

ft *IntOuto d» Ptaqulsat*

AUTARQUIA ASSOCIADA A UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

CÁLCULO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS BIDIMENSIONAIS COM O CÓDIGO CITATION

ANTONIO BELCHIOR JUNIOR

**Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau
de Mestre em Tecnologia Nuclear.**

**Orientador:
Or. João Manoel Losada Moreira**

**São Paulo
1992**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

CÁLCULO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS BIDIMENSIONAIS COM
O CÓDIGO CITATION

ANTONIO BELCHIOR JUNIOR

Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do grau de Mestre em
Tecnologia Nuclear.

Orientador: Dr. João Manoel Losada Moreira



São Paulo

1992

"Nada podes ensinar a um homem, podes
somente ajudá-lo a descobrir coisas dentro
de sí mesmo."

Galileu Galilei

A meus pais, Antonio e Eliza
E de forma especial a Eliane

AGRADECIMENTOS

À Coordenadoria para Projetos Especiais (COPESP) do Ministério da Marinha, na pessoa de seu Presidente, Dr. Othon Luiz Pinheiro da Silva, pelo fornecimento das instalações, equipamentos e apoio financeiro.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP) na pessoa de seu Superintendente, Dr. Spero Penha Morato, pelo fornecimento das instalações e pelo curso de Pós-Graduação oferecido.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela bolsa de estudos concedida que permitiu a realização deste trabalho. (Processo número 86/2715-8)

Ao Prof. Dr. João Manoel Losada Moreira, meu orientador, agradeço pelo incentivo, dedicação no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Dr. Gilberto Gomes de Andrade, Chefe do Departamento de Sistemas Nucleares da COPESP, pelo suporte concedido.

Ao Prof. Dr. José Messias de Oliveira Neto, Chefe da Divisão de Engenharia de Segurança Nuclear da COPESP, ao Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva, Chefe da Seção de Análise de Acidentes da COPESP. Aos companheiros das divisões que trabalhei, muito particular, Mitsuo, Carlos Roberto, Leda, Mai, Marcelo, Hélio Yoriyaz, Sandra, Roberto Longo, Gaianê, Thadeu, Simone, Maurício, Peter e Adriano.

Ao Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite e ao Prof. Dr. José Rubens Maiorino pela participação como membro da banca examinadora da defesa da dissertação.

Aos professores das disciplinas que cursei: Prof. Dr. Artur José Gonçalves Faya, Profa. Dra. Nanami Kosaka, Prof. Dr. José Rubens Maiorino, Prof. Dr. Horácio Nakata, Prof. Dr. Adimir dos Santos e Prof. Dr. José Antonio Diaz Dieguez, os quais tanto me ensinaram.

Aos amigos Gelson, Lúcia e Maria do Carmo pela apoio no desenvolvimento computacional.

Aos companheiros e amigos que estiveram sempre junto nos principais momentos do mestrado: Alfredo Yuuitiro Abe, Almir Fernandes, Miriam Medeiros da Silva, Fernando Ramos Martins, Marcos Roberto Rossini.

De maneira muito especial à Eliane Leal Dantas pela sua ajuda e compreensão sem as quais não seria possível a realização deste trabalho.

A todos, enfim, que direta e indiretamente contribuíram para a execução deste trabalho.

CÁLCULO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS BIDIMENSIONAIS COM

O CÓDIGO CITATION

ANTONIO BELCHIOR JUNIOR

RESUMO

O código CITATION resolve a equação de difusão de neutrons em multi-grupos de energia pelo método de diferenças finitas, fornecendo o harmônico fundamental de um reator nuclear, ou seja: o fluxo de neutrons. Neste trabalho são apresentados dois métodos de correção no termo fonte via fissão, um deles associado com um esquema de aceleração de convergência por polinômio de Chebyshev, que possibilitam a obtenção de harmônicos de alta ordem com o código CITATION. Os dois métodos foram comparados, analisando-se vantagens e desvantagens de cada um. As implementações foram testadas para problemas com solução analítica. Foram também gerados 15 harmônicos bidimensionais para o reator de pesquisa IEA-R1 e 10 para o reator de potência ANGRA-I, sendo os resultados obtidos apresentados na forma de gráficos e tabelas. O esquema de aceleração de Chebyshev reduziu em mais de 50% o número de iterações requeridas para resolver o mesmo problema sem aceleração para todos os harmônicos calculados.

CALCULATION OF TWO DIMENSIONAL LAMBDA-MODES
THROUGH THE CITATION CODE

ANTONIO BELCHIOR JUNIOR

ABSTRACT

The CITATION code, which solves the multi group diffusion equation by the finite difference method, calculates the fundamental A-mode (harmonic) for nuclear reactors. In this work, two fission source correction methods, one of them associated with Chebyshev polynomial method to accelerate the convergence, are attempted to obtain higher A-modes through the CITATION code. The two methods are compared, their advantages and disadvantages analyzed and verified against analytical solutions. Fifteen two-dimensional A-modes are calculated for the IEA-R1 research reactor and ten for the ANGRA I power reactor. The results are shown in graphics and tables. The Chebyshev acceleration scheme reduced more than 50% the number of outer-iterations required to solve the same problem without acceleration for all A-modes.

LISTA DE FIGURAS

Figura 6.1	- Geometria e Condições de Contorno Utilizadas no Caso 1	29
Figura 6.2	- Geometria e Condições de Contorno Utilizadas no Caso 2	31
Figura 6.3	- 9 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I Calculado sem a Aceleração de Convergência	35
Figura 6.4	- 10 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I Calculado sem a Aceleração de Convergência	36
Figura 7.1	- Representação Esquemática do Reator IEA-R1	39
Figura 7.2	- Harmônico Fundamental Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	40
Figura 7.3	- 1 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	41
Figura 7.4	- 2 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	42
Figura 7.5	- 3 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	43
Figura 7.6	- 4 ^o . Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	44
Figura 7.7	- 5 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	45
Figura 7.8	- 6 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	46
Figura 7.9	- 7 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	47
Figura 7.10	- 8 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	48
Figura 7.11	- 9 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	49
Figura 7.12	- 10 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	50
Figura 7.13	- 11 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	51
Figura 7.14	- 12 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	52
Figura 7.15	- 13 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	53
Figura 7.16	- 14 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	54
Figura 7.17	- 15 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1	55
Figura 7.18	- Representação Esquemática do Reator Angra I	56
Figura 7.19	- Harmônico Fundamental Direto e Adjunto para o Reator Angra I	58
Figura 7.20	- 1 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	59
Figura 7.21	- 2 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	60
Figura 7.22	- 3 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	61
Figura 7.23	- 4 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	62
Figura 7.24	- 5 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	63
Figura 7.25	- 6 ^o - Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	64
Figura 7.26	- 7 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	65
Figura 7.27	- 8 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	66
Figura 7.28	- 9 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	67
Figura 7.29	- 10 ^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I	68
Figura A.3.1-	Representação no Plano X-Y do Espaço Tridimensional x-y-z.	87
Figura A.3.2-	Critério Utilizado para Decidir sobre a Visibilidade das Curvas a Serem Traçadas	

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Auto-funções de um reator homogêneo unidimensional	9
Tabela 6.1 - Seções de Choque Representativas de um PWR para o Caso 1	29
Tabela 6.2 - Auto-valores Obtidos para o Caso 1	30
Tabela 6.3 - Seções de Choque Utilizadas no Caso 2.	31
Tabela 6.4 - Auto-valores Obtidos para o Caso 2	32
Tabela 6.5 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 200 iterações)	34
Tabela 6.6 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 600 iterações)	34
Tabela 7.1 - Auto-valores para o Reator IEAR-R1	38
Tabela 7.2 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 600 iterações)	57
Tabela A2.1- Subrotinas do código CITATION	80

SUMÁRIO

	pag.
RESUMO	iv
ABSTRACT	v
LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	vii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - HARMÔNICOS ESTÁTICOS	4
2.1 - A Equação de Difusão de Neutrons	4
2.2 - "cj-modes"	5
2.3 - "X-modes"	7
2.4 - Soluções Analíticas	7
CAPÍTULO 3 - SOLUÇÕES NUMÉRICAS	10
3.1 - Método de Householder-Hesenberg	10
3.2 - Método de Síntese	10
3.3 - Método da Potência	11
3.3.1 - Método de Deslocamento de Auto-Valores	12
3.3.2 - Método de Eliminação de Harmônicos Inferiores	13
CAPÍTULO 4 - MÉTODOS DE ELIMINAÇÃO DE HARMÔNICOS INFERIORES	14
4.1 - Método 1: Matriz de Correção	14
4.2 - Método 2: Utilizando a Relação de Ortogonalidade	18
4.2.1 - Aceleração de Convergência do Método 2	21
CAPÍTULO 5 - IMPLEMENTAÇÕES NO CÓDIGO CITATION	23
5.1 - Implementação do Método 1	24
5.2 - Implementação do Método 2	25
5.2.1 - Convergência e Aceleração	26
5.2.2 - Convergência de Harmônicos Degenerados	27
CAPÍTULO 6 - TESTES DAS IMPLEMENTAÇÕES NO PROGRAMA CITATION	28
6.1 - Caso 1: Reator Hipotético Unidimensional Monoenergético	29
6.2 - Caso 2: Reator Hipotético Bidimensional Mono-Energético	30
6.3 - Caso 3: Reator Angra I	32
CAPÍTULO 7 - HARMÔNICOS DOS REATORES IEA-R1 E ANGRA I	37
7.1 - Reator IEA-R1 - Representação Bidimensional	37
7.2 - Reator Angra I - Representação Bidimensional	56
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÃO	69
BIBLIOGRAFIA	71
APÊNDICE 1 - RESOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO	76
APÊNDICE 2 - ESTUDO DO CÓDIGO CITATION	80
APÊNDICE 3 - MÉTODO PARA CONFECÇÃO DE GRÁFICOS EM PERSPECTIVA TRIDIMENSIONAL	86

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

No início do desenvolvimento da Tecnologia de Reatores Nucleares, muitos pesquisadores de outras áreas, tais como: Física Nuclear e Mecânica Quântica migraram para esta nova área em ascensão. Estes pesquisadores possuíam uma enorme bagagem na resolução da equação Schroedinger. Num paralelo entre esta equação e a equação de difusão de neutrons, foi introduzido o conceito de auto-funções e auto-valores na Física de Reatores. Antes do aparecimento dos computadores, a maioria dos cálculos efetuados eram analíticos, dando-se grande ênfase à teoria de perturbação e à expansão em auto-funções.

Com o advento dos computadores, cada vez mais os cálculos analíticos foram sendo substituídos pelo processamento numérico. Nesta época surgiram inúmeros programas computacionais e o uso de auto-funções (harmônicos estáticos) foi sendo restringido a situações mais específicas, como por exemplo, problemas que exigem processamento em tempo real ou um tempo de processamento muito elevado.

As aplicações mais comuns de harmônicos estão relacionadas com a teoria de perturbação de alta ordem [10,21,22,33,39,41], onde harmônicos estáticos da equação de difusão de um problema referência são utilizados para expandir a solução de um problema perturbado. Existem métodos alternativos de teoria de perturbação [14,42,43] que utilizam harmônicos estáticos do operador de difusão ao invés dos da equação de difusão.

Um cálculo simplesmente numérico para se determinar problemas de oscilação espacial de potência induzida pela variação da concentração de xenônio envolveria a resolução de um grande número de problemas de difusão com dependência temporal. É demonstrado teoricamente em [44] que esta oscilação está relacionada com a separação entre os auto-valores correspondentes ao harmônico fundamental e primeiro harmônico. Em [4] é proposta uma maneira experimental de se calcular esta separação entre auto-valores. O cálculo numérico de harmônicos estáticos pode fornecer esta separação.

Harmônicos estáticos podem ainda ser usados na eliminação de efeitos espaciais em medidas de fluxo neutrônico em transientes [34-36]. A função forma do fluxo neutrônico é expandida em termos de harmônicos estáticos, ficando o problema reduzido à determinação dos coeficientes, os quais obedecem equações do tipo às de cinética pontual.

A análise de transientes neutrônicos com dependência espaço-temporal pode ser

analisada utilizando equações de cinética espacial com a parte espacial sendo representada por uma expansão em harmônicos estáticos [32].

Uma outra aplicação de particular interesse é o mapeamento "on-line" de fluxo neutrônico [11,27,31]. Em reatores de potência, a predição do perfil de fluxo a partir de sinais de detectores "in-core" é um aspecto importante no controle destes. Uma expansão em harmônicos estáticos, juntamente com alguns outros modos característicos do estado de operação do reator, pode ser usada para interpolar os sinais destes detectores através do método de mínimos quadrados. Encontra-se em desenvolvimento na COPESP-IPEN um sistema para monitoração "on-line" da distribuição de potência em reatores de pequeno porte [52] que deverá utilizar os harmônicos estáticos calculados neste trabalho.

Em geral, ao se resolver a equação de difusão de neutrons sem dependência temporal procura-se determinar apenas o harmônico fundamental e seu auto-valor associado que corresponde respectivamente ao fluxo de neutrons e ao fator de multiplicação efetivo. Entretanto, o cálculo de harmônicos estáticos de ordem superior da equação difusão tem sido abordado por diversos autores [1,8,9,14,17,22,32,34,40,41,47,53] utilizando métodos bastante distintos. A. K. Kulkarni [31] calcula harmônicos estáticos tridimensionais utilizando a síntese de harmônicos unidimensionais que por sua vez são sintetizados a partir de funções de Helmholtz.

C. Drumm [14] calcula harmônicos unidimensionais transformando o problema de condições de contorno (que é a equação de difusão sem dependência temporal) em um problema de condições iniciais. São fornecidas uma estimativa do auto-valor e duas condições (fluxo e corrente neutrônica) para um dos contornos. O fluxo evolui através da equação de difusão até atingir o outro contorno. A estimativa do auto-valor é variada e o problema recalculado até que seja atingida a condição correta no outro contorno. Nesta situação, harmônico e respectivo auto-valor foram determinados.

Os métodos de obtenção de harmônicos estáticos mais comuns são os métodos de correção da fonte via fissão associados ao método iterativo da potência. O método da potência converge para o auto-vetor de maior auto-valor existente na fonte via fissão escolhida para iniciar o processo iterativo. Aplicando-se correções para eliminar os componentes de harmônicos inferiores, pode-se obter os harmônicos de ordem superior através do método da potência. Basicamente são dois os métodos de correção utilizados, um deles faz estas correções através das relações de ortogonalidade [1,9,34,40,47] e o outro utilizando a equação de auto-valores [22,41]. Esta classe de métodos foi a escolhida para implementação no código CITATION, pois este resolve a equação de difusão pelo método iterativo da potência. A implementação destes métodos de correção na fonte via fissão viabilizaria a obtenção de harmônicos estáticos de ordem superior através deste código, que é o principal objetivo deste trabalho de mestrado.

No próximo capítulo são apresentados dois tipos de problemas de auto-valores surgidos quando da eliminação da dependência temporal da equação de difusão de neutrons, os "w-modes" e os "A-modes" sendo também apresentadas algumas soluções analíticas para estes dois problemas. Métodos de solução numérica para o cálculo de "A-modes" são brevemente apresentados no Capítulo 3. São apresentados no Capítulo 4, os métodos de correção na fonte via fissão para obtenção de harmônicos de ordem superior implementados no código CITATION. É apresentado ainda neste quarto capítulo, um método de aceleração de convergência.

A implementação de ambos os métodos é apresentada no Capítulo 5. No Capítulo 6, estas implementações são testadas para três problemas bastante distintos. Por final, no Capítulo 7 são apresentados 15 harmônicos estáticos de ordem superior calculados para o reator IEA-R1 e 10 para o reator Angra I.

Paralelamente, foi desenvolvido um programa para confecção de gráficos tridimensionais em perspectiva. Este programa tem por objetivo facilitar a visualização dos harmônicos calculados com o código CITATION.

CAPÍTULO 2

HARMÔNICOS ESTÁTICOS

Grande parte dos problemas em física de reatores podem ser resolvidos pela Equação de Difusão de Neutrons ou pela Equação de Transporte de Neutrons, geralmente utilizando uma aproximação estática onde a variável tempo é omitida. A eliminação da variável tempo transforma estas equações em problemas de auto-valores, nos quais o harmônico fundamental está estritamente relacionado com o fluxo de neutrons do sistema e o auto-valor correspondente está relacionado com a criticalidade do sistema. Neste trabalho de mestrado foram considerados os problemas de auto-valores resultantes da Equação de Difusão de Neutrons, sendo assim, no decorrer deste capítulo serão apresentados a Equação de Difusão de Neutrons e os problemas de auto-valores dela resultantes [15].

2.1 - A Equação de Difusão de Neutrons com Dependência Temporal

A Equação de Difusão de Neutrons é uma equação de continuidade, ou seja, ela garante o balanço entre ganho e perda de neutrons em um determinado volume de fase envolvendo as variáveis espaço e energia. Em uma forma bastante geral esta equação pode ser escrita como:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(r, E, t)}{\partial t} + \nabla \cdot D(r, E) \nabla \phi(r, E) + \Sigma_a(r, E) \phi(r, E, t) = \int_0^\infty \Sigma_s(r, E') \phi(r, E', t) dE' + S(r, E, t) \quad (2.1)$$

$$\frac{dE'}{dE} \int_0^\infty \Sigma_s(r, E' \rightarrow E) \phi(r, E', t) dE' + \Sigma_f(r, E) \phi(r, E, t) + S(r, E, t),$$

onde os termos utilizados seguem a notação usualmente encontrada na literatura.

A Eq. (2.1) sozinha não é suficiente para determinar o fluxo de neutrons no interior do volume. Para a definição completa do fluxo de neutrons, necessita-se de condições de contorno e de condições iniciais. As condições assumidas são:

a) condições de contorno homogêneas

$$\phi(r, E, t) + \frac{D(r, E)}{R} \nabla \cdot \nabla \phi(r, E, t) = 0, \quad (2.2)$$

onde r_i pertence ao contorno do volume e n é a direção perpendicular ao contorno;

b) condição inicial

$$\phi(r, E, 0) = \phi_0(r, E). \quad (2.3)$$

Considerando apenas casos onde a fonte de neutrons seja devida exclusivamente a fissões, ou seja:

$$S(r, E, t) = 0. \quad (2.4)$$

Para simplificar a notação a Eq. (2.1) pode ser escrita em termos de operadores, assumindo a forma:

$$\frac{1}{w(E)} \frac{\partial \phi(r, E, t)}{\partial t} = [F(r, E) - L(r, E)] \phi(r, E, t), \quad (2.5)$$

onde: $F(r, E) = \int dE' \Sigma_f(r, E')$, e

$$L(r, E) = -\nabla \cdot D(r, E) \nabla + \Sigma_a(r, E) - \int dE' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E).$$

A representação da Equação de Difusão de Neutrons apresentada acima não é conveniente para sua resolução numérica, pois requer a discretização das variáveis espaço, tempo e energia. Para discretizar a variável espacial utiliza-se comumente a representação em diferenças finitas e para a parte energética, a formulação em multi-grupos de energia. Com isto, os operadores $L(r, E)$ e $M(r, E)$ se transformam em matrizes e a solução da equação se transforma em um vetor, conforme pode ser verificado no Apêndice 1. Na maioria das vezes, a variável tempo é omitida da equação mediante considerações que transformam a Equação de Difusão com dependência temporal em problemas de auto-valores, dentre os quais são destacados os "A-modes" e os "w-modes" que serão abordados a seguir.

2.2 - "w-modes".

Os "a-modes" são auto-funções que surgem quando a Equação de Difusão é resolvida utilizando separação de variáveis, ou seja, fatora-se:

$$\phi(r,E,t) = \phi(r,E) T(t). \quad (2.6)$$

Substituindo a Eq. (2.6) na Eq. (2.5) e agrupando em um membro os termos com dependência em (t) e no outro os termos com dependência em (r,E) verifica-se que o lado esquerdo é função apenas do tempo e o lado direito apenas da posição e da energia. Para satisfazer a igualdade ambos os membros desta devem ser iguais a uma constante, no caso w . Com isto, são obtidas as equações:

$$\frac{d^3 T(t)}{dt^3} = w T(t) \quad (2.7)$$

e

$$[L(E) \phi(r) - L(r,E) \phi(r,E)] = -\lambda(r,E) \phi(r,E). \quad (2.8)$$

Quando imposto que a solução $\phi(r,E)$ tem que satisfazer as condições de contorno dadas pela Eq. (2.2), a Eq. (2.8) possui solução apenas para determinados valores de w , os quais são os auto-valores desta equação. As soluções $\phi(r,E)$ associadas a estes auto-valores são os harmônicos estáticos chamados "w-modes". A solução geral da Eq. (2.8) é uma combinação linear dos vários "w-modes", dada pela expressão:

$$\phi(r,E,t) = \sum_n A_n e^{w_n t} \phi_n(r,E), \quad (2.9)$$

onde os coeficientes A_n 's são obtidos utilizando a condição inicial dada pela Eq. (2.3), de forma que:

$$\sum_n A_n \phi_n(r,E) = \phi_0(r,E). \quad (2.10)$$

As auto-funções $\phi_n(r,E)$ formam um conjunto completo [23,24] e podem ser utilizadas para expandir qualquer função $\phi(r,E)$ no volume considerado.

