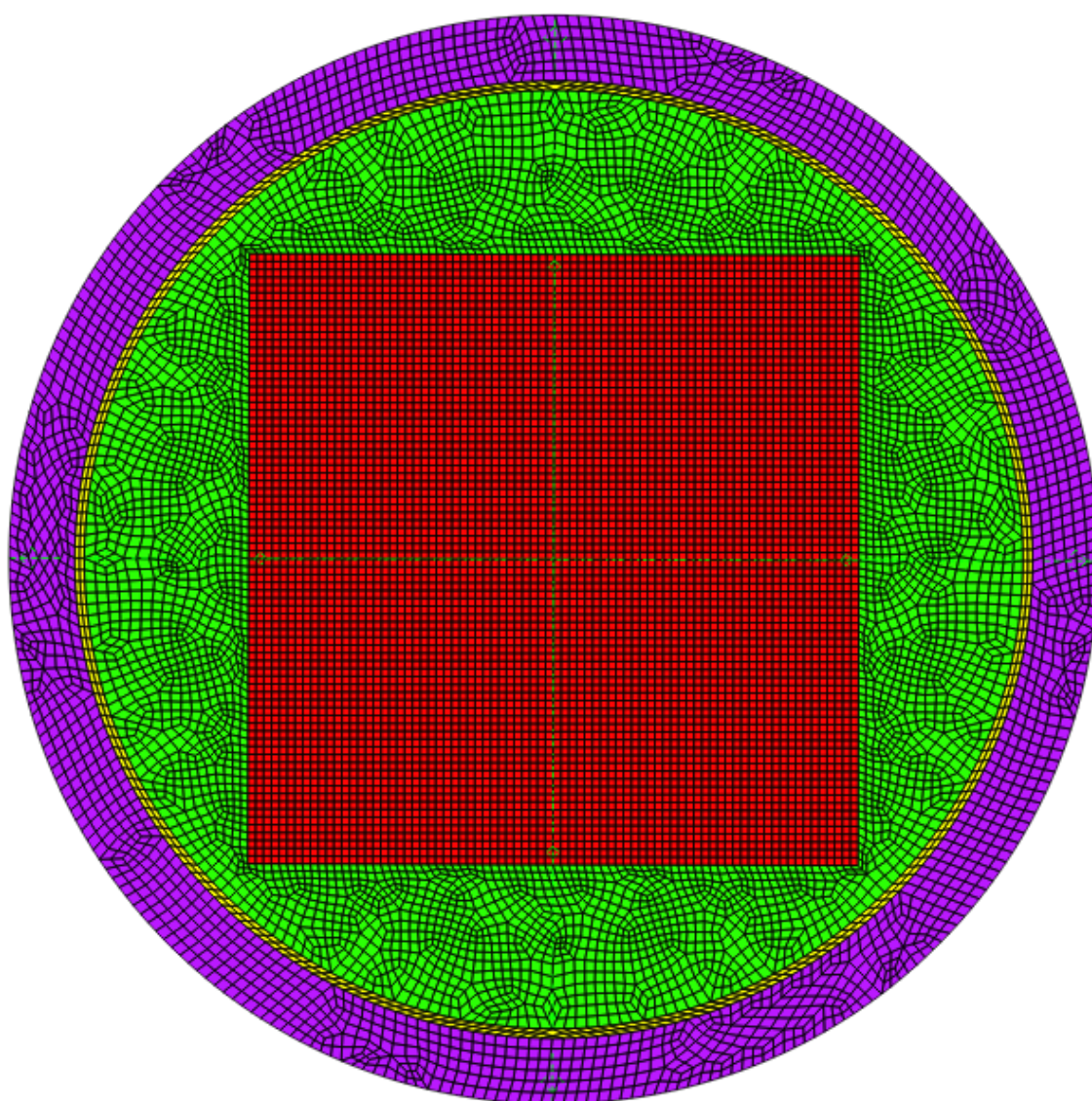
- [34] CZICHOS, H., SAITO, T., SMITH, L., **Springer Handbook of Materials Measurement Methods.**, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [35] ERN, A., GUERMOND, J., **Theory and Practice of Finite Elements.**, Springer New York, 2004.
- [36] SOARES JR., D., “Coupled Numerical Methods to Analyze Interacting Acoustic-Dynamic Models by Multidomain Decomposition Techniques”, **Mathematical Problems in Engineering** v. 2011, n. 1, pp. 245170, 2011.
- [37] WONG, K. C. L., SUMMERS, R. M. *et al.*, “Pancreatic Tumor Growth Prediction With Elastic-Growth Decomposition, Image-Derived Motion, and FDM-FEM Coupling”, **IEEE Transactions on Medical Imaging** v. 36, n. 1, pp. 111–123, 2017.
- [38] QIAO, J., ZOU, J. *et al.*, “Calculation of Ion-Flow Field of HVdc Transmission Lines in the Presence of Wind Using Finite Element-Finite Difference Combined Method With Domain Decomposition”, **IEEE Transactions on Magnetics** v. 52, n. 3, pp. 1–4, 2016.
- [39] GAO, L., KEYES, D., “Combining finite element and finite difference methods for isotropic elastic wave simulations in an energy-conserving manner”, **Journal of Computational Physics** v. 378, pp. 665–685, 2019.
- [40] JAŚKOWIEC, J., MILEWSKI, S., “The effective interface approach for coupling of the FE and meshless FD methods and applying essential boundary conditions”, **Computers & Mathematics with Applications** v. 70, n. 5, pp. 962–979, 2015.
- [41] JAŚKOWIEC, J., MILEWSKI, S., “Coupling finite element method with meshless finite difference method in thermomechanical problems”, **Computers & Mathematics with Applications** v. 72, n. 9, pp. 2259–2279, 2016.
- [42] TOSELLI, A., WIDLUND, O., **Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory.**, Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [43] BOULBRACHENE, M., CORTEY-DUMONT, P., MIELLOU, J., “Mixing finite elements and finite differences in a subdomain method, in: Proceedings of the First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, Ecole Nationale Des Ponts Et Chaussees, Paris, France, January 7-9, 1987”, **Society for Industrial and Applied Mathematics** v. 1, n. 9, pp. 198–216, 1988.