A Eq. (2.8) constitui-se na equação geral para o cálculo de "u-modes". Ela pode ser interpretada como uma equação de difusão em estado estacionário, onde a condição de equilíbrio é atingida mediante a introdução de um absorvedor com seção de choque do tipo $1/w$, ou seja: $L(E) = w A_s(E)$. No caso de um reator em condição de criticalidade ($\lambda = 0$), o auto-valor do "u-mode" fundamental w_0 é igual a zero. Este fato dificulta a obtenção dos harmônicos por métodos numéricos, como por exemplo o método da potência citado em detalhes no Apêndice 1. Esta é uma das principais razões para que estas auto-funções, embora sejam bastante adequadas para expandir o fluxo de neutrons em situações de transientes, não tenham sido amplamente utilizadas em física de reatores. Os

"À-modes" são auto-funções que têm encontrado aplicações mais correntes, e serão tratados a seguir.

2.3 - "X-modes"

Os "À-modes" são obtidos quando, para eliminar a variação temporal da Eq. (2.5), o balanço entre produção e destruição de neutrons é obtido por uma normalização da produção de neutrons por um fator A. Com isto, a Eq. (2.5) pode ser reescrita em uma forma independente do tempo:

$$[L_{\infty}(r,E) - \frac{1}{A} * (E) F_{\infty}(f)] \ll(r,E) = 0. \quad (2.11)$$

Quando se utiliza "A modes" para expandir a dependência temporal do fluxo de neutrons, a expressão obtida não é tão simples como a apresentada na Eq. (2.9) devido a artificialidade da introdução do auto-valor A. A dependência temporal dos coeficientes da expansão não é necessariamente exponencial, sendo dada pela solução de equações diferenciais do tipo da equação de cinética pontual.

Em geral, os "A-modes" e os "w-modes" são distintos. Entretanto em algumas situações especiais ambos coincidem, como por exemplo no caso de um reator homogêneo. Como será verificado mais adiante neste capítulo. Outra situação onde ocorre esta coincidência é o caso de um reator crítico, onde ambos os harmônicos fundamentais são idênticos e correspondem ao comportamento assintótico do fluxo de neutrons. Para ilustrar o que são estas auto-funções, são fornecidos a seguir algumas soluções analíticas para estes problemas de auto-valores.

2.4 - Soluções Analíticas

O cálculo analítico de harmônicos estáticos só é possível para problemas bastante simples, geralmente para geometria unidimensional ou para problemas homogêneos. Para alguns problemas bi e tridimensionais pouco heterogêneos é ainda possível obter soluções analíticas aproximadas utilizando a síntese de harmônicos unidimensionais

Considerando como primeiro problema, um reator unidimensional homogêneo com geometria cartesiana, esférica ou cilíndrica. Admitindo que o reator tenha largura L e esteja sujeito às condições de contorno:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.12)$$

$$\langle p(L) = 0. \tag{2.13}$$

Considerando apenas 1 grupo de energia de neutrons a Eq. (2.8) para os "w-modes" é escrita na forma:

$$D \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x^n} \frac{d}{dx} x^n \psi \right) + \lambda \psi = -\frac{1}{A} \psi \tag{2.14}$$

e a Eq. (2.11) para os "A-modes" assume a forma:

$$D \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x^n} \frac{d}{dx} x^n \psi \right) + \lambda \psi = 0, \tag{2.15}$$

O para geometria cartesiana

onde $n = \begin{cases} 1 & \text{para geometria cilíndrica} \\ 2 & \text{para geometria esférica} \end{cases}$

As Eqs.(2.14) e (2.15) podem ser rearranjadas de modo a terem a mesma expressão:

$$D \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x^n} \frac{d}{dx} x^n \psi \right) + B \psi = 0, \tag{2.16}$$

sendo os auto-valores w's e A's expressos em função do parâmetro B (comumente chamado de "buckling"), dados por:

$$w = M \frac{Z}{a} + D B - \frac{vZ}{f} \tag{2.17}$$

$$A = \frac{1}{Z + D B^2} \tag{2.18}$$

Deve-se notar que para este problema, as auto-funções de ambos os problemas de auto-valores ("w-modes" e "A-modes") coincidem, entretanto, os auto-valores w's e A's são diferentes. Na Tabela 2-1 são apresentadas as auto-funções para as diferentes geometrias.

Tabela 2.1 - Auto-funções de um reator homogêneo unidimensional

Geometria	B ("buckling")		Harmônicos
cartesiana	$\frac{(2m+1)\pi}{2L}$	$m = 0, 1, 2, \dots$	$\phi_m = \cos(B_m x)$
cilíndrica	$\frac{m\pi}{L}$	$m = 0, 1, 2, \dots$	$\phi_m = J_0(B_m x)$
esférica	$\frac{m\pi}{L}$	$m = 1, 2, \dots$	$\phi_m = x^{-1} \text{sen}(B_m x)$

CAPÍTULO 3

SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Vários métodos numéricos têm sido aplicados no cálculo de harmônicos estáticos [1,9,14,17,22,31,40,41,47,53] da equação de difusão, alguns são métodos praticamente analíticos que, no entanto, precisam de um processamento computacional [31]. O método numérico mais utilizado é o método da potência, o qual calcula o harmônico fundamental e está presente na maioria dos códigos computacionais para resolução da equação de difusão. Algumas técnicas [41,45,48] aplicadas conjuntamente com o método da potência permitem a obtenção de harmônicos de ordem superior. A seguir são comentados os principais métodos de obtenção de harmônicos de ordem superior.

3.1 - Método de Householder-Hesenberg

O método Householder-Hesenberg está baseado no fato que transformações de similaridade não alteram os auto-valores de uma matriz. O método de Householder-Hesenberg consiste em aplicar de forma ordenada sucessivas transformações de similaridade até que uma matriz diagonal seja obtida. Os elementos desta matriz diagonal, são os auto-valores do problema e as colunas do produto das matrizes de transformação de similaridade, são os auto-vetores.

Por este método, todos os auto-vetores e auto-valores da matriz são obtidos. Entretanto, a ordem das matrizes envolvidas na equação de difusão em diferenças finitas torna inviável a utilização deste método. Em geral, uma transformação de similaridade aplicada zera um elemento da matriz, entretanto, esta transformação acaba introduzindo novos valores em elementos que já haviam sido zerados. Portanto, devem ser aplicadas mais que uma matriz de transformação de similaridade para cada elemento da matriz a ser zerado. Uma matriz para um problema de difusão bidimensional típico tem dimensão 10000 x 10000 e portanto, mais de 100 milhões de transformações de similaridade deveriam ser efetuadas.

3.2 - Método de Síntese

O método de síntese consiste em escolher um conjunto de funções ϕ_n 's, de modo que os harmônicos de ordem superior possam ser escritos como uma combinação destas. A. K. Kulkarni apresenta em [31] o método de síntese para calcular harmônicos tridimensionais da equação de difusão utilizado no código Mónica. Neste método, os harmônicos estáticos

tridimensionais são escritos como uma combinação linear de funções também tridimensionais ψ_n 's. Os ψ_n 's $P^{(1)} \dots P^{(G)} > \dots > P^{(G)}$ Peduto de harmônicos unidimensionais, um para cada uma das direções. O cálculo dos harmônicos unidimensionais também é feito através de uma combinação de funções de Helmholtz.

A equação para os coeficientes da expansão dos harmônicos sintetizados em termos das funções ψ_n 's é obtida substituindo a expansão em ψ_n 's do harmônico sintetizado na equação de difusão para os λ -modes (Eq. (2.11)), multiplicando por uma das funções ψ_n 's e integrando no volume, obtém-se uma equação envolvendo os coeficientes da expansão em ψ_n 's e as integrais dos termos da equação de difusão. Repetindo este processo para todas as funções ψ_n 's, obtém-se o sistema de equações expresso por:

$$A a = - \frac{1}{A} B a, \tag{3.1}$$

onde A e B são matrizes $N \times G \times N \times G$ contendo as integrais dos termos da equação, N é o número de auto-funções e G o número de grupos de energia e a é o vetor contendo os coeficientes da expansão.

Nota-se que neste caso, os coeficientes da expansão obedecem a uma equação de auto-valores na mesma forma que os harmônicos estáticos.

3.3 - Método da Potência

Considerando-se o problema de auto-valores:

$$L \langle \psi_m = M \langle \psi_m, \tag{3.2}$$

o método da potência, apresentado com mais detalhes no Apêndice 1, pode ser utilizado para se calcular o harmônico de maior auto-valor contido em um vetor $\psi^{(0)}$ escolhido para iniciar o processo iterativo. Este vetor possui componentes de diversos harmônicos, sendo importante a existência de uma componente referente ao harmônico que se deseja obter. O processo iterativo consiste em multiplicar sucessivamente o vetor inicial pela matriz que define o problema de auto-valores dividindo o novo vetor obtido por uma estimativa do auto-valor, com isto, após um número J suficientemente grande de iterações, o vetor obtido será:

método da potência, pois quanto mais próximo A' estiver de A_m , maior será A_m em relação aos demais auto-valores de $L^{-1}M$ e, portanto, maior será a dominância do componente devido ao auto-vetor ζ_m a cada iteração. É importante lembrar que quando A é exatamente igual a A_m , a matriz h é singular. Portanto não é possível a utilização do método da potência nesta situação particular, pois não existe a inversa da matriz L .

Embora as iterações externas sejam aceleradas no método de Wielandt pela escolha de um A' próximo ao auto-valor do auto-vetor desejado e os harmônicos possam ser obtidos apenas conhecendo-se uma estimativa do espectro de auto-valores, dois pontos negativos podem ser destacados na utilização do método de Wielandt para cálculo de harmônicos de ordem superior. O primeiro é que, quanto mais próximo A' estiver de A_m , maior será o esforço para se convergir as iterações internas, pois a matriz L estará muito próxima de não ter inversa. Em segundo lugar, no caso da existência de auto-vetores degenerados, o método de Wielandt permite a convergência para uma combinação linear destes, não garantindo a obtenção de todos estes separadamente. A escolha de um novo vetor $\hat{\zeta}^{(k)}$ diferente do anterior, poderia fornecer um auto-vetor diferente para a mesma escolha de A' , mas não é assegurado pelo método de Wielandt que este seja ortogonal ao harmônico já obtido, e além disto este método não fornece nenhuma indicação de quando se trata de um problema de degenerescência de auto-valores.

3.3.2 - Método de Eliminação de Harmônicos Inferiores

Como foi visto, no método da potência o processo iterativo converge para o auto-vetor de maior auto-valor contido no vetor $\langle \xi^{(0)} \rangle$ utilizado no início das iterações. O método de eliminação de harmônicos inferiores tem como base garantir que no vetor $\hat{\zeta}^{(k)}$ não existam componentes de harmônicos que possuam auto-valor maior que o harmônico desejado e que, além disto, este último esteja presente no vetor $\xi^{(0)}$. A partir de um vetor $0_{-}^{(0)}$ escolhido arbitrariamente tendo como único requisito de conter um componente do harmônico desejado, os componentes dos harmônicos com auto-valor maior ao do desejado são eliminados através de correções, tornando o vetor $\hat{\zeta}^{(k)}$ adequado para a obtenção do harmônico desejado através do método da potência.

Dois métodos foram estudados e implementados no código CITATION, o primeiro consiste em aplicar uma matriz de correção C_m , cuja construção depende do conhecimento do auto-valor A_m correspondente ao harmônico a ser eliminado. O segundo, utiliza a relação de ortogonalidade para efetuar esta correção. Obtem-se o coeficiente da expansão de $\langle \xi^{(0)} \rangle$ em harmônicos aplicando-se a relação de ortogonalidade entre harmônicos, e subtrai-se este componente. Ambos os métodos requerem que os harmônicos de ordem inferior ao desejado tenham sido calculados a priori. Estes métodos de eliminação de harmônicos inferiores são apresentados no capítulo seguinte.

MÉTODOS DE ELIMINAÇÃO DE HARMÔNICOS INFERIORES

No método da potência, o processo iterativo converge para o maior auto-valor contido no vetor escolhido para inicializar as iterações. A princípio, para obtenção de harmônicos de ordem superior, basta escolher um vetor que não contenha componentes dos harmônicos inferiores ao desejado para se iniciar as iterações pelo método da potência. Uma técnica bastante eficiente para obtenção deste vetor é, a partir de uma escolha arbitrária (que deve, no entanto, conter um componente relativo ao harmônico desejado), eliminar deste vetor os componentes referentes aos harmônicos de ordem inferior ao desejado.

Dois métodos para eliminação dos harmônicos inferiores foram estudados: no primeiro, esta eliminação é feita através de uma matriz correção e no segundo, utilizando a relação de ortogonalidade.

4.1 - Método 1 - Matriz de Correção

O Método 1 foi originalmente proposto por Saito e Katsuragi em [41], onde são calculados harmônicos da equação de difusão unidimensional em multi-grupos de energia.

Neste método os harmônicos são calculados em ordem decrescente de auto-valores. Primeiro calcula-se o harmônico fundamental através do método da potência. Uma vez obtido este harmônico, escolhe-se um novo vetor para iniciar o método iterativo da potência para cálculo do segundo harmônico, eliminando-se deste o componente do primeiro harmônico.

No método da potência, utiliza-se o processo iterativo:

$$L \mathbf{k}_n^{(i)} = \frac{1}{u^{(i-1)}} M \mathbf{k}_n^{(i-1)}, \quad (4.1)$$

onde i representa o número da iteração, n o número do harmônico que está sendo calculado, L e M as matrizes do problema de auto-valor e $\mathbf{k}^{(i)}$ e $u^{(i)}$ respectivamente, as estimativas do auto-vetor e auto-valor na i -ésima iteração.

Saito e Katsuragi propuseram que no cálculo do i -harmônico, o processo iterativo fosse iniciado na forma:

$$\mathbf{L} \mathbf{u} = \frac{1}{k} \mathbf{L} \mathbf{M} \quad (4.2)$$

Considerando a expansão de $\mathbf{u}^{(0)}$ em termos dos harmônicos estáticos:

$$\mathbf{u}^{(0)} = \sum_n a_n \mathbf{e}_n, \quad (4.3)$$

e a equação de auto-valores

$$\mathbf{L} \mathbf{e}_n = \frac{1}{k_n} \mathbf{M} \mathbf{e}_n, \quad (4.4)$$

a Eq. (4.2) pode ser reescrita como:

$$\mathbf{u}^{(0)} = \sum_n a_n \mathbf{e}_n \quad \mathbf{L} \mathbf{u}^{(0)} = \frac{1}{k} \mathbf{M} \mathbf{u}^{(0)}, \quad (4.5)$$

A Eq. (4.5) pode ser rearranjada para uma forma semelhante à Eq. (4.1)

$$\mathbf{L} \mathbf{u}^{(0)} = \frac{1}{k} \mathbf{M} \mathbf{u}^{(0)}, \quad (4.6)$$

onde:

$$\mathbf{L} \mathbf{u}^{(0)} = \frac{1}{k} \mathbf{M} \mathbf{u}^{(0)}$$

Nota-se pela Eq. (4.6) que iniciar o método da potência conforme descrito na Eq. (4.2) é equivalente a iniciar o método da potência convencional (Eq. 4.1) com um vetor $\mathbf{u}^{(0)}$ que não contém componente do harmônico fundamental (\mathbf{e}_1). É importante ressaltar que para se fazer a correção, só é necessário o conhecimento do auto-valor k_1 .

O trabalho de Saito e Katsuragi apresenta um desenvolvimento para o cálculo do segundo harmônico, onde o processo iterativo é iniciado da forma:

$$\mathbf{L} \mathbf{u}^{(2)} = \frac{1}{k_2} \left[\mathbf{L} \mathbf{u}^{(1)} - \frac{1}{k_1} \mathbf{M} \mathbf{u}^{(1)} \right] = \frac{1}{k_2} \left[\mathbf{L} \mathbf{u}^{(1)} - \frac{1}{k_1} \mathbf{M} \mathbf{u}^{(1)} \right] \quad (4.7)$$

$$\mathbf{e}(0) \quad (4.17)$$

Com isso, iniciando o processo iterativo dado pela Eq. (4.13) com $\mathbf{S}_j^{(0)}$, este deve convergir para o n-ésimo harmônico.

Na prática não é suficiente efetuar a eliminação dos componentes dos harmônicos já calculados apenas no início do processo iterativo, pois durante o processo numérico de resolução, erros de arredondamento e truncamento são capazes de introduzir estas componentes novamente. As correções devem ser efetuadas com uma certa frequência para eliminar esta contaminação por harmônicos inferiores. Para realizar as correções após a i-ésima iteração basta aplicar as matrizes C^i ao vetor $\mathbf{S}_j^{(i)}$. A frequência com que esta correção é efetuada é um fator muito importante, pois nota-se que para se eliminar o componente referente a um harmônico, os componentes dos harmônicos vizinhos (auto-valores próximos) são também parcialmente eliminados. Este fato pode impedir a aplicação do método para problemas com auto-valores muito próximos, ou para problemas onde a correção tenha que ser muito frequente, pois poderiam ser eliminados os harmônicos com auto-valores próximos ao de um harmônico já calculado juntamente com as correções para eliminar este harmônico.

4.2 - Método 2 - Relação de Ortogonalidade

A Eq. (2.11) cuja representação matricial em diferenças finitas é apresentada na Eq. (A1.4) define a equação de auto-valores para o cálculo de harmônicos estáticos da equação de difusão (A-modes). O problema adjunto na forma matricial é definido como:

$$L^T \mathbf{e}^* = -F^T \mathbf{e}^* \quad (4.18)$$

onde as matrizes L , F e \mathbf{x} seguem a representação fornecida no Apêndice 1 e o \mathbf{T} superescrito é utilizado para representar a matriz transposta.

Definidos desta maneira, os harmônicos estáticos do problema adjunto obedecem a relação de ortogonalidade com os harmônicos do problema direto definido pelo produto de matrizes:

$$\langle \mathbf{e}_m^T, \mathbf{x} F^T \mathbf{e}_n \rangle = (\mathbf{e}_m^*)^T \mathbf{x} F^T \mathbf{e}_n = 0, \quad m \neq n. \quad (4.19)$$

Da mesma forma que no Apêndice 1, o problema de auto-valores é reescrito em função da fonte via fissão S , o problema adjunto pode ser reescrito em termos da função

importância de neutrons:

$$I = T^{-1} F \quad (4.20)$$

tendo a forma:

$$I = -g^T L \quad (4.21)$$

onde $Q^T = X^T (L^T)^{-1} F$

Considerando a Eq. (4.20) e a Eq. (4.21), a relação de ortogonalidade da Eq. (4.19) pode ser reescrita como:

$$\langle I_m, S_n \rangle = \int r S_n = 0, \quad m \neq n. \quad (4.22)$$

A Eq. (4.22) é a base para a eliminação da contribuição de harmônicos inferiores neste método apresentado.

Considerando a completeza [23,24] do conjunto de auto-funções S_n e J_m , qualquer vetor $S_n^{(0)}$ escolhido para se iniciar o processo iterativo para o cálculo do n-ésimo harmônico pode ser escrito como:

$$S_j^{(0)} = \sum a^{(0)} S_j. \quad (4.23)$$

Calculando o produto $\langle I_m, S^{(0)} \rangle$, e utilizando-se a relação de ortogonalidade dada pela Eq. (4.22), obtêm-se:

$$\langle I_m, S^{(0)} \rangle = a_m \langle I_m, S_m \rangle. \quad (4.24)$$

Uma vez conhecido os auto-vetores I_m e S_m , utilizando-se a Eq. (4.24) calcula-se os coeficientes a_m e a eliminação da contribuição do m-ésimo harmônico da fonte $S^{(0)}$, obtendo o vetor $S_m^{(0)}$ ortogonal a X_m na forma:

$$S_m^{(0)} = S_m^{(0)} - \frac{\langle I_m, S_m^{(0)} \rangle}{\langle I_m, S_m \rangle} S_m. \quad (4.25)$$

Da mesma forma, para obter o vetor $S^{(0)}$ que não possua contribuição de nenhum dos harmônicos inferiores a "n" pela forma:

A aplicação do método da potência ao vetor $S^{(0)}$ produz:

$$\begin{aligned}
 S^{(i)} &= \frac{1}{\|S^{(i-1)}\|} Q S^{(i-1)} = \dots = \frac{1}{\|S^{(i-1)}\|} (I - J - Q) S^{(i-1)} = \dots = \frac{1}{\|S^{(i-1)}\|} \sum_{j=0}^{i-1} L_j S^{(j)} \\
 &= \frac{1}{\|S^{(i-1)}\|} \sum_{j=0}^{i-1} L_j S^{(j)} \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

que para um i suficientemente grande deve convergir para o auto-vetor de maior autovalor contido em $S^{(0)}$, no caso:

$$S^{(i)} \approx \frac{1}{\|S^{(i-1)}\|} \sum_{j=0}^{i-1} L_j S^{(j)} \quad (4.28)$$

É importante ressaltar que a eliminação da contribuição dos harmônicos inferiores a "n" depende não somente dos harmônicos do problema direto inferiores a "n", mas também dos harmônicos do problema adjunto. Portanto, para se calcular o n-ésimo harmônico devem ser calculados alternadamente todos os harmônicos do problema direto e do problema adjunto partindo do harmônico fundamental até ser atingido o n-ésimo harmônico. Cada novo harmônico obtido é utilizado, juntamente com os demais, para eliminar a contribuição de harmônicos inferiores no cálculo do harmônico seguinte.

As correções para o cálculo de problema adjunto são efetuadas semelhantemente à Eq. (4.26) por:

$$T^{(i)} = \frac{1}{\|T^{(i-1)}\|} (I - V) T^{(i-1)} = \dots = \frac{1}{\|T^{(i-1)}\|} \sum_{m=0}^{i-1} V_m T^{(m)} \quad (4.29)$$

Na prática, os processos envolvendo cálculo numérico sempre estão sujeitos a erros de arredondamento e truncamento. Durante o método iterativo da potência, estes erros podem introduzir componentes de harmônicos já eliminados fazendo com que o processo iterativo convirja para estes harmônicos já obtidos. Para impedir a contaminação pelos harmônicos esta correção deve ser efetuada com uma certa frequência durante o processo iterativo. Uma vez que, ao contrário do Método 1, ao se eliminar os harmônicos

inferiores dos vetores S_{n+1} e I_{n+1} com o Método 2 apenas os termos da expansão em harmônicos referentes aos harmônicos que estão sendo eliminados são afetados, a correção pode ser efetuada até mesmo a cada iteração sem afetar as iterações do método da potência.

4.2.1 - Aceleração de Convergência do Método 2

A convergência do método da potência está relacionada com a razão de dominância α , que é definida como a razão inversa entre o maior auto-valor contido em $S^{(i)}$ e o auto-valor imediatamente inferior. Da Eq. (4.27) pode-se verificar que entre duas iterações consecutivas do método da potência existe a relação:

$$\xi_{n+1}^{(i)} = \xi_{n+1}^{(i-1)} S_m = \left[\frac{\alpha^{(i)}}{k_n} \right] S \quad (4.30)$$

onde $k^{(i)}$ é a estimativa do maior auto-valor k_n . Para um i suficientemente grande pode-se considerar que a convergência tem um comportamento assintótico, dependendo apenas dos dois harmônicos de maior auto valor, n e $n-1$, podendo ser expressa na forma:

$$\xi_{n+1}^{(i+1)} \sim \xi_{n+1}^{(i)} \frac{\alpha^{(i+1)}}{\alpha^{(i)}} \frac{\xi_{n+1}^{(i+1)}}{\xi_{n+1}^{(i)}} \quad (4.31)$$

Considerando que $k^{(i)} \sim k_n$ e $\alpha^{(i)} = \frac{\xi_{n+1}^{(i)}}{\xi_n^{(i)}}$ obtêm-se que:

$$\alpha^{(i+1)} = \frac{\xi_{n+1}^{(i+1)}}{\xi_n^{(i+1)}} = \frac{\xi_{n+1}^{(i)}}{\xi_n^{(i)}} = \alpha^{(i)} \quad (4.32)$$

de modo que após uma pequena manipulação pode-se escrever:

$$\frac{\xi_{n+1}^{(i+1)}}{\xi_n^{(i+1)}} = \frac{\xi_{n+1}^{(i)}}{\xi_n^{(i)}} = \alpha^{(i)} = \alpha \quad (4.33)$$

A Eq. (4.33) é utilizada para se estimar a razão de dominância, a qual é necessária no método de aceleração de polinômios de Chebyshev [26,37]. Da Eq. (4.33) pode-se notar que quanto menor a razão de dominância, maior será a velocidade de convergência do método da potência. Problemas com auto-valores muito próximos tendem a convergir mais lentamente do que problemas com auto-valores espaçados.

Para acelerar a convergência do método da potência existem vários métodos

[2,3,16,18,25,26,48,49], alguns destes não são indicados para o cálculo de harmônicos de ordem superior, pois a aceleração da convergência não é feita de forma linear e contamina o cálculo com os harmônicos eliminados. Uma técnica que fornece bons resultados no cálculo de harmônicos de ordem superior é o método de extrapolação baseado em polinômios de Chebyshev. As iterações definidas pela Eq. (4.27) são modificadas pela introdução de dois parâmetros de extrapolação a e β , tendo a forma:

$$\xi_{k+1} = \frac{1}{k} \left[(1 - a^{(k)} + 3^{(k)}) S^{(k)} - \beta S^{(k-2)} \right] \quad (4.34)$$

A expansão de $S^{(k)}$ em termos dos harmônicos fica:

$$S^{(k)} = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(r_m) a_n^{(k)} S_n, \quad (4.35)$$

onde T_n (T_n) é um polinômio de ordem n em y_m e $y_m = \frac{2r - 1}{k_n}$ é definido de modo que $-1 < y_m < 1$ para $k_m < k_n$.

Para acelerar a convergência, o polinômio $VH(y)$ deve ser tal que $|T_n'(y)|$ seja minimizado para $-1 < y < 1$. Um polinômio que satisfaz esta condição é o polinômio de Chebyshev:

$$T_n(r) = \cos(n \arccos y). \quad (4.36)$$

Para isto os coeficientes a e β devem ser da forma:

$$\beta^{(k)} = \frac{1 - a^{(k)}}{1 + a^{(k)}} \quad (4.37)$$

e

$$a^{(k)} = \frac{4 T_{k+1}(r_0)}{T_k(y_0)}. \quad (4.38)$$

A técnica de aceleração por polinômio de Chebyshev tem por principal característica minimizar os componentes dos harmônicos com auto-valor menor que k_n durante o processo iterativo. Por outro lado, harmônicos com auto-valor maior que k_n tem seus componentes aumentados, podendo fazer com que uma pequena parcela destes harmônicos que seja introduzida por erros de arredondamento e truncamento seja bastante aumentada durante a aceleração de convergência. Portanto, é fundamental que quando da aplicação da aceleração de convergência, a eliminação dos componentes de harmônicos inferiores seja feita a cada iteração externa para evitar que haja evolução destes erros de arredondamento e truncamento desviando a convergência da direção desejada.

IMPLEMENTAÇÃO NO CÓDIGO CITATION

O Código CITATION [20] resolve a equação de difusão de nêutrons sem dependência temporal em multi-grupos de energia, em uma, duas ou três dimensões utilizando o método da potência para fornecer o harmônico fundamental do problema direto e também do problema adjunto. Para possibilitar obtenção de harmônicos de ordem superior, os dois métodos de eliminação de ordem inferior apresentados no Capítulo 4 foram implementados no código CITATION.

Duas etapas se procederam antes da implementação dos métodos. Na primeira foi desenvolvido um programa computacional para microcomputador para resolução da equação de difusão em multi-grupos de energia unidimensional onde os dois métodos foram testados. Na segunda foi feito um estudo detalhado do código CITATION para se identificar como deveriam ser efetuadas as mudanças. Este estudo é apresentado no Apêndice 2.

Nos testes efetuados com o programa unidimensional ambos os métodos forneceram bons resultados, pois neste caso as matrizes a serem invertidas para utilização do método da potência são tridiagonais e relativamente pequenas comparadas com problemas bi e tridimensionais. Neste caso a inversa das matrizes é obtida de forma analítica. Para problemas maiores estas matrizes são invertidas por métodos numéricos iterativos consistindo das chamadas iterações internas.

No código CITATION não é fixado um critério de convergência para estas iterações internas e sim é realizado um certo número de iterações internas para cada iteração externa. Este esquema funciona perfeitamente bem para o cálculo do harmônico fundamental, entretanto, no cálculo de harmônico de ordem superior, a falta de convergência devido a realização de poucas iterações internas pode introduzir componentes dos harmônicos já obtidos, tornando mais difícil a convergência das iterações externas pelo método da potência. Por outro lado, um número excessivo de iterações externas poderia encarecer desnecessariamente o cálculo de harmônicos de ordem superior.

Além disto, para a eliminação da contribuição de harmônicos inferiores pelo Método 1, como será visto neste capítulo, utiliza-se uma iteração externa a mais para cada correção para eliminar harmônico. Para que a eliminação seja efetuada eficientemente, é necessário que estas iterações externas sejam efetuadas com uma boa precisão, e para isto é necessário a convergência das iterações internas.

Os fatos expostos acima levaram a introdução de um critério de convergência para as iterações internas ao invés da realização de um número fixo de iterações. O critério de convergência utilizado foi de 10^{-5} para o desvio relativo entre iterações, entretanto manteve-se um limite máximo para o número total de iterações externas para o caso de não se obter a convergência. Para a introdução deste critério de convergência foram modificadas as subrotinas DNSD e KNSD do código CITATION.

A necessidade de uma maior precisão para o cálculo de harmônicos de ordem superior fez com que as variáveis utilizadas nos cálculos fossem utilizadas em dupla precisão. Para esta utilização houve a necessidade de se recalcular os apontadores para estas variáveis na tabela de alocação de memória do código, pois o código CITATION utiliza uma alocação dinâmica de variáveis. A mudança de uma variável para dupla precisão implica que esta ocupará o dobro de espaço na memória devendo todas as variáveis alocadas posteriormente serem deslocadas.

A seguir são apresentadas as particularidades da implementação de cada um dos métodos de eliminação de harmônicos inferiores.

5.1 - Implementação do Método 1

No Método 1, as correções são efetuadas através da aplicação das matrizes de correção C^s dadas pela Eq. (4.14). A aplicação da matriz ao vetor $S^{(i)}$ da i -ésima iteração fornece:

$$S^{(i+1)} = S^{(i)} - Q S^{(i)} \quad (5.1)$$

Pode-se notar na Eq. (5.1) a semelhança do termo $\frac{1}{k_n} Q S^{(i)}$ com o processo iterativo utilizado no método da potência Eq. (A1.16). Para aplicar a Eq. (5.1) basta realizar uma iteração externa extra do método da potência substituindo a estimativa do auto-valor $A^{(i)}$ pelo auto-valor k_n . O vetor corrigido $S^{(i+1)}$ é obtido pela diferença entre o valor antes da iteração externa e após esta iteração.

A principal mudança para efetuar a eliminação dos componentes dos harmônicos inferiores é efetuada na subrotina FLUX para problemas uni e bidimensionais e KLUX para problemas tridimensionais. Estas mudanças referem-se a um gerenciamento das variáveis utilizadas no código CITATION para que durante a iteração externa extra utilizada para eliminar cada um dos harmônicos já obtidos, não seja perdida nenhuma variável necessária

para a continuação das iterações do método da potência.

O código CITATION utiliza dois métodos para calcular os auto-valores. O primeiro destes utiliza um balanço entre produção, absorção e fuga, o qual é utilizado durante o processo iterativo. O segundo utiliza a somatória dos quadrados dos resíduos que é um método mais refinado utilizado ao final do processo iterativo. No cálculo de harmônicos, o primeiro método não forneceu bons resultados. Melhores resultados foram obtidos quando a estimativa de auto-valor através da somatória do quadrado dos resíduos foi efetuada a cada iteração externa. Este auto-valor obtido é armazenado, pois no Método 1 apenas o auto-valor é necessário para se efetuar as correções com relação ao auto-vetor a ele associado no cálculo todos os harmônicos de ordem superior à sua.

Do ponto de vista do usuário do código CITATION, não há grandes alterações com relação aos dados de entrada. Foram introduzidos dois novos dados em posições anteriormente não utilizadas nos cartões de dados de entrada. Estes dados são fornecidos no quarto cartão seção 001 dos dados de entrada na variável ITMX13, o número total de harmônicos a serem calculados e na variável ITMX14, a frequência com que deve ser aplicada as correções durante as iterações externas. Caso estes dados não sejam fornecidos pelo usuário, o código CITATION se comporta igual à sua versão não modificada.

5.2 - Implementação do Método 2

O Método 2 exige que sejam calculados alternadamente os harmônicos direto e adjunto, desde o fundamental até o de ordem mais alta que foi requerido pelo usuário. No código CITATION, o harmônico fundamental direto e adjunto são calculados quando a variável NGC12 do segundo cartão da seção 001 dos dados de entrada do código é igual a 1. A primeira providência tomada foi que quando fosse requisitado o cálculo de harmônicos de ordem superior a variável NGC12 fosse automaticamente igualada a 1 para indicar que também seria realizado o cálculo do problema adjunto. A subrotina CALR controla estes cálculos. Foi introduzido nesta subrotina um contador para que o cálculo fosse repetido para todos os harmônicos requeridos. Foram introduzidos também dois arquivos de trabalho temporários, onde, após a convergência de cada harmônico, os valores de S_n ou I_n são armazenados, cada um no final do arquivo correspondente ao problema direto ou adjunto. Para o cálculo de um determinado harmônico eram eliminados todos os harmônicos obtidos anteriormente através das Eqs. (4.25) e (4.29) para os problemas direto e adjunto, respectivamente. As subrotinas FLUX, para uma e duas dimensões, e KLUX, para três dimensões, foram modificadas para efetuar estas correções após efetuados um determinado número de iterações escolhido pelo usuário. Para aplicar estas correções são utilizados os vetores S_n e I_n armazenados nos arquivos temporários.

Foram criados outros dois arquivos onde eram gravados os harmônicos para um posterior processamento para confecção de gráficos. Para problemas bidimensionais, estes gráficos são confeccionados com o programa apresentado no Apêndice 3.

5.2.1 - Convergência e Aceleração

Para problemas com auto-valores muito próximos a simples aplicação do método da potência apresenta dificuldades na convergência dos harmônicos de ordem superior. A implementação de um método eficaz de aceleração de convergência se faz necessária. O método de aceleração por polinômios de Chebyshev apresentado na seção 4.2.1 foi implementado no código CITATION. As principais mudanças foram efetuadas na subrotina FLUX.

A aplicação da aceleração de convergência sem uma boa estimativa da razão de dominância não fornece bons resultados. A razão de dominância é estimada pela razão entre a variação da fonte entre três iterações consecutivas sem aceleração de convergência (Eq. 4.33). Após a estimativa da razão de dominância ter obtido uma certa convergência, um certo número de iterações é efetuado utilizando o método de aceleração de convergência por polinômios de Chebyshev e então uma nova razão de dominância é estimada.

Inicialmente havia sido fixado um critério de 10^{-2} para o desvio relativo da estimativa da razão de dominância para que fossem realizadas 15 iterações com aceleração, quando então uma nova razão de dominância era estimada. Verificou-se, no entanto, que muitas iterações eram necessárias para que a aceleração pudesse ser iniciada. Optou-se então por relaxar o critério de convergência da razão de dominância para 10^{-1} e reduzir o número de iterações aceleradas para 3, com isto havia melhor convergência da estimativa da razão de dominância para as próximas iterações, podendo o critério de convergência ser apertado e o número de iterações aceleradas aumentado a cada nova estimativa da razão de dominância. O critério de convergência da razão de dominância era dividido por 2 e o número de iterações aceleradas era acrescido de 4 até um limite de 10^{-4} e 15, respectivamente.

Para harmônicos com auto-valores próximos a convergência do método iterativo da potência é lenta. A estimativa da razão de dominância satisfaz mais rapidamente o critério de 10^{-2} para problemas com auto-valores bastante próximos, entretanto, isto não significa necessariamente uma boa convergência no cálculo do harmônico, mas sim que esta convergência é muito lenta.

A necessidade de aceleração de convergência é minorada para problemas com auto-valores bastante separados, pois estes têm uma menor razão de dominância. A estimativa

da razão de dominância, nestes casos, demora mais para satisfazer os critérios de convergência fixados porque há uma grande convergência da fonte via fissão a cada iteração. Quando esta fonte entra no comportamento assintótico (Eq. 4.31) que é necessário para se ter uma boa estimativa da razão de dominância (Eq. 4.33), o harmônico já está praticamente convergido.

5.2.2 - Convergência de Harmônicos Degenerados

A obtenção de harmônicos degenerados pelo Método 1 não é possível, pois o esquema de correções na fonte via fissão elimina todos os harmônicos que possuam auto-valor igual ao utilizado na matriz de correção. Já com o Método 2 esta obtenção é possível entretanto alguns cuidados devem ser tomados.

A inicialização do problema no cálculo de cada harmônico é bastante importante. Caso seja utilizada sempre a mesma escolha inicial de fonte via fissão $S^{(0)}$ para o processo iterativo no cálculo de todos os harmônicos há grandes chances de não serem obtidos harmônicos degenerados, pois o método da potência converge, no caso de harmônicos degenerados, para a combinação linear destes harmônicos existentes na escolha inicial de $S^{(0)}$. As correções efetuadas pelo Método 1 no cálculo de harmônicos posteriores a este eliminam esta combinação linear, ficando a fonte via fissão isenta de qualquer componente referente a estes harmônicos degenerados, a menos que os erros de arredondamento e truncamento surgidos durante o processo iterativo venham a introduzi-los. Para evitar este problema a escolha de uma nova fonte inicial é feita no início do cálculo de cada novo harmônico. Esta escolha é feita através de uma função geradora de números aleatórios para o cálculo dos harmônicos diretos e para o problema adjunto é utilizada a fonte via fissão convergida para o harmônico direto correspondente.

A convergência do cálculo de harmônicos degenerados é lenta, pois qualquer resíduo que tenha sobrado da correção da fonte via fissão referente a um outro harmônico que possua o mesmo auto-valor é aumentado na mesma proporção que o harmônico que está sendo calculado, pois possui a mesma razão de dominância. Correções frequentes devem ser efetuadas para evitar a propagação desta contaminação.

É importante ressaltar que existem certos tipos de reatores em que a proximidade dos auto-valores é tanta que certos harmônicos podem se comportar como harmônicos degenerados fazendo com que o cálculo convirja para uma combinação linear destes harmônicos com auto-valores próximos. Este caso pode ser observado no reator Angra I, como será comentado no próximo capítulo.

TESTES DAS IMPLEMENTAÇÕES NO PROGRAMA CITATION

Neste capítulo são apresentados três testes realizados para a avaliação das implementações no programa CITATION. São calculados harmônicos para três arranjos neutrônicos bastante distintos, os quais cobrem uma parcela significativa dos problemas encontrados na obtenção de harmônicos estáticos. O primeiro caso consiste de um reator homogêneo e unidimensional, onde os harmônicos foram calculados utilizando o Método 1. Embora este problema seja bastante simples, a frequência com que as correções na fonte de fissão são efetuadas afeta bastante o resultado. Uma frequência muito alta às vezes pode eliminar harmônicos que ainda não foram obtidos e uma frequência muito baixa pode não eliminar efetivamente o componente de um harmônico já obtido.

O segundo caso é um reator hipotético em geometria bidimensional com duas regiões e um grupo de energia de neutrons. Para este problema, ainda bastante simples, foram calculados harmônicos utilizando ambos os métodos de correção no termo fonte implementados no código CITATION. Na comparação de ambos os resultados o Método 2 apresentou-se o mais indicado para problemas reais.

O terceiro caso é um problema real, o reator de potência Angra-I [54], que é um reator grande e portanto possui os auto-valores bastante próximos e até mesmo auto-valores degenerados devido à simetria deste reator. Neste caso, o Método 1 não forneceu bons resultados, pois os problemas são relativamente grandes, estando portanto sujeito a muitos erros numéricos de arredondamento e truncamento no processo iterativo. São, assim, apresentados neste trabalho, apenas resultados calculados com o Método 2.

Foram ainda detectados problemas de convergência com o Método 2 para problemas bidimensionais reais (terceiro caso), indicando a necessidade da introdução de um método de aceleração de convergência para reduzir o tempo computacional gasto nos cálculos e também melhorar a qualidade dos resultados obtidos sem a aceleração de convergência. Um método de aceleração baseado em polinômios de Chebyshev implementado mostrou-se satisfatório para resolver estes problemas. Testes preliminares da implementação para obtenção de harmônicos tridimensionais consumiram demasiado tempo computacional inviabilizando o cálculo deste.

Uma forma de se verificar a consistência dos resultados é comparar os auto-valores obtidos no cálculo direto com os do cálculo adjunto. Os auto-valores de ambos os cálculos devem coincidir. Este problema pode ser verificado no Caso 3, onde a falta de convergência devido a limitação no número máximo de iterações externas provocou

diferenças entre os auto-valores diretos e adjuntos. Aumentando este número de iterações, obteve-se uma boa concordância entre os auto-valores, mas mesmo assim surgiram problemas no cálculo dos harmônicos de ordem muito alta.

6.1 - Caso 1: Reator Hipotético Unidimensional Monoenergético

Este problema foi realizado para testar a viabilidade de obtenção de harmônicos estáticos através do Método 1 implementado no código CITATION. Foi escolhido um problema bastante simples, um reator unidimensional e homogêneo com 60 cm de comprimento que foi calculado com um grupo de energia de neutrons. A Tabela 6.1 apresenta as seções de choque, representativas de um PWR, utilizadas e a Fig. 6.1 a geometria e condições de contorno utilizadas. O domínio do problema foi dividido em uma malha com 20 pontos espaciais e foi utilizado um critério de convergência de 10^{-4} para o auto-valor e 10^{-3} para os harmônicos.

Tabela 6.1 - Seções de Choque Representativas de um PWR para o Caso 1

D	0,910604 cm
	$2,49700 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$
	$2,75242 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$

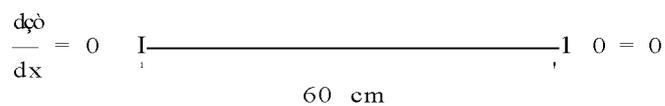


Figura 6.1 - Geometria e Condições de Contorno Utilizadas no Caso 1

Notou-se que os harmônicos obtidos dependem da frequência com que eram efetuadas as correções na fonte via fissão entre as iterações externas. Uma correção pouco frequente não é suficiente para eliminar o componente dos harmônicos já calculados introduzidos por erros numéricos de arredondamento e truncamento surgidos durante o processo iterativo. Por outro lado, uma correção muito frequente acaba eliminando harmônicos ainda não obtidos. Por exemplo, fazendo a descontaminação da fonte a cada 15 iterações, obtinha-se que o cálculo de harmônicos de ordem superior acabava sempre convergindo para o harmônico fundamental. Com a descontaminação feita a cada iteração, era eliminado juntamente com um harmônico já obtido o harmônico subsequente e com isto,

foram obtidos apenas os harmônicos pares. Realizando a descontaminação a cada 7 iterações, foi conseguido calcular os harmônicos consecutivamente na ordem decrescente de auto-valores.