- [44] LIONS, P.-L., “On the Schwarz Alternating Method. I, in: Proceedings of the First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations”, **Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, Ecole Nationale Des Ponts Et Chaussees, Paris, France**, pp. 1–42, 1988.
- [45] PHILIP, B., BERRILL, M. A. *et al.*, “A parallel multi-domain solution methodology applied to nonlinear thermal transport problems in nuclear fuel pins”, **Journal of Computational Physics** v. 286, pp. 143–171, 2015.
- [46] PANDEY, K., MAHESH, M., “Determination of Temperature Distribution in a Cylindrical Nuclear Fuel Rod – a Mathematical Approach”, **International Journal of Innovation, Management and Technology** v. 1, pp. 464–465, Mai. 2010.
- [47] FARHA, F. I., SAHADATH, M. H., NISHAT, S. H., “Thermal-hydraulic analysis of UO<sub>2</sub> and MOX fuel considering different cladding materials at various burnup levels in pressurized water reactor”, **Heat Transfer** v. 50, n. 7, pp. 7215–7231, 2021.
- [48] EATON, J. W., “GNU Octave and reproducible research”, **Journal of Process Control** v. 22, n. 8, pp. 1433–1438, 2012.
- [49] AHRENS, J., CHILDS, H., MORELAND, K., “The Origins of the ParaView and VisIt Scientific Visualization Tools”, **IEEE Computer Graphics and Applications** v. 45, n. 5, pp. 127–137, 2025.