Foram calculados seis harmônicos, cujos auto-valores são apresentados juntamente com os valores analíticos na Tabela 6.2. Na comparação entre resultados analíticos e numéricos nota-se uma pequena discrepância entre eles. Isto se justifica porque ao se utilizar diferenças finitas, o número de harmônicos linearmente independentes, que é infinito para a solução analítica, fica reduzido apenas ao número de pontos utilizados na discretização do domínio (neste caso, 20 pontos). Juntamente com esta redução também ocorre um deslocamento nos auto-valores conforme pode ser visto.

Tabela 6.2 - Auto-valores Obtidos para o Caso 1

n	analítico	numérico
0	1,07703	1,07704
1	0,91017	0,91083
2	0,69487	0,69784
3	0,51289	0,51913
4	0,38014	0,38959
5	0,28722	0,29940

6.2 - Caso 2: Reator Hipotético Bidimensional Mono Energético

Este problema tem como objetivo comparar os dois métodos de cálculo de harmônicos implementados no código CITATION. Foi escolhida uma geometria simples constituída de apenas duas regiões, núcleo e refletor. O núcleo é quadrado com 120 cm de lado tendo refletores de 10 cm de espessura em duas faces. O cálculo foi realizado considerando a simetria de 1/4, sendo então calculado apenas um quadrante utilizando as condições de contorno apropriadas conforme a Fig. 6.2. As seções de choque hipotéticas utilizadas para este caso são apresentadas na Tabela 6.3. O domínio foi discretizado em uma malha de 20 pontos igualmente espaçados na direção Y e 30 pontos na direção X, sendo 20 pontos equidistantes na região do núcleo e 10 na região do refletor. O critério de convergência utilizado foi de 10^{-4} para o auto-valor e 10^{-3} para os harmônicos.

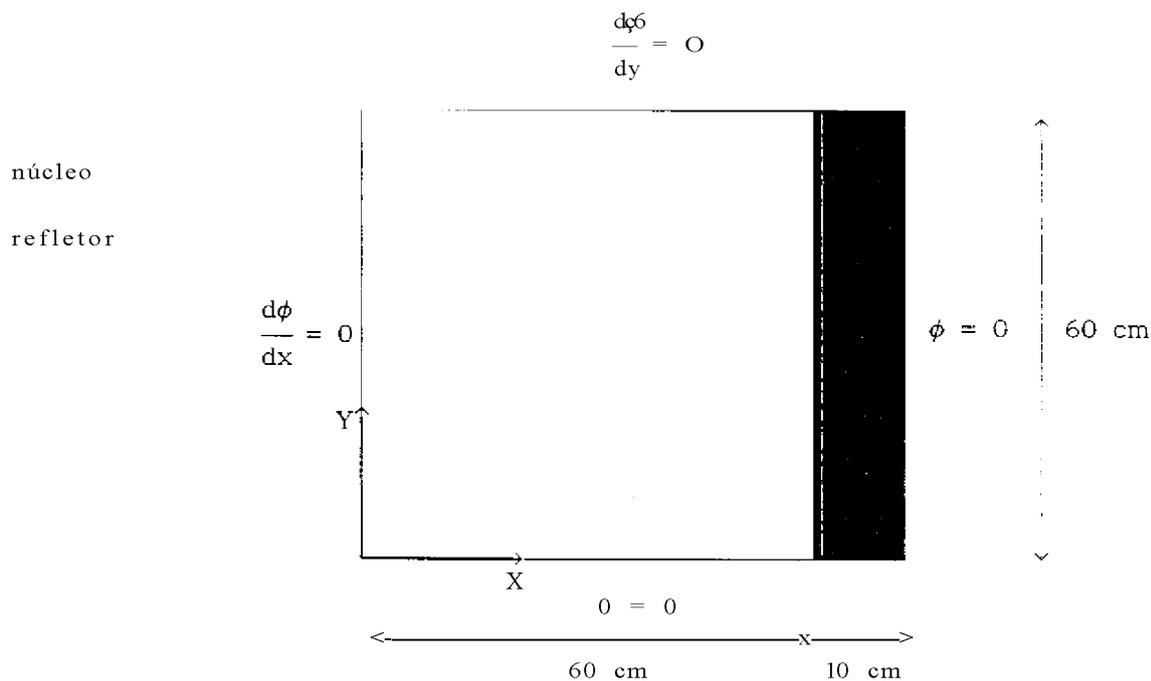


Figura 6.2 - Geometria e Condições de Contorno Utilizadas no Caso 2

Tabela 6.3 - Seções de Choque Utilizadas no Caso 2.

região	D (cm)	E_c (cm ³)	fX_c (cm *)
núcleo	0,910604	0,002497	0,0275242
refletor	0,910604	0,002497	0,0000000

Ambos os métodos forneceram bons resultados, entretanto, com o Método 1 alguns dos harmônicos não foram obtidos e em outros houve problemas de convergência. O Método 1 parece ser bastante sensível a erros de arredondamento e truncamento inerentes ao processo iterativo, mesmo porque neste método a eliminação de cada harmônico já obtido da fonte de fissão representa uma iteração externa a mais. A obtenção de resultados analíticos para este problema é bastante complicada, entretanto, para efeitos de comparação são utilizados resultados sintetizados pela combinação de harmônicos unidimensionais. Cada um dos harmônicos analíticos é obtido assumindo a possibilidade da separação de variáveis na equação de difusão, sendo estes harmônicos fornecidos pelo produto dos harmônicos unidimensionais calculados para a direção X e para a direção Y. Estes resultados, embora aproximados, indicariam a omissão de algum harmônico nos resultados numéricos.

Na Tabela 6.4 é apresentada uma comparação dos resultados de ambos os métodos

entre si e com os resultados analíticos aproximados. Esta comparação mostra que o Método 1, além de apresentar problemas de convergência (2º e 6º harmônicos), elimina harmônicos que não foram obtidos anteriormente, impedindo a obtenção dos mesmos (no caso, o 4º, 5º e 7º harmônicos). Já com o Método 2 não é observada nenhuma dificuldade para obtenção de harmônico para este problema relativamente simples. Nesta comparação, o Método 2 forneceu resultados bem melhores que o Método 1, sugerindo a utilização do Método 2 para problemas mais complexos.

Tabela 6.4 - Auto-valores Obtidos para o Caso 2

i	analítico	Método 1	iter	Método 2	iter
0	0,7784	0,7779	11	0,7779	11
1	0,3766	0,3765	12	0,3764	51
2	0,3348	0,3350	(a)	0,3347	18
3	0,2295	0,2271	73	0,2271	42
4	0,1792		-	0,1804	46
5	0,1564		-	0,1575	64
6	0,1373	0,1360	(a)	0,1362	82
7	0,1288		-	0,1277	31

(a) Não houve convergência em 200 iterações

critério de convergência - 10 no auto-valor
 10 no auto-vetor

6.3 - Caso 3: Reator Angra I

Para o caso 3 foi utilizado o reator Angra I, cuja configuração é obtida no capítulo 4 de [54]. Os harmônicos foram calculados com o Método 2 em geometria bidimensional X-Y com 49 x 49 pontos espaciais e dois grupos de energia de neutrons. Utilizou-se o mesmo critério de convergência dos casos anteriores. Inicialmente, limitou-se em 200 o número máximo de iterações externas para o cálculo de cada harmônico. Caso a convergência não fosse atingida nestas iterações, o cálculo dos harmônicos seguintes era continuado como se este harmônico tivesse convergido. Notou-se, entretanto, que com 200 iterações externas o nível de convergência obtido para a maioria dos harmônicos não era aceitável, pois havia uma grande diferença entre os auto-valores diretos e adjuntos de um mesmo harmônico, como pode ser visto na Tabela 6.5. Quando este limite foi aumentado para 600 iterações, embora alguns dos harmônicos ainda assim não satisfizessem os critérios de convergência impostos, eles estavam suficientemente convergidos para que os auto-valores dos problemas direto e adjunto coincidisse, conforme é mostrado na Tabela 6.6. Nota-se que são necessárias muitas iterações e mesmo assim em alguns harmônicos não se obtém a convergência justificando a necessidade de um método de aceleração de convergência. Os resultados para os cálculos do reator Angra I utilizando a aceleração de convergência por polinômios de Chebyshev

são apresentados na seção 7.2, Tabela 7.2, onde nota-se uma concordância entre auto-valores direto e adjunto maior que o critério de convergência de IO^{-4} para o auto-valor, pois neste caso a convergência é limitada pela convergência do harmônico. No caso do harmônico fundamental nota-se uma diferença maior entre os auto-valores calculados para o problema direto e adjunto porque a convergência no fluxo foi muito rápida. Comparando-se as Tabelas 6.6 e 7.2, houve uma redução de mais de 50% no número de iterações externas pela implementação da aceleração de convergência.

Angra I é um reator grande, o que faz com que os auto-valores sejam bastante próximos. Além disto, o reator tem simetria de 1/4, o que faz com que existam harmônicos degenerados, ou seja, mais de um harmônico para o mesmo auto-valor. A degenerescência dos harmônicos, além de fatores como erros de arredondamento e truncamento e a proximidade dos auto-valores, desaconselha a utilização do Método 1 para o reator Angra I, pois neste método a descontaminação da fonte via fissão é feita utilizando-se os auto-valores de harmônicos já obtidos. No caso de um harmônico degenerado, a correção da fonte via fissão utilizando o seu auto-valor elimina também os componentes dos demais harmônicos que possuam este mesmo auto-valor.

Na Tabela 6.6 nota-se que os três últimos harmônicos calculados possuem auto-valores muito próximos. A princípio parece se tratar de um problema de degenerescência de auto-valores, entretanto, um cálculo mais preciso efetuado com aceleração de convergência mostrou que apenas os harmônicos 8 e 9 são degenerados. Os harmônicos 9 e 10 calculados sem a aceleração de convergência foram obtidos erroneamente como uma combinação linear dos verdadeiros harmônicos 9 e 10 calculados com a aceleração de convergência. Devido a proximidade dos auto-valores destes harmônicos, o método da potência convergiu para uma combinação linear destes harmônicos de maneira semelhante ao que seria feito para um harmônico degenerado. As Figs. 6.3 e 6.4 são os harmônicos calculados sem a aceleração de convergência e as Figs. 7.28 e 7.29 são os harmônicos calculados com a aceleração de convergência. Pode-se observar que os dois primeiros podem ser obtidos como uma combinação linear dos dois últimos.

Tabela 6.5 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 200 iterações)
Sem Aceleração de Convergência

n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0024424	60	1,0024443	53
1	0,9850838	134	0,9850839	56
2	0,9696692	(a)	0,9854408	(a)
3	0,9586132	(a)	0,9613167	(a)
4	0,9567520	(a)	0,9699782	(a)
5	0,9336006	(a)	0,9350725	(a)
6	0,9255280	(a)	0,9265894	(a)
7	0,9255214	(a)	0,9258660	187
8	0,8948871	(a)	0,8949543	(a)
9	0,8958445	(a)	0,8958525	(a)
10	0,8957032	(a)	0,8957455	102

(a) Não houve convergência em 200 iterações

Tempo de CPU = 159 min (IBM-4381)

critério de convergência 10^{-4} no auto-valor
 10^{-3} no auto-vetor

Tabela 6.6 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 600 iterações)

n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0024424	60	1,0024430	53
1	0,9850838	134	0,9850839	56
2	0,9850844	415	0,9850848	63
3	0,9593797	184	0,9593800	68
4	0,9564614	(a)	0,9564618	70
5	0,9350806	327	0,9350746	54
6	0,9255173	285	0,9255178	62
7	0,9255179	(a)	0,9255180	63
8	0,8958443	(a)	0,8958452	563
9	0,8953477	(a)	0,8956360	(a)
10	0,8950131	239	0,8952914	53

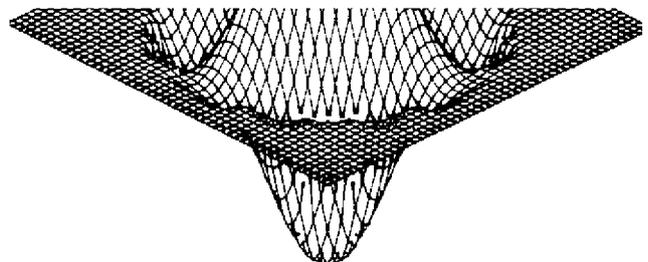
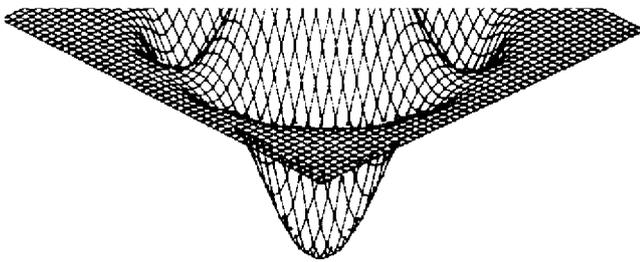
(a) Não houve convergência em 600 iterações

Tempo de CPU = 557 min (IBM-4381)

critério de convergência 10^{-4} no auto-valor
 10^{-3} no auto-vetor

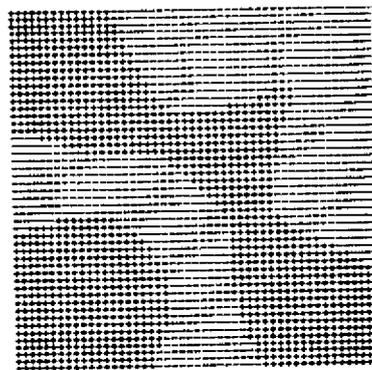
(a) 9^o. harmônico direto
grupo rápido

(b) 9^o- harmônico direto
grupo térmico



(c) 92 harmônico adjunto
grupo rápido

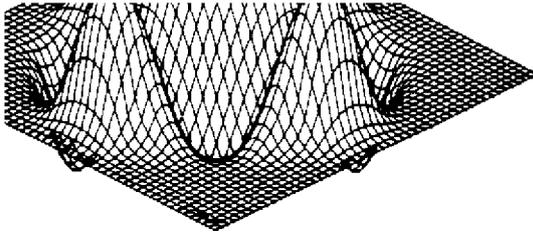
(d) 93. harmônico adjunto
grupo térmico



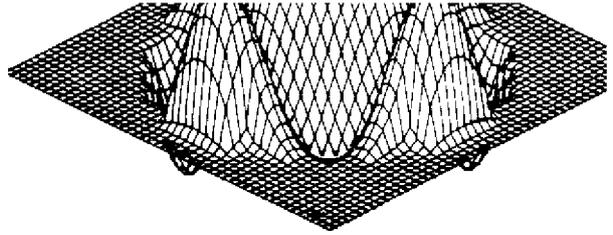
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 6.3 - 92 Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I
Calculado sem a Aceleração de convergência

(a) 10²- harmônico direto
grupo rápido

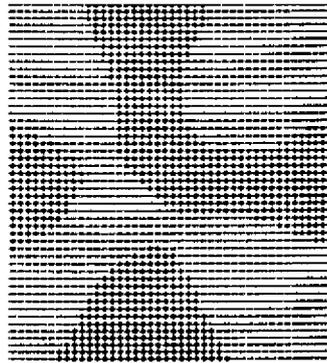


(b) 102 harmônico direto
grupo térmico



102 harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 102 harmônico adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 6.4 - 102 Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I
Calculado sem a Aceleração de Convergência

HARMÔNICOS DOS REATORES IEA-R1 E ANGRA I

7.1 - Reator IEA-R1 - Representação Bidimensional

Foram calculados harmônicos para a configuração 158 do reator IEA-R1 [30]. Foi utilizada geometria cartesiana X-Y discretizada em uma malha de 64 x 64 pontos e 2 grupos de energias de neutrons. Na Fig. 7.1 é apresentada uma representação esquemática deste reator. Utilizou-se o critério de convergência de 10^{-4} para o auto-valor e 10^{-3} para o auto-vetor. Caso a convergência não fosse atingida em 200 iterações, os cálculos eram continuados como se o harmônico tivesse convergido.

Para o reator IEA-R1 foram calculados 15 harmônicos de ordem superior, além do fundamental. Estes resultados são apresentados na Tabela 7.1 e Figs. 7.2 a 7.17. Não surgiram grandes problemas na obtenção destes harmônicos, uma vez que o reator IEA-R1 é um reator pequeno e não simétrico possuindo, portanto, auto-valores bastante separados e não degenerados. Nota-se na Tabela 7.1 que embora o nível de convergência exigido não tenha sido alcançado no cálculo de alguns harmônicos, os demais resultados não foram afetados. Uma forma efetiva desta verificação é a comparação dos auto-valores obtidos para o cálculo direto e para o cálculo adjunto, os quais são iguais dentro dos limites de convergência exigidos. Nas Figs. 7.2 a 7.17 são apresentados os harmônicos do problema direto e adjunto para os grupos rápidos e térmicos em perspectiva tridimensional. Para auxiliar no entendimento das figuras, também é apresentada a distribuição no plano X-Y dos sinais dos harmônicos em cada ponto da malha utilizada.

Tabela 7.1 - Auto-valores para o Reator IEAR-R1

n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0134315	18	1,0134287	26
1	0,7786338	64	0,7786370	34
2	0,6978360	54	0,6978371	31
3	0,5394481	(a)	0,5394474	94
4	0,5285126	59	0,5285209	23
5	0,4248859	104	0,4248862	34
6	0,3767235	144	0,3767245	54
7	0,3484739	(a)	0,3484700	144
8	0,3392165	46	0,3392113	24
9	0,2582540	(a)	0,2582533	75
10	0,2500477	(a)	0,2500469	114
11	0,2370180	(a)	0,2370605	114
12	0,2322938	114	0,2323481	34
13	0,2009245	114	0,2009254	44
14	0,1837405	169	0,1837407	48
15	0,1730528	104	0,1730524	75

(a) Não houve convergência em 200 iterações

Tempo de CPU = 139 min

critério de convergência • 10 no auto-valor
10 no auto-vetor

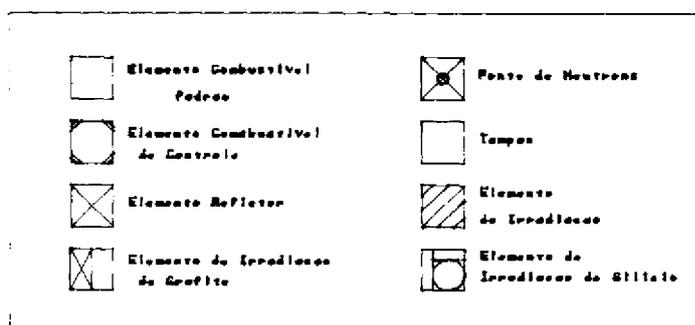
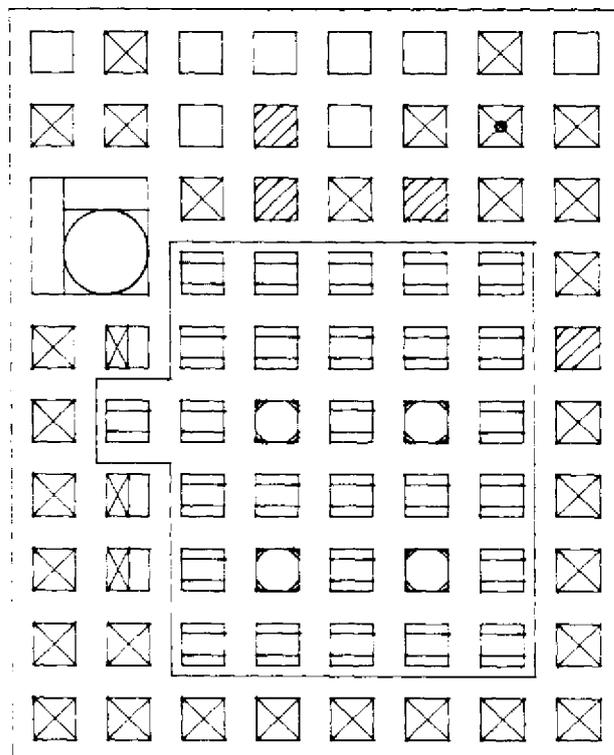
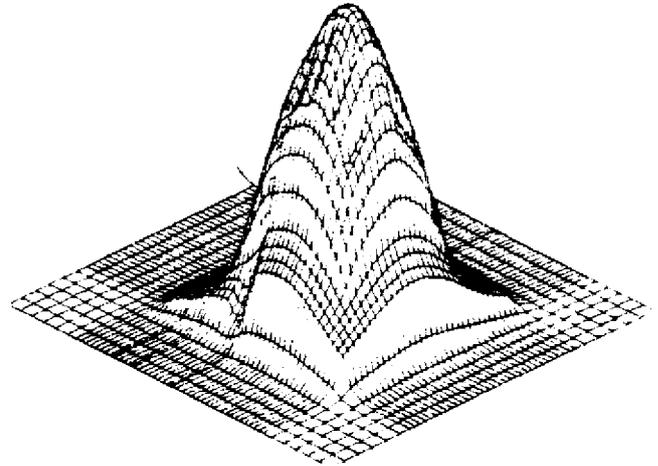
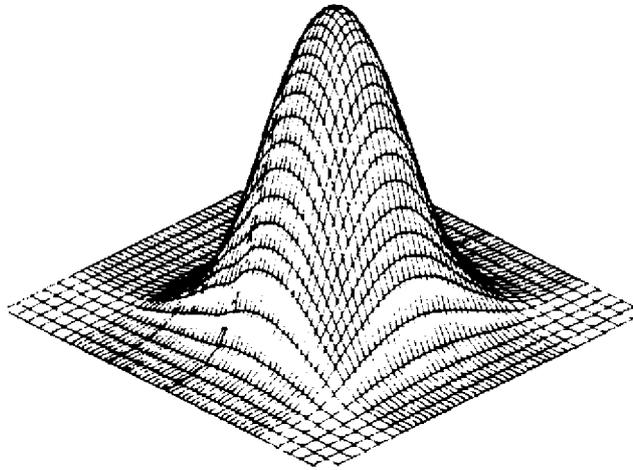


Figura 7.1 - Representação Esquemática do Reator IEA-R1

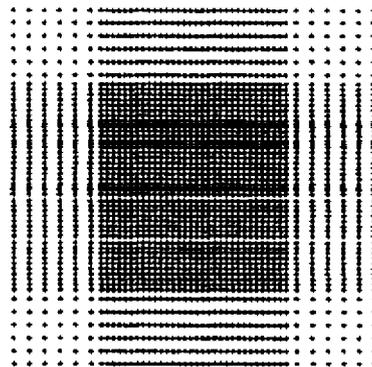
(a) harmônico fundamental direto
grupo rápido

(b) harmônico fundamental direto
grupo térmico



(c) harmônico fundamental adjunto
grupo rápido

(d) harmônico fundamental adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

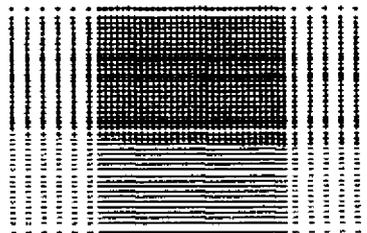
Figura 7.2 - Harmônico Fundamental Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) I— harmônico direto
grupo rápido

(b) I°- harmônico direto
grupo térmico

(c) I°- harmônico adjunto
grupo rápido

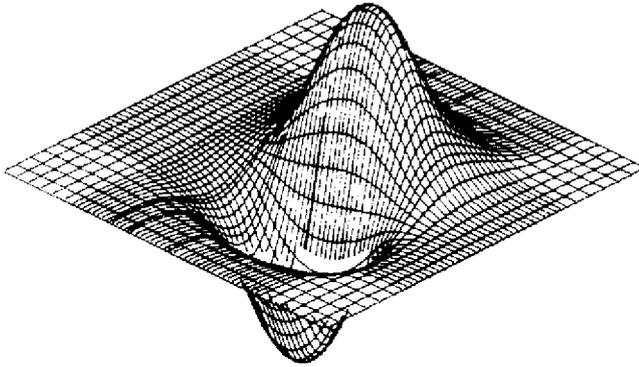
(d) I°- harmônico adjunto
grupo térmico



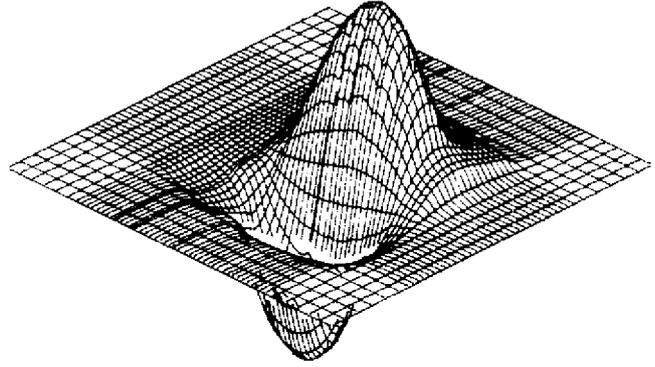
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.3 - IP- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 2º: harmônico direto
grupo rápido

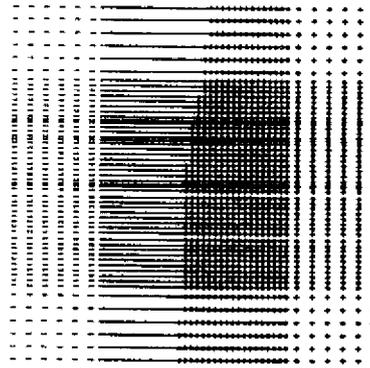


(b) 22 harmônico direto
grupo térmico



(c) 2º harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 2º harmônico adjunto
grupo térmico

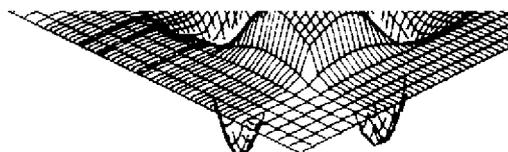
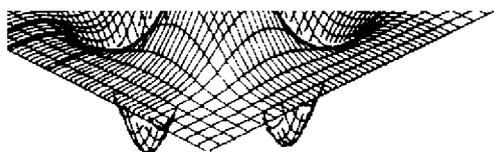


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.4-2º. Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

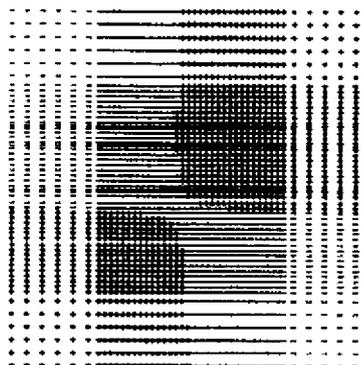
3— harmônico direto
grupo rápido

(b) 3°. harmônico direto
grupo térmico



3°. harmônico adjunto
grupo rápido

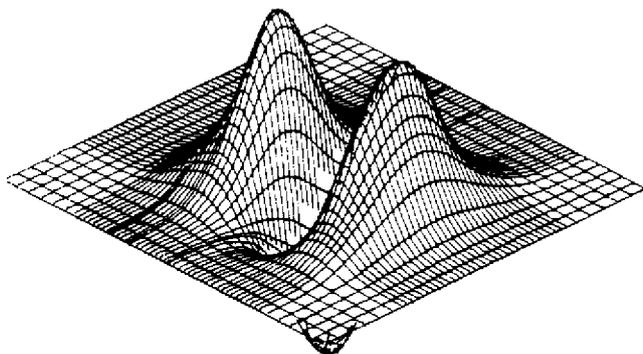
(d) 3°- harmônico adjunto
grupo térmico



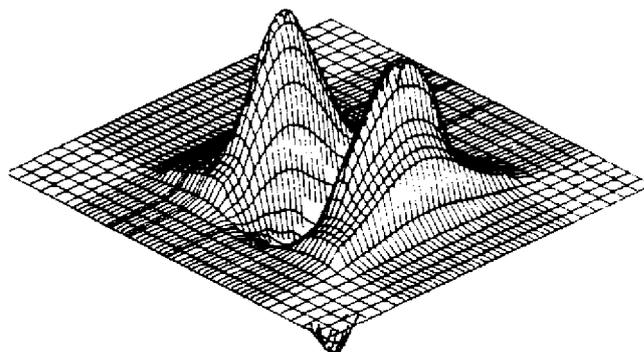
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.5 - 3°. Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 4^o- harmônico direto
grupo rápido

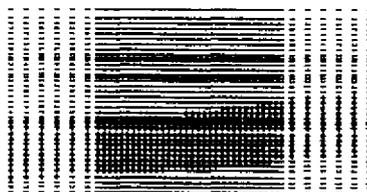


(b) 4- harmônico direto
grupo térmico



(c) 4^o. harmônico adjunto
grupo rápido

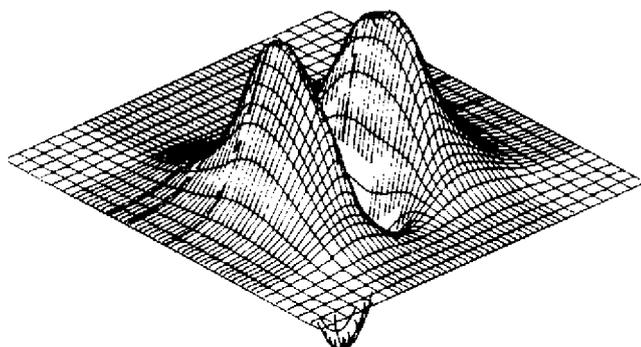
(d) 4^o- harmônico adjunto
grupo térmico



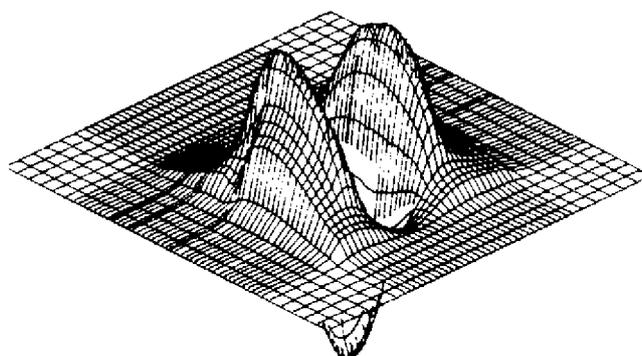
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.6 - 4^o. Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 5P- harmônico direto
grupo rápido

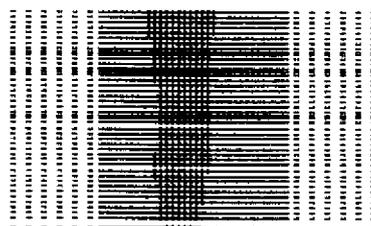


(b) 5°. harmônico direto
grupo térmico



(c) 52 harmônico adjunto
grupo rápido

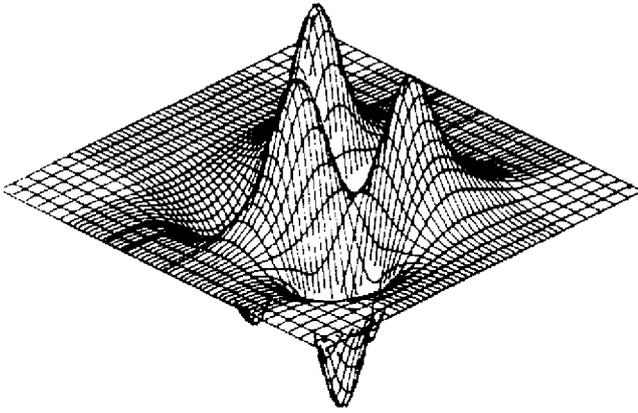
(d) 52 harmônico adjunto
grupo térmico



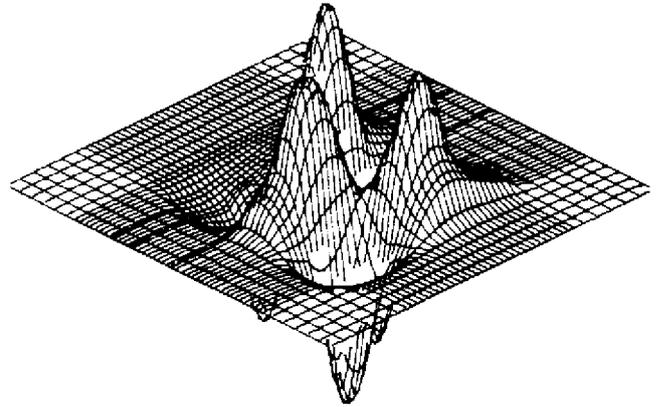
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.7 - 52 Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 6º- harmônico direto
grupo rápido

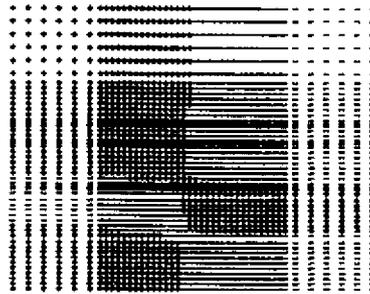


(b) 6º- harmônico direto
grupo térmico



(c) 6- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 6º. harmônico adjunto
grupo térmico

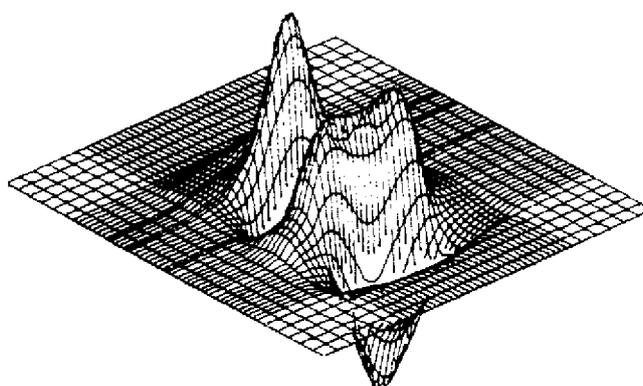
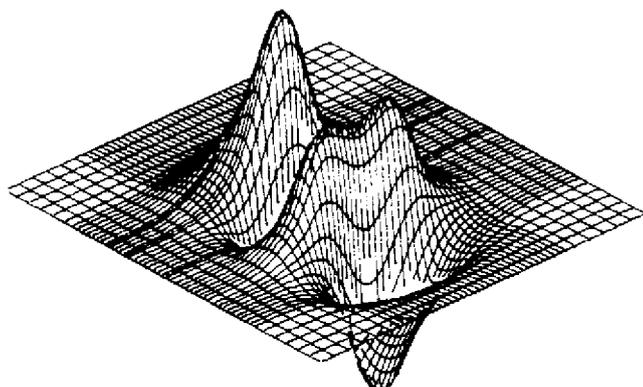


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.8 - 6º- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA R1

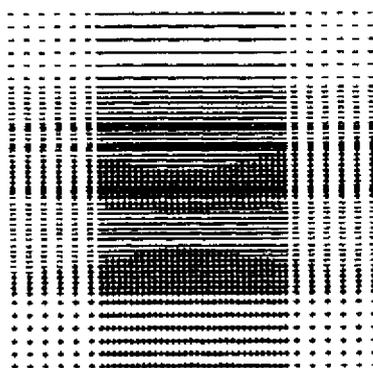
(a) 7º. harmônico direto
grupo rápido

(b) 7-3 harmônico direto
grupo térmico



(c) 7º harmônico adjunto
grupo rápido

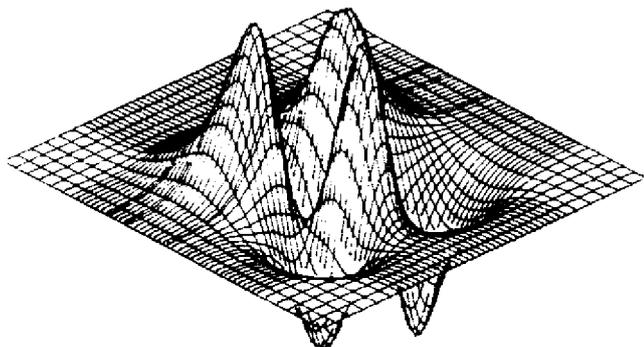
(d) 7º harmônico adjunto
grupo térmico



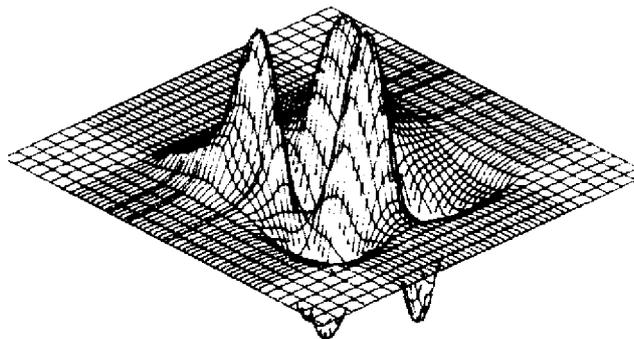
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.9 - 7- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 8- harmônico direto
grupo rápido

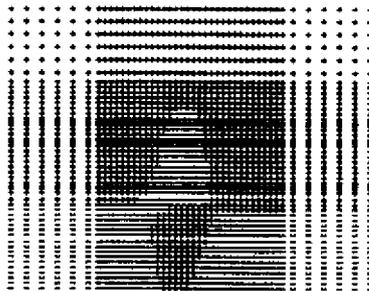


(b) 8^o- harmônico direto
grupo térmico



(c) 8- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 8- harmônico adjunto
grupo térmico

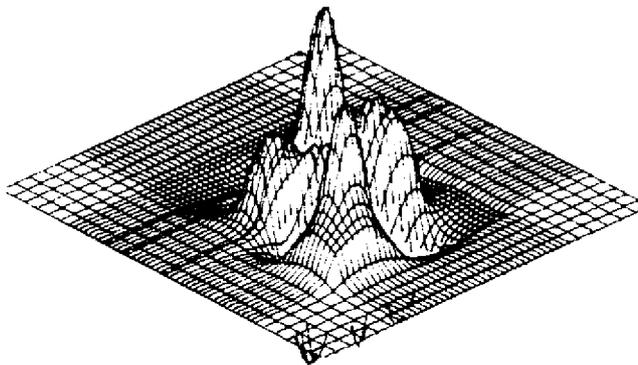
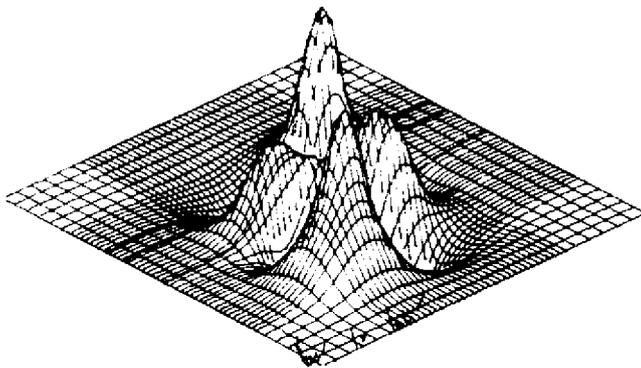


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.10 - 8^o- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

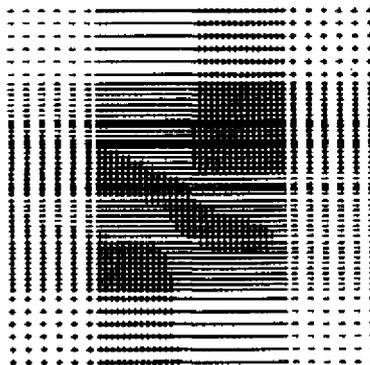
(a) 9^o harmônico direto
grupo rápido

(b) 9^o harmônico direto
grupo térmico



(c) 9^o harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 9^o harmônico adjunto
grupo térmico

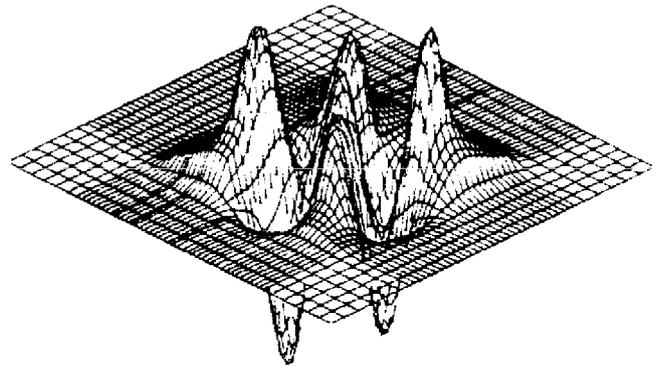
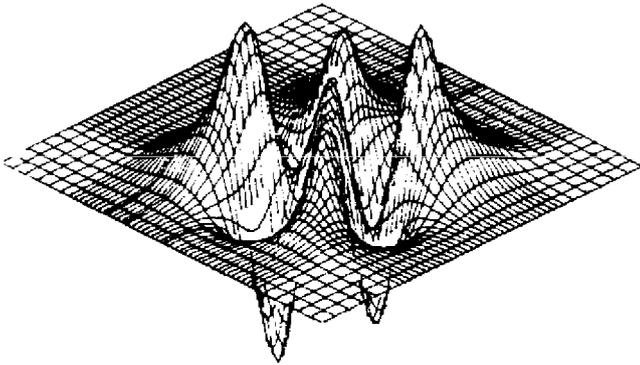


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.11 - 9- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

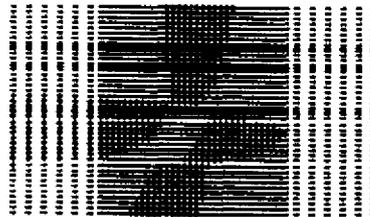
(a) 10^o- harmônico direto
grupo rápido

(b) 10^o- harmônico direto
grupo térmico



(c) 10^o- harmônico adjunto
grupo rápido

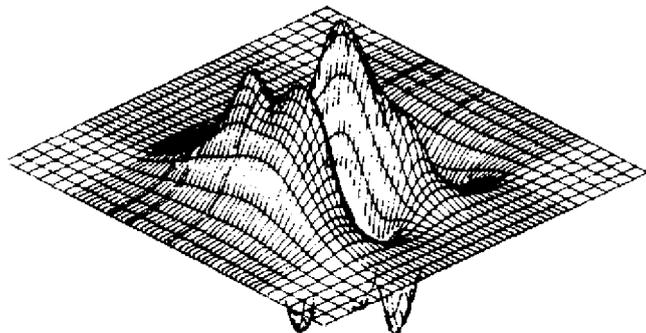
(d) 10^o- harmônico adjunto
grupo térmico