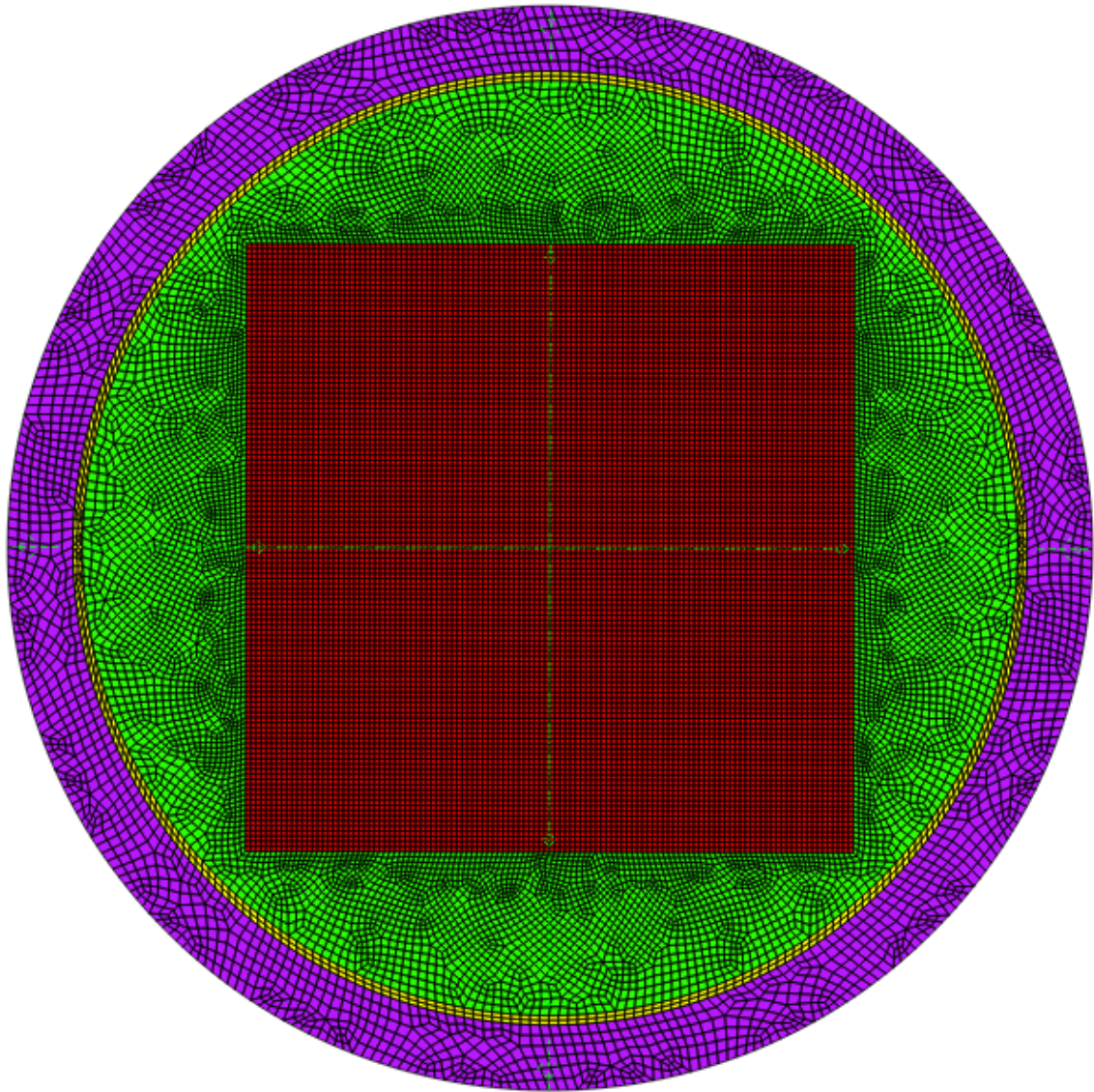
# Apêndice A

## Malhas desenvolvidas no Gmsh

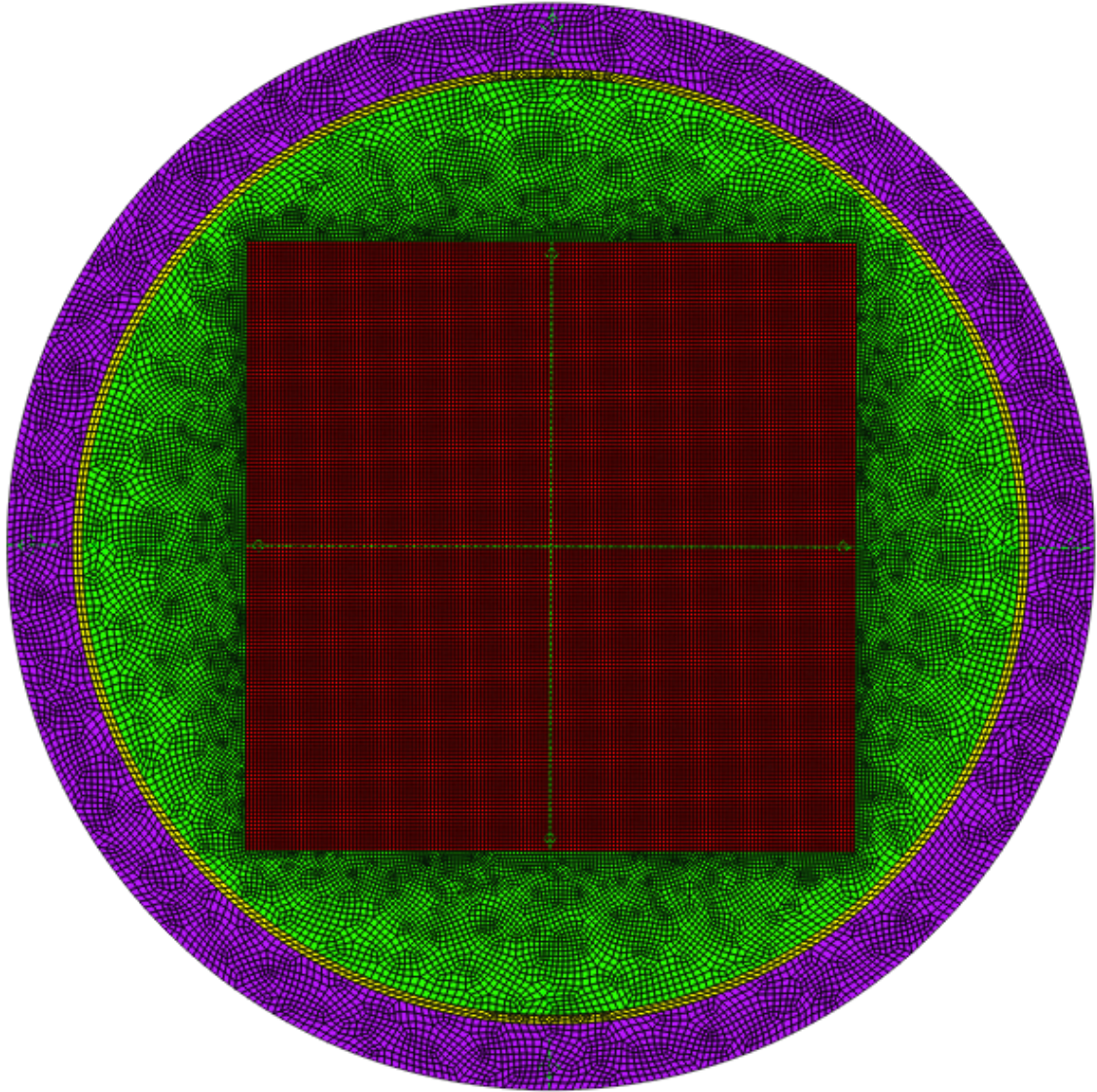
Segue abaixo os diversos refinamentos de malha utilizados nos experimentos numéricos:



**Figura A.1:** Malha com Refino Grosseiro.



**Figura A.2:** Malha com Refino Intermediário.



**Figura A.3:** Malha com Refino Avançado.

# Apêndice B

## Linearização via série de Taylor do termo difusivo

Segue abaixo a demonstração matemática do processo de linearização do termo de difusão via série de Taylor com truncamento de ordem 2. Esta linearização é o procedimento matemático aplicado de forma computacional para o MEF e MDF, aproximando problemas não lineares para linear.

$$k(T^{n+1}) = k(T^n) + \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) + O(T^{n+1} - T^n) \quad (\text{B.1})$$

Multiplicando ambos os lados por  $\nabla T^{n+1}$  e retirando o termo de truncamento  $O(T^{n+1} - T^n)$ .

$$k(T^{n+1}) \cdot \nabla T^{n+1} = k(T^n) \cdot \nabla T^{n+1} + \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot \nabla T^{n+1} \quad (\text{B.2})$$

Desenvolvendo o termo  $\frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot \nabla T^{n+1}$  temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot \nabla T^{n+1} &= \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot (\nabla T^{n+1} - \nabla T^n) + \\ &\quad \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot (\nabla T^n) \\ \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot \nabla T^{n+1} &\approx \frac{\partial k(T^n)}{\partial T} \cdot (T^{n+1} - T^n) \cdot \nabla T^n \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Por fim

$$k(T^{n+1}).\nabla T^{n+1} \approx k(T^{n+1}).\nabla T^n + \frac{\partial k(T^n)}{\partial T}.(T^{n+1} - T^n).\nabla T^n \quad (\text{B.4})$$