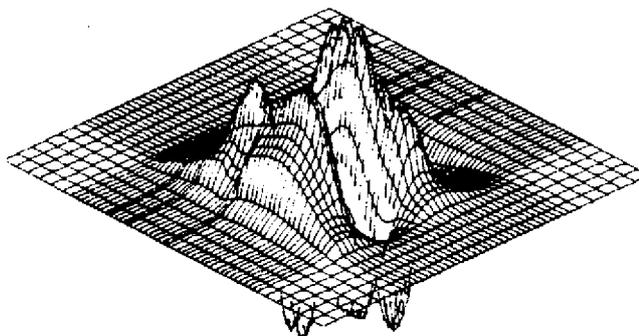
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.12 - 10^o- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 11^- harmônico direto
grupo rápido

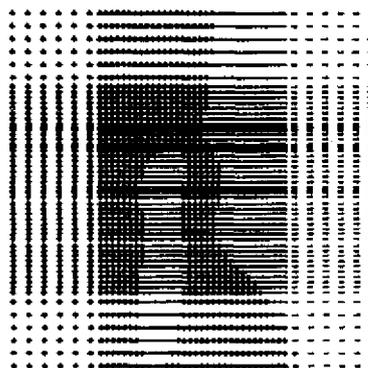


(b) 11^- harmônico direto
grupo térmico



(c) 11^0 harmônico adjunto
grupo rápido

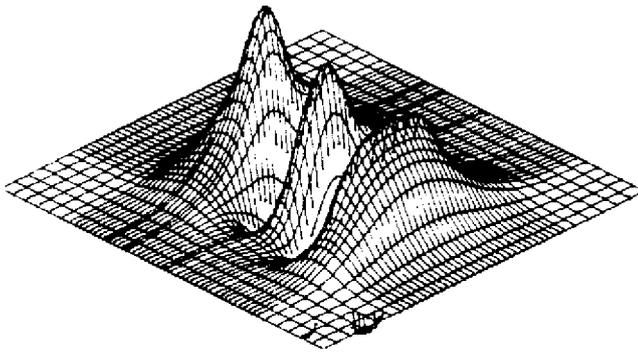
(d) 11^0 harmônico adjunto
grupo térmico



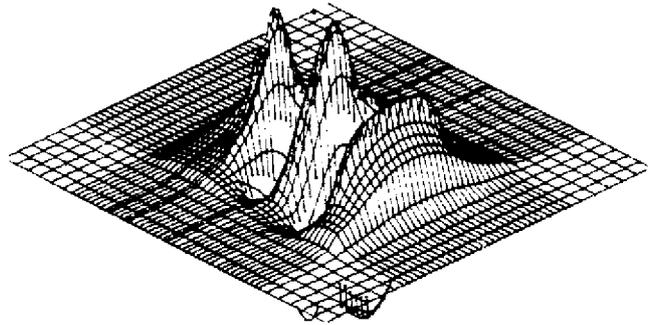
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.13 - 11^- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

(a) 12^o harmônico direto
grupo rápido

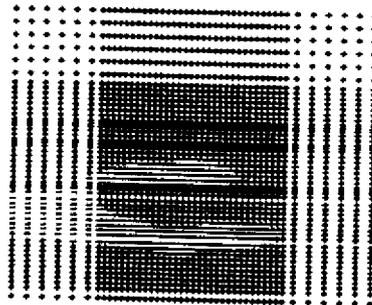


(b) 12^o harmônico direto
grupo térmico



(c) 12^o harmônico adjunto
grupo rápido

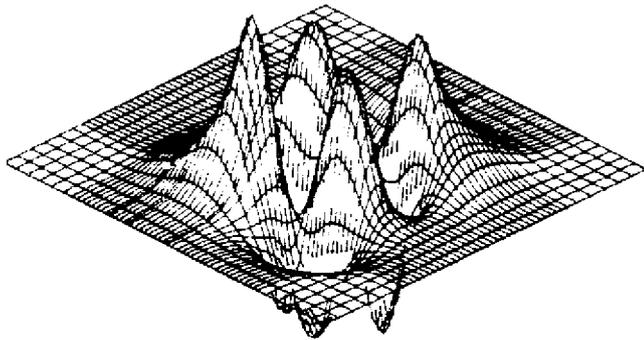
(d) 12^o harmônico adjunto
grupo térmico



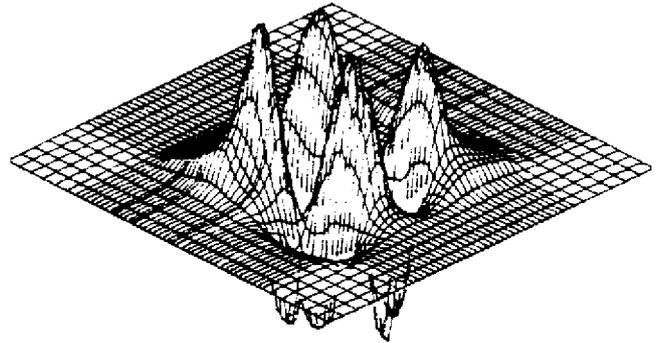
(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.14 - 12^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-

(a) 13^o harmônico direto
grupo rápido



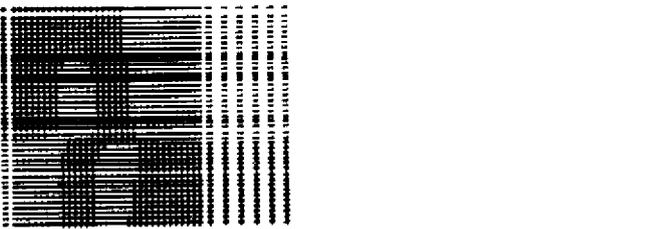
(b) 13^o harmônico direto
grupo térmico



(c) 13^o harmônico adjunto
grupo rápido



(d) 13^o harmônico adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

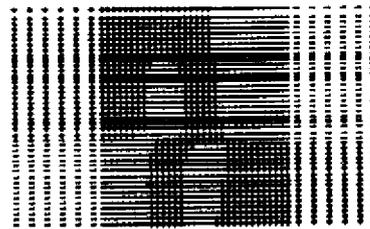
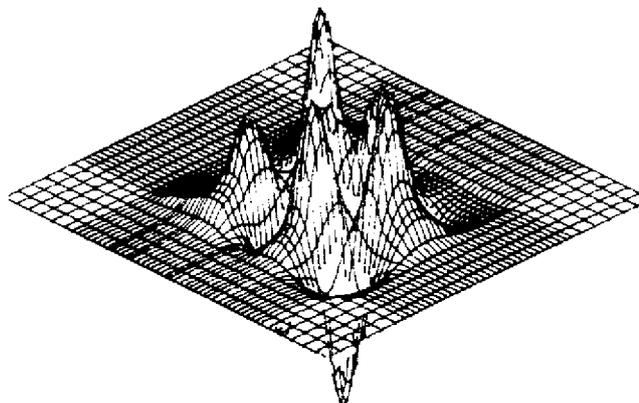
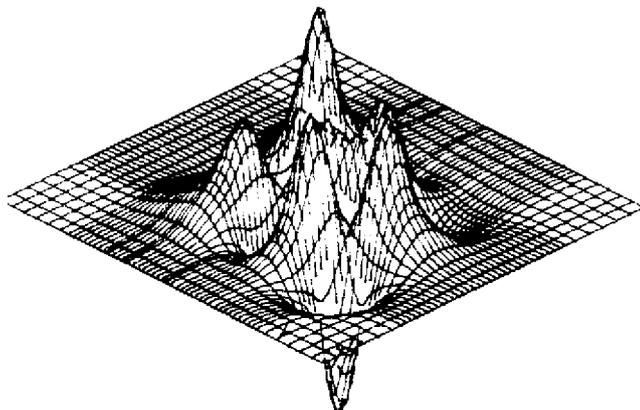


Figura 7.15 - 13^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

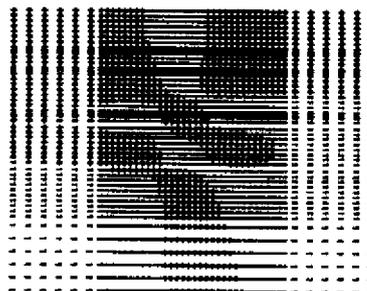
(a) 14^o- harmônico direto
grupo rápido

(b) 14^o- harmônico direto
grupo térmico



(c) 14^o- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 14^o- harmônico adjunto
grupo térmico

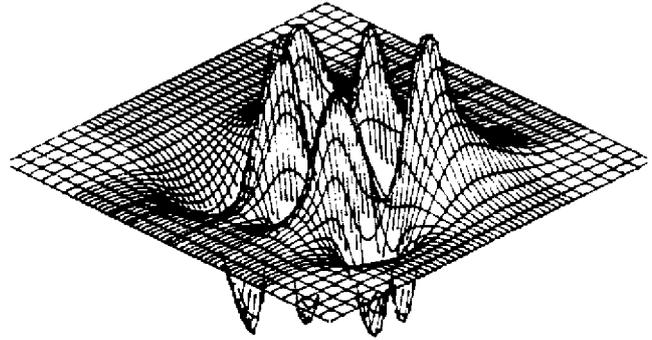
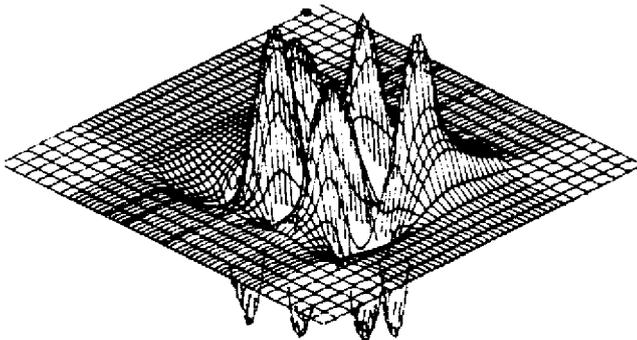


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.16 - 14^o- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

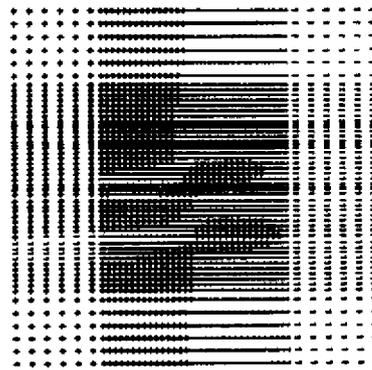
(a) 15^o- harmônico direto
grupo rápido

(b) 15^o- harmônico direto
grupo térmico



(c) 15^o harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 15^o harmônico adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.17 - 15^o- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator IEA-R1

7.2 - Reator Angra I - Representação Bidimensional

Foi utilizado o reator Angra I, cuja configuração é obtida no capítulo 4 de [54] e uma representação esquemática é apresentada na Fig. 7.18. Os harmônicos foram calculados com o Método 2 utilizando-se também um método de aceleração de convergência baseado no polinômio de Chebyshev. O critério de convergência utilizado é de 10^{-4} para o auto-valor e 10^{-3} para o auto-vetor. Utilizou-se geometria bidimensional X-Y com 49 x 49 pontos espaciais e dois grupos de energia de neutrons. As iterações externas para o cálculo de cada harmônico foram limitadas em 600. Caso a convergência não fosse atingida nestas iterações, o cálculo dos harmônicos seguintes era continuado como se este harmônico tivesse convergido. Notou-se que os critérios de convergência foram atingidos antes que fossem realizadas 600 iterações externas, conforme é mostrado na Tabela 7.2.

Foram calculados 11 harmônicos diretos e adjuntos para os grupos rápidos e térmicos, os quais são apresentados nas Figs. 7.19 a 7.29 em perspectiva. Observando-se a Tabela 7.2, verifica-se que os auto-valores 1, 6 e 8 são iguais respectivamente aos autovalores 2, 7 e 9. Isto indica que estes auto-valores são degenerados. Comparando-se as Figs. 7.20, 7.25 e 7.27 respectivamente com as Figs. 7.21, 7.26 e 7.28 nota-se que estas são iguais a menos de uma rotação de 90° . Outro fato importante acontece na Fig. 7.21, onde nota-se que o sinal do harmônico adjunto é oposto ao do direto, porém, o produto de um harmônico por uma constante qualquer, também é um harmônico para o mesmo auto-valor.

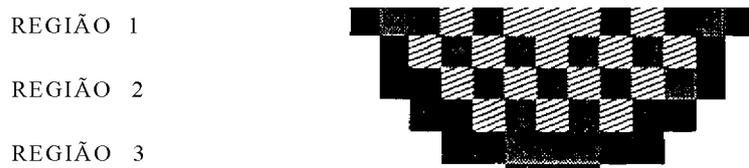


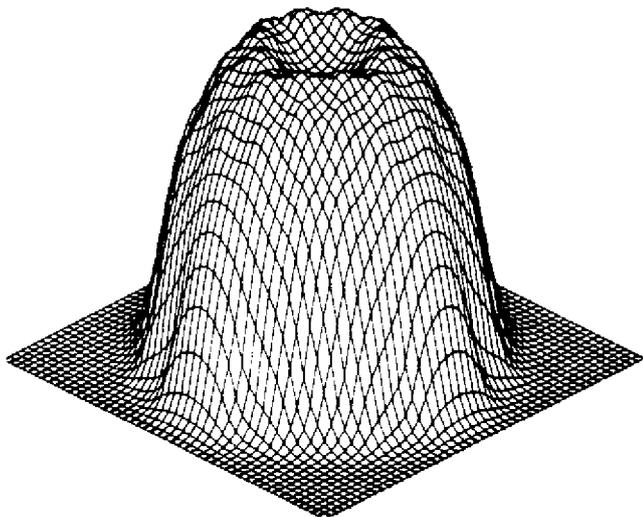
Figura 7.18 - Representação Esquemática do Reator Angra I

Tabela 7.2 - Auto-valores para o Reator Angra I (limitando em 600 iterações)
Com Aceleração de Convergência

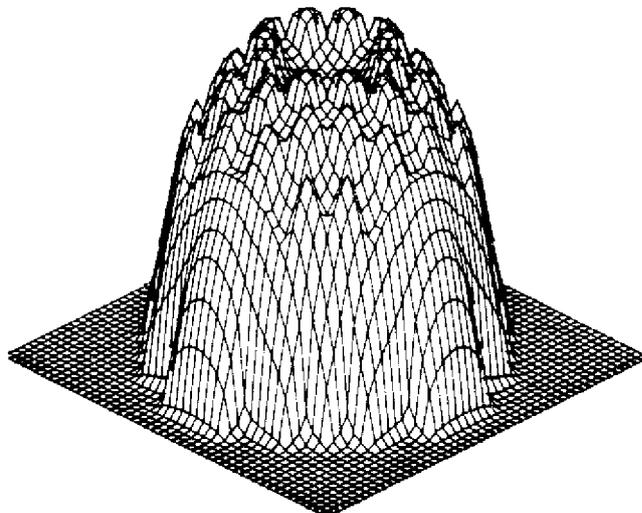
n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0023971	26	1,0024134	15
1	0,9850841	76	0,9850844	26
2	0,9850827	96	0,9850819	27
3	0,9593776	94	0,9593776	43
4	0,9564586	337	0,9564586	40
5	0,9350697	114	0,9350025	26
6	0,9255136	103	0,9255134	27
7	0,9255135	140	0,9255135	40
8	0,8958398	481	0,8958400	89
9	0,8958399	557	0,8958401	43
10	0,8948154	80	0,8948154	25

critério de convergência • 10^{-6} no auto-valor
 10^{-4} no auto-vetor

(a) harmônico fundamental direto
grupo rápido

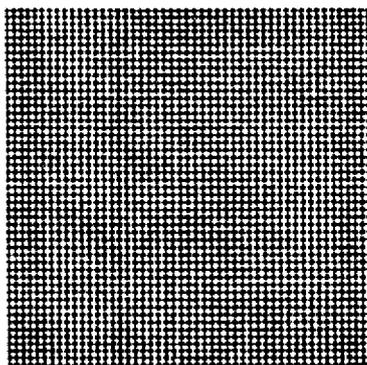


(b) harmônico fundamental direto
grupo térmico



(c) harmônico fundamental adjunto
grupo rápido

(d) harmônico fundamental adjunto
grupo térmico

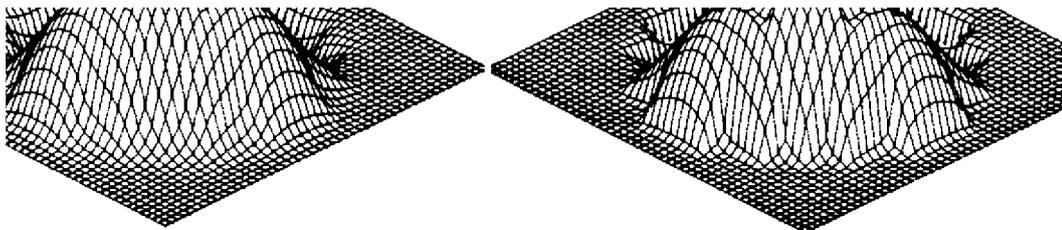


(e) distribuição de sinal do harmônico

7.19 - Harmônico Fundamental Direto e Adjunto para o Reator Angra

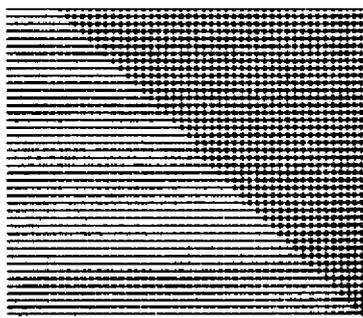
(a) 1- harmônico direto
grupo rápido

(b) 1- harmônico direto
grupo térmico



(c) 1°- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 1°- harmônico adjunto
grupo térmico

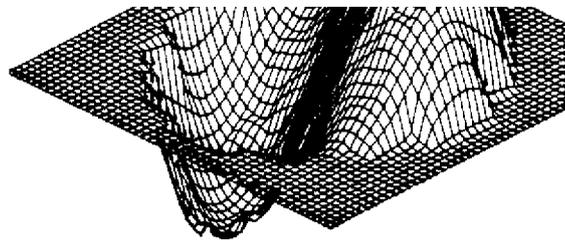
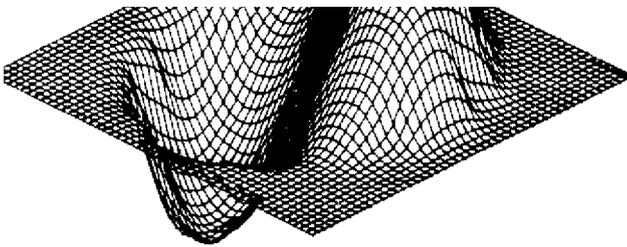


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.20 - 1°- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

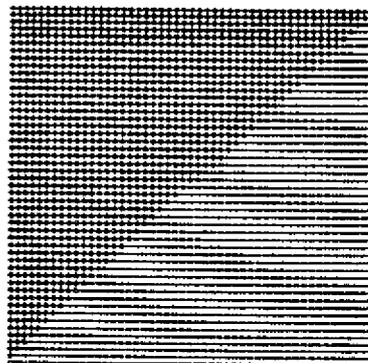
(a) 22 harmônico direto
grupo rápido

(b) 22- harmônico direto
grupo térmico



(c) 22- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 22 harmônico adjunto
grupo térmico

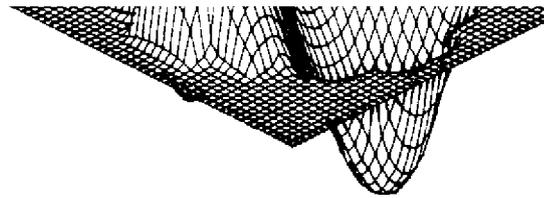
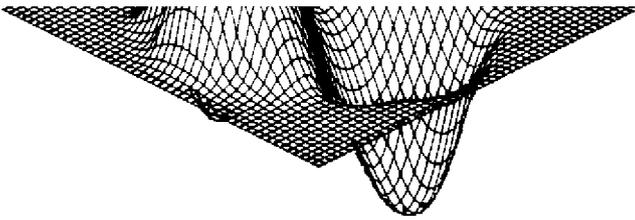


(e) distribuição de sinal do har

Figura 7.21 - 22 Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

(a) 3°- harmônico direto
grupo rápido

(b) 3°- harmônico direto
grupo térmico



(c) 3°- harmônico adjunto
grupo rápido

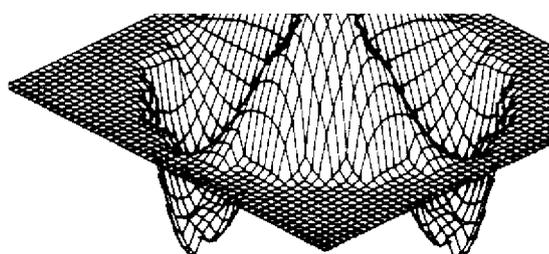
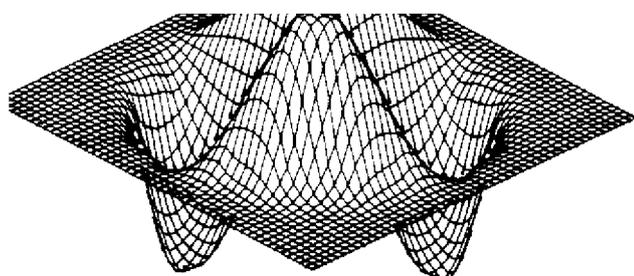
(d) 3°- harmônico adjunto
grupo térmico

(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.22 - 3° Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

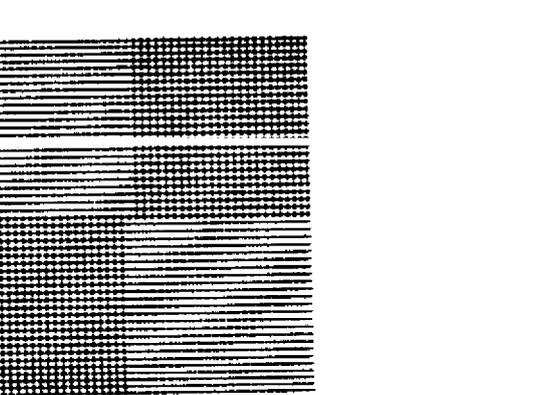
(a) 4^o harmônico direto
grupo rápido

(b) 4^o harmônico direto
grupo térmico



(c) 4^o harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 4^o harmônico adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

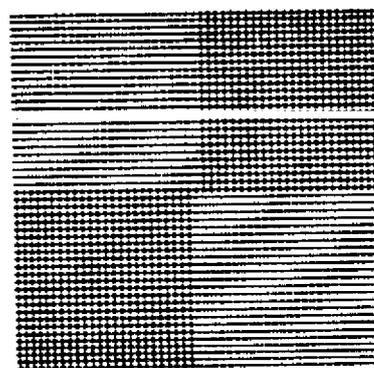
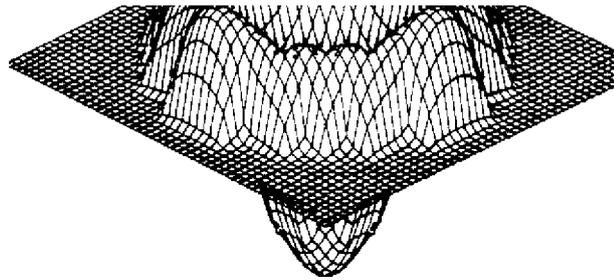
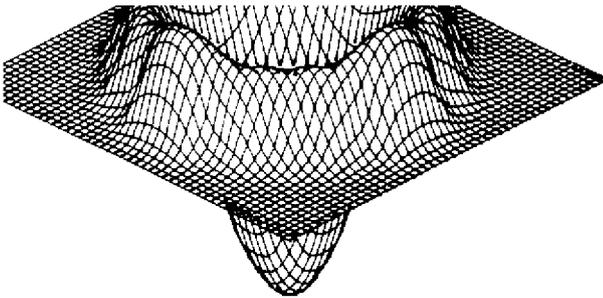


Figura 7.23 - 4^o Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

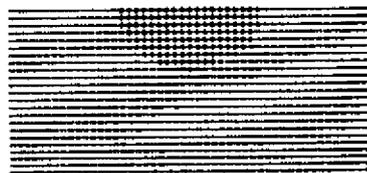
(a) 5°- harmônico direto
grupo rápido

(b) 5°- harmônico direto
grupo térmico



(c) 5°- harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 5- harmônico adjunto
grupo térmico

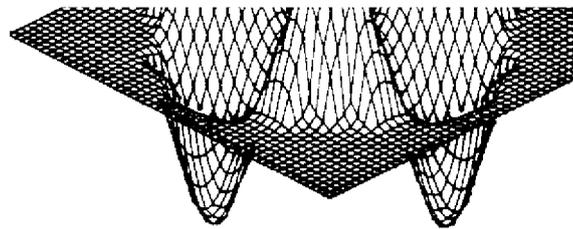
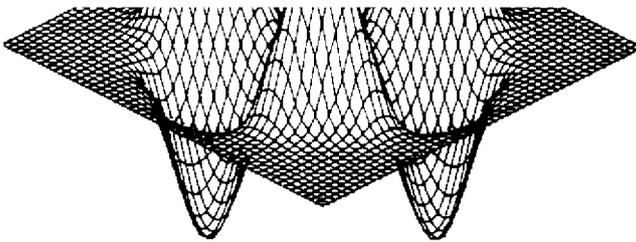


(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.24 - 5° Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

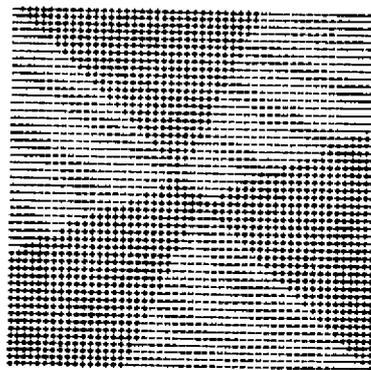
(a) 6— harmônico direto
grupo rápido

(b) 6— harmônico direto
grupo térmico



(c) 63. harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 6— harmônico adjunto
grupo térmico



(e) distribuição de sinal do harmônico

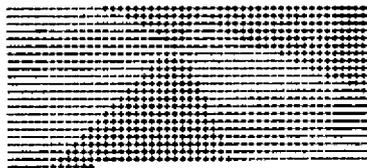
Figura 7.25 - 63. Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

(a) 7- harmônico direto
grupo rápido

(b) 7°- harmônico direto
grupo térmico

(c) 7° harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 7°- harmônico adjunto
grupo térmico



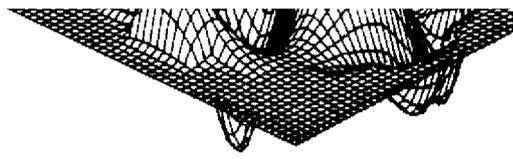
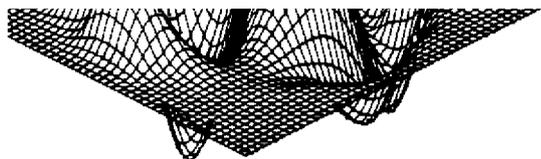
f?ÍÍÜjÍÍ; Hsjrr;~;"——

(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.26 - 7° Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

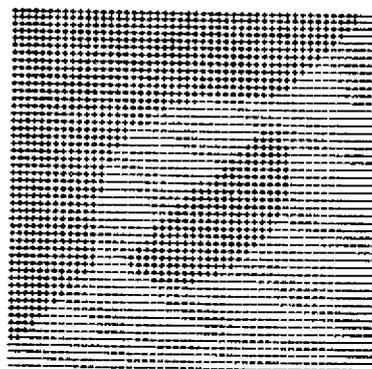
(a) 8º- harmónico direto
grupo rápido

(b) 89. harmónico direto
grupo térmico



(c) 82 harmónico adjunto
grupo rápido

(d) 89. harmónico adjunto
grupo térmico

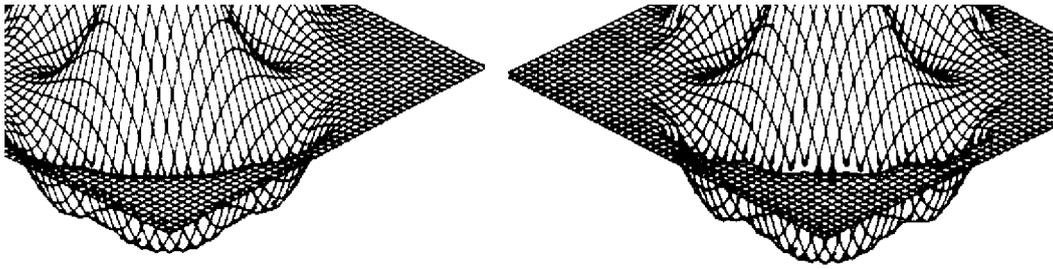


(e) distribuição de sinal do harmónico

Figura 7.27 - 8º- Harmónico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

(a) 9- harmônico direto
grupo rápido

(b) 9- harmônico direto
grupo térmico



(c) 9°- harmônico adjunto
grupo rápido

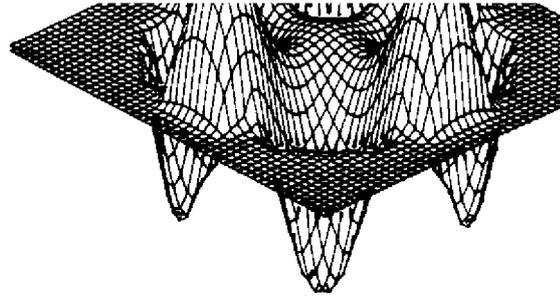
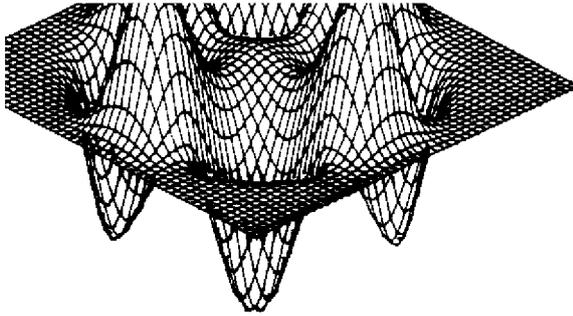
(d) 9° harmônico adjunto
grupo térmico

(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.28 - 9°- Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angra I

(a) 10- harmônico direto
grupo rápido

(b) 10²- harmônico direto
grupo térmico



(c) 102. harmônico adjunto
grupo rápido

(d) 102 harmônico adjunto
grupo térmico

(e) distribuição de sinal do harmônico

Figura 7.29 - 102 Harmônico Direto e Adjunto para o Reator Angi

CAPÍTULO 8

CONCLUSÃO

Vários métodos de obtenção de harmônicos estáticos foram estudados. Os dois métodos que pareceram mais indicados foram implementados no código CITATION.

Testes realizados utilizando-se estes dois métodos mostraram que apenas com o Método 2 era viável a obtenção de harmônicos bidimensionais para problemas reais, entretanto, o elevado número de iterações externas requeridas para o cálculo de cada harmônico demonstrava a necessidade de introdução de um esquema de aceleração de convergência.

O Método 2 também foi implementado no código CITATION para cálculo de harmônicos tridimensionais, entretanto os altos tempos computacionais envolvidos nestes cálculos fizeram com que este desenvolvimento fosse interrompido.

Um método de aceleração de convergência baseado em polinômios de Chebyshev foi introduzido no código, reduzindo em mais de 50% o número de iterações externas requeridas para resolver o mesmo problema sem a aceleração.

Foram obtidos 15 harmônicos para o reator de pesquisa IEA-R1 e 10 harmônicos para o reator de potência Angra I. Os resultados foram apresentados em forma de tabelas e figuras.

Foi ainda desenvolvido neste trabalho um programa para confecção de gráficos em perspectiva para permitir a visualização dos harmônicos calculados com o código CITATION.

Cuidados especiais devem ser tomados no cálculo de harmônicos com auto-valores muito próximos. A ausência de um esquema eficiente de aceleração de convergência pode fazer com que estes harmônicos com auto-valores ligeiramente diferentes sejam interpretados como harmônicos degenerados, com o processo iterativo convergindo erroneamente para uma combinação linear destes.

Como sugestão para trabalhos futuros têm-se:

- a) retomar o desenvolvimento da obtenção de harmônicos tridimensionais com o código CITATION;

- b) estudar a obtenção de harmônicos tridimensionais a partir de síntese de harmônicos uni e bidimensionais;
- c) realizar um dimensionamento dinâmico dos vetores da subrotina de aceleração de convergência para que não seja perdida a versatilidade de alocação de memória do código CITATION;
- d) estudar novos métodos para melhorar a estimativa da razão de dominância σ utilizada na aceleração de convergência.

BIBLIOGRAFIA

- [1] - ADAMS, C. H.; "Calculations of Harmonics of the Multigroup, Diffusion-Theory, Finite-Difference Equations Using DIF3D"; FRA-TM-119, Argonne National Laboratory, 1979.
- [2] - ALTUS, E.; "A global-Local Interactive Method for Fast Convergency of Iterative Finite Difference Solution of PDE"; Computers & Structures, 33: 915-921, 1989.
- [3] - ANDRZEJEWSKI, K.; "New Iterative Methods for CITATION Code"; Proceedings Int. Top. Meet, on Adv. on Math. Meth. for the Sol. of Nucl. Eng. Probl., vol 1: 402-409.
- [4] - BECKNER, W. D.; RYDIN, R. A.; "A Higher Order Relationship Between Static Power Tilts and Eigenvalue Separation in Nuclear Reactors"; Nucl. Sci. Eng., 56: 131-141, 1975.
- [5] - BELCHIOR JR., A.; MOREIRA, J. M. L.; "Calculation of Two Dimensional Lambda Modes", Trans. Am. Nucl. Soc, 63: 420-422, 1991.
- [6] - BELCHIOR JR., A.; MOREIRA, J. M. L.; "Cálculo de Harmônicos Estáticos de um Reator Nuclear com o Código CITATION"; Anais do VII ENFIR: 177-187, Recife, 1989.
- [7] - BEZERRA, A. F. A.; NARAIN, R.; "Selection of an Optimun Position for Transient Flux Measurements in Subcritical System RESUCO"; Anais do I CGEN, 198-201, 1986.
- [8] - BOBONE, R.; "The Method of Solution - Functions: A Computer - Oriented Solution of Boundary Value Problems as Applied to Nuclear Reactor - Part. 1. Cylindrical Reactors in p-6 Geometry"; Nucl. Sci. Eng., 29: 337-353, 1967.
- [9] - BRITTAIN, I.; "Analysis of Rod Drop and Pulsed Source Measurements of Reactivity in the Winfrith SGHWR", AEEW-R-640, United Kingdom Atomic Energy Authority, 1970.
- [10] - CECCHINI, G. P.; SALVATORES, M.; "Advances in the Generalized Perturbation Theory"; Nucl. Sci. Eng., 46: 304-320, 1971.
- [11] - CHAN, P. S. W., "A High Order Method in Flux Mapping"; INIS-MF-8473: 36-41, 1981.
- [12] - CLARO, L. H.; ALVIM, A. C. M.; THOME, Z. D.; "Calculations of Intense Localized Perturbations with the Pseudo-Harmonics Method"; Ann. Nucl. Energy, 14: 619-622,

1987.

- [13] - DEVOOGHT, J.; "Spectrum of the Multigroup-Multipoint Diffusion Operator with Delayed Neutrons"; Nucl. Sci. Eng., **67**: 147-161, 1978.
- [14] - DRUMM, C.; "Calculation of the Lambda-Modes of the Neutron Diffusion Equation Using Variational Methods"; Publicação interna, Michigan University, 1982.
- [15] - DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. J.; "Nuclear Reactor Analysis"; John Wiley & Sons Inc., New York, 1976.
- [16] - FERGUSON, D. R.; DERSTINE, K. L.; "Optimized Iteration Strategies and Data Management Considerations for Fast Reactor Finite Difference Diffusion Theory Codes"; Nucl. Sci. Eng., **64**: 593-604, 1977..
- [17] - FILLIPPONE, W. L.; CONVERSANO, R.; "Ordinary and Generalized Eigenvectors of Low-Order S_n -Diamond-Difference Transport Operators"; Nucl. Sci. Eng., **83**: 75-89, 1983.
- [18] - FLANDERS, D. A.; SHORTLEY, G.; "Numerical Determination of Fundamental Modes"; J. Appl. Phys, **21**: 1326-1333, 1950.
- [19] - FOULKE, L. R.; GYFTOPOULOS, E. P.; "Application of the Natural Mode Approximation to Space-Time Reactor Problems"; Nucl. Sci. Eng., **30**: 419-435, 1967.
- [20] - FOWLER, T. B.; VONDY, D. R.; CUNNINGHAM, G. W.; "Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION"; ORNL-TM 2496, Rev. 2, Oak Ridge National Laboratory, 1971.
- [21] - FREOHLICH, R.; "A Theoretical Foundation for Coarse Mesh Variational Techniques", John Jay Hopkins Laboratory for Pure and Applied Science, General Atomic Division, California.
- [22] - GANDINI, A.; "Implicit and Explicit Higher Order Perturbation Methods for Nuclear Reactor Analysis"; Nucl. Sci. Eng., **67**: 347-355, 1978.
- [23] - GANDINI, A.; "On the Standard Perturbation Theory"; Nucl. Sci. Eng., **79**: 426-432, 1981.
- [24] - HABETLER, G. J.; MARTINO, M. A.; "Existence Theorems and Spectral Theory for Multigroup Diffusion Model"; Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, vol XI: 127-188, Providence, Rhode Island, 1961.

- [25] - HÉBERT, A.; "Preconditioning the Power Method for Reactor Calculation"; Nucl. Sci. Eng., **94**: 1-11, 1986.
- [26] - HAGEMAN, L. A.; "Numerical Methods and Techniques Used in the Two Dimensional Neutron Diffusion Program PDQ-5", WAPD-TM-364, Bettis Atomic Power Laboratory, 1963.
- [27] - HINCHLEY, E.; KUGLER, G.; "On-Line Control of the CANDU-PHW Power Distribution"; AECL-5045, 1975.
- [28] - ISBASESCU, M.; GHEORGHIU, E.; "Separation of Decay Constants in Pulsed Neutron Experiments on a Subcritical Assembly Using Modal Analysis"; Rev. Roum. Phys., **20**: 611-624, 1975.
- [29] - KAPLAN, S.; "The Property of Finality and the Analysis of Problems in Reactor Space-Time Kinetics by Various Modal Expansions"; Nucl. Sci. Eng., **9**: 357-361, 1961.
- [30] - KOSAKA, N.; FANARO, L. C. C. B.; YAMAGUCHI; "Cálculo dos Parâmetros Neutrônicos do Reator IEA-R1 e Proposta de uma nova Configuração"; Anais do VII ENFIR: 237-248, Recife, 1989.
- [31] - KULKARNI, A. K.; "Analytical Method for Computing the Higher Harmonics of the Diffusion Equation in $R-Z-\rho$ Geometry"; International Physics Conferences, LaGrange Park, 18-22, Sep 1988.
- [32] - LUX AT, J. C.; FRESCURA, G. M.; "Space-Time Neutronic Analysis of Postulated Loss-of-Coolant Accidents in Candu Reactors"; Nucl. Technol., **46**: 507-516, 1979.
- [33] - MITANI, H.; "Higher Order Perturbation Method in Reactor Calculations"; Nucl. Sci. Eng., **51**: 180-188, 1973.
- [34] - MOREIRA, J. M. L.; "Space-Time Analysis of Reactivity Measurements", Ph.D. Thesis, Michigan University, 1984.
- [35] - MOREIRA, J. M. L.; LEE, J. C.; "Space-Time Analysis of Reactor-Control-Rod-Worth Measurements", Nucl. Sci. Eng., **86**: 91-105, 1984.
- [36] - MOREIRA, J. M. L.; LEE, J. C.; "Accuracy of the Modal-Local Method for Reactivity Determination"; Nucl. Sci. Eng., **98**: 244-254, 1988.
- [37] - NAKAMURA, S.; "Computation Methods in Engineering and Science"; John Wiley and

- [38] - NEWMAN, W. M.; SPROULL R. F.; "Principles of Interactive Computer Graphics"; McGraw-Hill, London, 1979
- [39] - PALMIOTTI, G.; "Use of the Explicit High-Order Perturbation Formulation"; Nucl. Sci. Eng., **83**: 281-315, 1983.
- [40] - PALMIOTTI, G.; SALVATORES, M.; "Calcul des Harmoniques en Geometric Hexagonale"; EDF Bulletin de la Direction des Études et Recherches, Série A N^o 1: 43-60, 1985.
- [41] - SAITO, R.; KATSURAGI, S.; "Higher Order Perturbation Method in reactor Calculation"; J. Nucl. Sci. Technol., 6: 303-307, 1969.
- [42] - SILVA, F. C; WAINTRAUB, S.; THOME, Z. D.; ALVIM, A. C. M.; "The Pseudo-Harmonics Perturbation Method Application to a PWR"; Ann. Nucl. Energy, **14**: 99-106, 1987.
- [43] - SILVA, F. C; ROTENBERG, S.; THOMÉ, Z. D.; "Métodos dos Pseudo-Harmônicos: Uma Aplicação a Reatores Térmicos"; PEN-135, COPPE/UFRJ, 1985.
- [44] - STACEY Jr., W. M.; "Space-Time Nuclear Reactor Kinetics"; Chap. 5, Academic Press, New York, 1969.
- [45] - SUTTON, T. M.; "Wielandt Iteration as Applied to the Nodal Expansion Method"; Nucl. Sci. Eng., **98**: 169-173, 1988.
- [46] - VARGA, R. S.; "Matrix Iterative Analysis"; Prentice Hall, Englewood Clifs, N. J., 1962.
- [47] - VONDY, D. R., FOWLER, T. B.; "Solving the Uncommon Nuclear Reactor Core Neutronics Problems"; Nucl. Sci. Eng., **83**: 100-111, 1983.
- [48] - VONDY, D. R.; FOWLER, T. B.; "A Double Error Mode Extrapolation Procedure"; Nucl. Sci. Eng., 198-201, 1982.
- [49] - VONDY, D. R.; FOWLER, T. B.; "Restrained Acceleration in Iteration"; Nucl. Sci. Eng., **65**: 415-416, 1978.
- [50] - WIGHT, A. L.; WIEB, P. P.; "Simulation of Darlington Fuelling with Simodex, A Fuel management Program Based on Modal Expansion Method"; INIS-MF-8473, 16-28.
- [51] - WIGNER, E. P.; "Mathematical Problems of Nuclear Reactor Theory"; Proceedings of

- [52] - YORIYAZ, H.; MOREIRA, J. M. L.; "Sistema 'In-Core' para Mapeamento da Distribuição de Potência no Reator IEA-R1-IPEN-CNEN/SP"; Anais do VII ENFIR: 375-385, Recife, 1989.

- [53] - "An Iterative Procedure for Calculating the Higher Harmonic of the Diffusion Equation: The MONIC Code"; TDAI-94, 1976.

- [54] - "FSAR - Final Safety Analysis Report"; Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto, unid. 1, FURNAS Centrais Elétricas.

APÊNDICE 1

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Neste Apêndice é apresentado o desenvolvimento de um programa computacional para a resolução da equação de difusão. Este desenvolvimento é feito de uma forma bastante geral, sendo particularizado apenas quando da introdução da representação em diferenças finitas, onde considera-se apenas geometria unidimensional.

A equação a ser resolvida é a representação em multi-grupos de energia da Equação de difusão independente do tempo Eq. (2.3.1), que é escrita como:

$$-V-D_g(r)V\phi_g(r) + \sum_{g' < g} \Sigma_{g',-g}(r)\phi_{g'}(r) = -\sum_{g'=1}^G \Sigma_{g,-g'}(r)c\phi_{g'}(r), \quad g=1, \dots, G. \quad (A1.1)$$

As condições de contorno para a Eq. (A1.1) são do tipo homogêneas:

$$D(r) \frac{d\phi_g(r)}{dr} + a_g(r)\phi_g(r) = 0, \quad r \in T, \quad (A1.2)$$

onde T é o contorno da região R onde procura-se solução da Eq. (A1.1).

Dividindo-se a região R em uma malha regular contendo N células e utilizando diferenças finitas pode-se escrever a equação para os fluxos médios nas células na forma matricial:

$$\mathbf{E} \mathbf{g} \cdot h \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{g} = \mathbf{I} \mathbf{g} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{g} = \mathbf{I} \mathbf{g} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{g} \quad (A1.3)$$

O vetor ϕ_g tem comprimento N e as matrizes $Z_g, J_{-g}, X_g > F_g$ são matrizes diagonais de dimensão N x N. Se os pontos da malha forem ordenados de forma linear, ou seja: linha por linha, plano por plano a matriz Dg é uma matriz tri, penta e heptadiagonal para problemas uni, bi e tridimensionais respectivamente.

As G's equações que compõem o sistema expresso pela Eq. (A1.3) podem ser agrupadas em uma única equação matricial:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = - \mathbf{M} \cdot \mathbf{S}. \quad (A1.4)$$

obtida escrevendo a equação de auto-valores para a fonte via fissão S, definido por:

$$S = F^T \cdot \sum_{g=1}^G \hat{F}_g \hat{C}_g \hat{G}_g \quad (A1.10)$$

pode ser definida a matriz N*G x N:

$$B = \text{col} [B_1, B_2, \dots, B_G] = L^{-1} \cdot X, \quad (A1.11)$$

com as matrizes N x N, B_j, expressas por:

$$B_j = \sum_{i=1}^N a_{ij} \cdot \int_{g=1}^G L_{ij} \cdot S_{ij} \cdot g' \cdot g' \quad (A1.12)$$

Estas definições, juntamente com a Eq. (A1.4) permitem escrever λ como:

$$\lambda = - \frac{B_g \cdot S}{A} \quad (A1.13)$$

Premultiplicando a Eq. (A1.9) e utilizando as Eqs. (A1.8) e (A1.10) define-se o problema de auto-valores na forma reduzida:

$$A \cdot S = Q \cdot S, \quad (A1.14)$$

onde:

$$F^T \cdot B = \sum_{g=1}^G F_g \cdot B_g \quad (A1.15)$$

Se 0 e A são auto-vetor e o correspondente auto-valor diferente de zero da Eq. (A1.9) S e A são auto-vetor e auto-valor da Eq. (A1.14). Hageman [26] mostrou através de transformações de similaridade que o espectro de auto-valores de Q é idêntico ao de L⁻¹M e que qualquer auto-vetor totalmente positivo de Q ou é um múltiplo escalar de S_j ou é um auto-vetor correspondente a um auto-vetor nulo. Portanto Eqs. (A1.9) e (A1.14) definem problemas de auto valores equivalentes.

A resolução das Eqs. (A1.9) ou (A1.14) é geralmente feita através do método da potência. A maioria dos códigos computacionais utiliza um processo de iterações internas e externas para resolver a Eq. (A1.14), como é o caso do código CITATION [20]. No método da potência, escolhe-se um vetor inicial S⁽⁰⁾ e um escalar A⁽⁰⁾ e utiliza-se o processo

iterativo.

$$x^{(n)} = A^{(n-1)} x^{(n-1)} \quad (A1.16)$$

com $A^{(n)} = A^{(n-1)}$

$$x^{(n-1)}$$

onde n é o índice da iteração externa e $\| \cdot \|$ denota a norma vetorial L_1 . O cálculo de $Q S^{(n-1)}$ envolve um outro processo iterativo conhecido como iterações internas. Das Eqs. (A1.12) e (A1.13) pode se escrever:

$$Q S^{(n-1)} = \sum_{g=1}^G E_g L_g S^{(n-1)} = A^{(n-1)} \varphi_6^{(n)} \quad (A1.17)$$

onde:

$$x^{(n-1)} \quad (A1.18)$$

Uma vez obtido $\varphi_6^{(n)}$, $Q S^{(n-1)}$ e, por conseguinte, $S^{(n)}$ são facilmente calculados.

A substituição da Eq. (A1.12) na Eq. (A1.18) define um sistema linear de equações na forma.

$$A_g = b g^{(n)}, \quad g = 1, 2, \dots, G, \quad (A1.19)$$

onde:

$$b g^{(n)} = [\sum_{g'=1}^G T_{gg'}, \varphi_6^{(n)}] + \frac{1}{x^{(n-1)}} \varphi_6^{(n-1)} \quad (A1.20)$$

A inversão direta das matrizes A_g não é prática para problemas multidimensionais, levando à utilização de métodos iterativos para esta resolução, como por exemplo o método de Gauss-Siedel ou o método de over-relaxação. Este processo iterativo é conhecido como iteração interna.

APÊNDICE 2

ESTUDO DO CÓDIGO CITATION.

O código CITATION foi desenvolvido pelo ORNL para resolver problemas envolvendo a representação em diferenças finitas da equação de difusão. O código foi escrito para, além de determinar o harmônico fundamental da equação de difusão, fazer cálculo de queima de combustível nuclear com estratégia de gerenciamento deste combustível e também a resolução do problema adjunto com aplicação à teoria de perturbação de 1ª ordem.

Este código é escrito em linguagem FORTRAN IV, sendo composto por aproximadamente 30.000 linhas de programação divididas entre 197 subrotinas. A descrição da função de cada uma destas subrotinas é apresentada na Tabela A2.1.

Tabela A2.1 - Subrotinas do código CITATION

NOME	FUNÇÃO
MAIN	realiza a alocação de memória
INPT	inicializa variáveis, chama subrotinas de entrada de dados e transmite a posição de cada variável para a subrotina CALR
GRIT	bloco para transferência de dados
RQED	determina se foi requerida uma impressão
CALR	controla os cálculos para o problema inteiro
IPTM	subrotina de controle de entrada de dados
OPT1	configuração para a subrotina de atualização de seções de choque microscópicas
GETC	verifica os limites do arquivo de seções de choque microscópica do CITATION
GETE	verifica os limites do arquivo de seções de choque microscópica do EXTERMINATOR-2
CSTC	controla a atualização de seções de choque microscópicas
CRDR	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
UPDT	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
RONE	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
RALL	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
COPY	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
WALL	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
WART	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
RAEN	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
SNSN	rotina de atualização de seções de choque microscópicas
ORDE	rotina de atualização de seções de choque microscópicas

PUNS rotina de atualização de seções de choque microscópicas
DTFP rotina de atualização de seções de choque microscópicas
FLTF rotina de atualização de seções de choque microscópicas
SETV zera algumas variáveis
CNTR lê dados de entrada para a seção 001
HIST lê dados de entrada para a seções 002 e 022
GEOM lê dados de entrada para a seção 003
LVMX lê dados de entrada para a seção 004
MESH calcula o volume da região e o espaçamento da malha
COMP lê dados de entrada para a seção 005 e atribui a composição para cada ponto da malha para geometria uni e bidimensional
CMOT imprime o mapa de composição dos pontos da malha para geometria uni e bidimensional
KOMP lê dados de entrada para a seção 005 e atribui a composição para cada ponto da malha para geometria tridimensional
KMOT imprime o mapa de composição dos pontos da malha para geometria tridimensional
OVER lê dados da seção 006 e reatribui a composição para os pontos da malha sobrepostos
MACR lê dados da seção 008
SSET lê dados da seção 012
CLAS lê dados da seção 018
DENS lê dados da seção 020
BKLE lê dados da seção 024
FXSO lê dados da seção 026
BEER edita mapa de pontos de fonte fixa
SRCH lê dados da seção 028
RODI lê dados da seção 030
DCAY lê constante decaimento nos dados da seção 034
YELD lê "yield" nos dados da seção 034
CHAN lê dados da seção 036
IMXS lê dados da seção 038
IPRT lê dados da seção 040
DYPD lê dados da seção 052
KXNX obtém o número de núcleos e grupos de energia do arquivo de seções de choque microscópica
TAPE processa o arquivo de seções de choque microscópica e estabelece cadeia de queima
TAPX estabelece a classificação do nuclídeo a partir do arquivo de seções de choque microscópica
NSRT insere o número do nuclídeo no vetor de classificação
KSIG calcula o armazenamento dinâmico de variáveis
KRST calcula o armazenamento dinâmico de variáveis
CNIO calcula o armazenamento dinâmico de variáveis

BNSB insere constantes de contorno nos vetores apropriados
CPNC imprime dados de classificação de núclídeos
DISK atualiza dados armazenados na unidade 10
SIZE compara os limites do problema com os limites máximos
RSTR lê unidade 13 para "restart"
TRAN utilizado para "restart"
SHOX utilizada para I/O
WI03 utilizada para I/O
GEDT rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
GRIV rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
CNTL rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
CION rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
FMIP rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
PLIN rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
PUTA rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
JUNK rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
SHUF rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
SHIN rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
STSH rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
CHCK rotina de entrada de dados para gerenciamento de combustível
STFM rotina de "restart" para gerenciamento de combustível
CSRT rotina de "restart" para gerenciamento de combustível
MBST rotina de "restart" para gerenciamento de combustível
EIGN controla cálculo de auto-valor
BIGS calcula as seções de choque macroscópica por zona
XSET imprime seções de choque macroscópica
EXTR controla extrapolação do fluxo
FASP calcula a fração de absorção no parâmetro procurado
ITED imprime dados de iteração para o problema de auto-valor
STVR utilizado para o gerenciamento de combustível
YNAM utilizado para o gerenciamento de combustível
WNSS escreve concentração inicial do ciclo na unidade I/O
HOWE determina o tipo de cálculo de auto-valor
INFX estabelece a distribuição inicial de fluxo para geometria uni e bidimensional
KNFX estabelece a distribuição inicial de fluxo para geometria tridimensional
FLUX calcula o fluxo e auto-valor para geometria uni e bidimensional
DNSD controla o cálculo das iterações internas para geometria uni e bidimensional
ABPR calcula produção e absorção para geometria uni e bidimensional
LOOP calcula o fluxo médio por região, fonte via fissão e convergência para geometria uni e bidimensional
FINS calcula perda da vareta para geometria uni e bidimensional
UDTE atualiza seções de choque macroscópicas no cálculo de busca direta de concentração

do nuclídeo para geometria uni e bidimensional

CNST Calcula as constantes da equação de diferenças finitas para geometria uni e bidimensional

BEGN inicializa o cálculo de fluxo e auto-valor para geometria uni e bidimensional

RDUE calcula o auto-valor e a seção de choque de absorção relativa minimizando a somatória dos quadrados dos resíduos para geometria uni e bidimensional

FWRD "Une relaxation" ao longo das linhas para cálculo de fluxo para geometria bidimensional

FXRD "line relaxation" ao longo das colunas para cálculo de fluxo para geometria bidimensional

DPER "line relaxation" para problemas de condições de contorno periódicas em geometria bidimensional

HWRD "line relaxation" ao longo das linhas para cálculo de fluxo para geometria hexagonal bidimensional

HXRD "line relaxation" ao longo das colunas para cálculo de fluxo para geometria hexagonal bidimensional

WFLX "line relaxation" ao longo das linhas para cálculo de fluxo para geometria unidimensional

KLUX calcula o fluxo e auto-valor para geometria tridimensional

KNSD controla o cálculo das iterações internas para geometria tridimensional

KBPR calcula produção e absorção para geometria tridimensional

KOOP calcula o fluxo médio por região, fonte via fissão e convergência para geometria tridimensional

KINS calcula perda da vareta para geometria tridimensional

KNST Calcula as constantes da equação de diferenças finitas para geometria tridimensional

KEGN inicializa o cálculo de fluxo e auto-valor para geometria tridimensional

KDUE calcula o auto-valor e a seção de choque de absorção relativa minimizando a somatória dos quadrados dos resíduos para geometria tridimensional

KWRD "line relaxation" ao longo das linhas para cálculo de fluxo para geometria tridimensional

KXRD "line relaxation" ao longo das colunas para cálculo de fluxo para geometria tridimensional

KZRD "line relaxation" para geometria tridimensional

KPER "line relaxation" para problemas de condições de contorno periódicas em geometria tridimensional

KWRD "line relaxation" ao longo das linhas para cálculo de fluxo para geometria hexagonal tridimensional

NMBL calcula balanço de neutrons por zona

SSZU atualiza concentração do nuclídeo procurada por subzona

CONI armazena concentração inicial do ciclo na unidade 16

WSTR escreve dados de "restart" na unidade 13

KRAN utilizada para "restart"
TSCL controla o "time step"
BURN controla cálculo de queima
CYED extrapolação para o fim do ciclo
NUCY resolve a equação para a cadeia de depleção
OUTC controla a edição do problema e imprime o balanço de neutrons por zona
POUT imprime fluxo densidade de potência para geometria uni e bidimensional
KOUT imprime fluxo densidade de potência para geometria tridimensional
PDWT calcula a densidade de potência pontual para geometria uni e bidimensional
KDWT calcula a densidade de potência pontual para geometria tridimensional
HEAT calcula a taxa de acúmulo de calor
PTAB calcula e imprime a taxa de absorção pontual de neutrons por nuclídeo para geometria uni e bidimensional
KTAB calcula e imprime a taxa de absorção pontual de neutrons por nuclídeo para geometria tridimensional
NUDN calcula densidade pontual de neutrons para geometria uni e bidimensional
KUDN calcula densidade pontual de neutrons para geometria tridimensional
DTOR imprime tempo de depleção
CNRA controla edição de taxas de reação e concentração
EDIN imprime concentração de nuclídeos
TABL imprime tabela de resumo de perda de nuclídeo
DLOP rotina de cálculo usada por TABL
RERT imprime taxa de reação de nuclídeos
DNPC imprime dados de neutrons atrasados
CMXS calcula seções de choque macroscópica
PERT rotina de cálculo de perturbação
PIOS configura I/O para cálculo de perturbação
TCOF rotina para cálculo de perturbação
PURT rotina para cálculo de perturbação
KOKN rotina para cálculo de perturbação
BEFF rotina para cálculo de perturbação
VMAP rotina para cálculo de perturbação
NMAP rotina para cálculo de perturbação
RFLX rotina para cálculo de perturbação
MEDT alocação do núcleo no gerenciamento do combustível
DRIV controle do gerenciamento do combustível
XION utilizada no gerenciamento do combustível
INTL inicialização do gerenciamento de combustível
IFCE processamento de dados do gerenciamento de combustível
RADE processamento de dados do gerenciamento de combustível
IFVX utilizada no gerenciamento de combustível
ODER utilizada no gerenciamento de combustível

WCNC utilizada no gerenciamento de combustível
ACCT fornece balanço de massas no gerenciamento de combustível
MANG controla o gerenciamento de combustível
SECO processa dados de interface no gerenciamento de combustível
CFNT considera carregamento inicial no gerenciamento de combustível
DPOT processa descarga no gerenciamento de combustível
LRCY processa alimentação no gerenciamento de combustível
LRTR carregamento do reator no gerenciamento de combustível
GETV utilizada no gerenciamento de combustível
RI02 processamento de dados no gerenciamento de combustível
DCAX decaimento de núclídeos no gerenciamento de combustível
1120 utilizada no gerenciamento de combustível
SADD utilizada no gerenciamento de combustível
CORT edita a concentração de núclídeos no gerenciamento de combustível

APÊNDICE 3

PROGRAMA PARA CONFECCÃO DE GRÁFICOS TRIDIMENSIONAIS EM PERSPECTIVA

Para proporcionar a visualização dos harmônicos estáticos bidimensionais calculados com o código CITATION foi desenvolvido um programa computacional em linguagem Pascal para microcomputadores com saída para o graficador HP7475-A. Este programa confecciona gráficos tridimensionais utilizando perspectiva.

Dado um sistema de coordenadas cartesianas tridimensionais x-y-z, este pode ser representado no plano X-Y conforme mostra a Fig. A3.1.

De acordo com a Fig. A3.1, um ponto P com coordenadas (x_j, y_j, Z_j) pode ser representado no plano X-Y pelas coordenadas (X_j, Y_j) , que estão relacionadas entre si pelas expressões:

$$X_j = X_j \cos \theta_j - y_j \sin \theta_j \quad (A3.1)$$

e

$$Y_j = Z_j - X_j \sin \theta_j - y_j \cos \theta_j \quad (A3.2)$$

Para se representar uma superfície tridimensional em perspectiva deve-se escolher uma forma ordenada de se traçar curvas pertencentes a esta superfície de modo a delimitá-la no espaço dando noção de profundidade para a superfície representada no plano X-Y através da mudança de coordenadas dadas pelas Eq. (A3.1) e (A3.2). Uma forma bastante utilizada é fazer cortes por plano perpendiculares ao eixo x e/ou ao eixo y. Esta forma é inclusive conveniente para a representação dos harmônicos estáticos bidimensionais gerados através do código CITATION, pois estes são calculados utilizando uma malha no plano x-y que já fornece estas curvas resultantes dos cortes.

Um outro ponto importante a ser considerado é a visibilidade das curvas a serem traçadas. Parte destas curvas podem estar escondidas pela parte mais frontal da superfície. Para evitar que uma parte escondida de uma curva seja traçada inicia-se pela curva do corte da superfície pelo plano mais frontal até o mais de trás. A medida que estas curvas são traçadas, o contorno da região abrangendo todas as curvas já traçadas é armazenado. Caso parte de uma curva deva ser traçada no interior desta região, isto significa que esta parte está escondida atrás das parte já traçada da superfície, e portanto não deve ser traçada. A Fig. A3.2 exemplifica esta situação.

A utilização do programa é bastante simples. As superfícies são fornecidas através de arquivo que deve conter os pontos da malha em x e em y e o valor dos harmônicos nos pontos desta. O usuário tem a opção de escolher os ângulos θ_j e ϕ_j (Fig. A3.1) e quais dos harmônicos contidos no arquivo serão graficados.

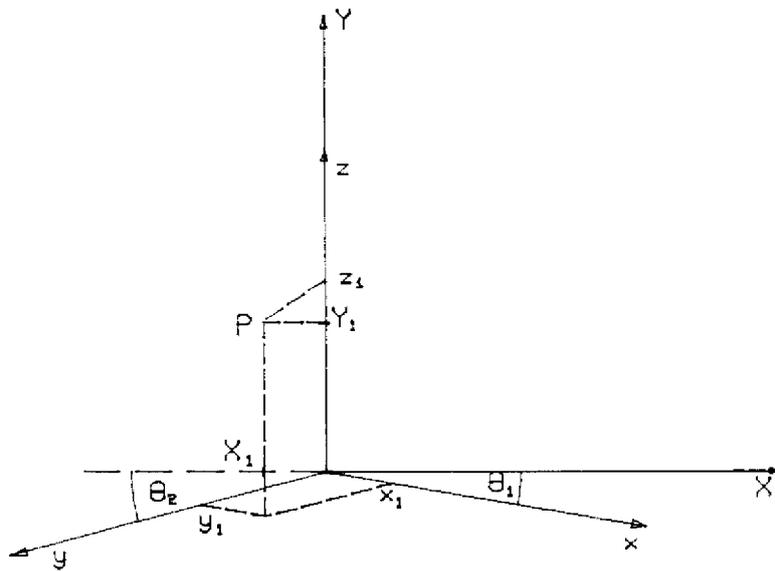


Figura A.3.1 - Representação no Plano X-Y do Espaço Tridimensional x-y-z.

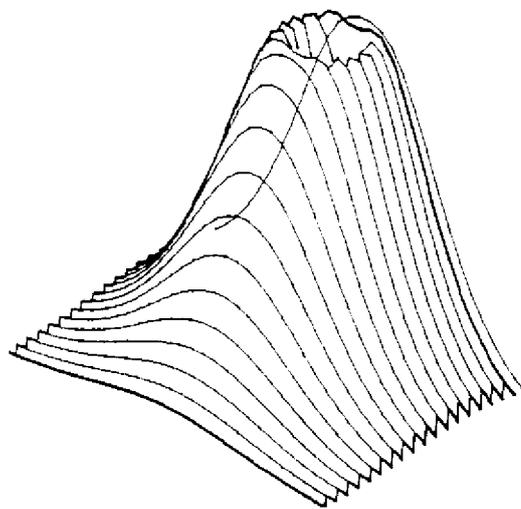


Figura A.3.2 - Critério Utilizado para Decidir sobre a Visibilidade das Curvas a serem Traçadas.

*Cidade Universitária - "ARMANDO DESALLES OLIVEIRA"
Travessa R n° 400 • Caixa Postal 11049 • Pinheiros
Telefone (PABX) 211-6011 - End. Telegrafia o IPENUCLEAR
Telex (11) 83S92 - IPEN - BR
SÃO PAULO -Brasil*