

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**ESTUDO E APLICAÇÃO DOS CÓDIGOS NUCLEARES ANISN E DOT-II EM
PROBLEMAS DE FÍSICA DE REATORES**

ARTUR FLÁVIO DIAS

Disertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para obtenção do grau de "Mestre - Área de reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador: Dr. Yuji Ishiguro

São Paulo
1980

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

**SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

**ESTUDO E APLICAÇÃO DOS CÓDIGOS NUCLEARES ANISN E DOT-II
EM PROBLEMAS DE FÍSICA DE REATORES**

Artur Flávio Dias

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para obtenção do grau de "Mestre - Área de Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear"

Orientador: Dr. Yuji Ishiguro



SÃO PAULO

1980

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

A MUIS PAIS e
A MARLENE

Desejo aqui expressar minha gratidão a todas as pessoas que direta e indiretamente contribuíram para a execução deste trabalho. Em particular quero agradecer ao Prof. Dr. Yuji Ishiguro pela orientação deste trabalho, aos colegas do Centro de Engenharia Nuclear pelo apoio prestado; à bibliotecária Noriko Hata, à colega Marlene pelo trabalho de datilografia, ao pessoal do Centro de Processamento de Dados pelo auxílio no trabalho computacional, particularmente Edna M. Lourenção e Una. Elenice.

ESTUDO E APLICAÇÃO DOS CÓDIGOS NUCLEARES
ANISN E DOT-II EM PROBLEMAS DE FÍSICA DE REATORES

RESUMO

Para solucionar problemas de transporte de neutrons e/ou raios gama independentes do tempo em reatores nucleares, dois códigos de computador, disponíveis no IPEN, foram estudados e aplicados. O código ANISN resolve a equação de transporte de Boltzmann unidimensional para neutrons ou raios gama nas geometrias plana, esférica e cilíndrica. O código DOT-II resolve a mesma equação no espaço bidimensional nas geometrias plana, cilíndrica e circular. Ambos incluem uma técnica para tratamento de espalhamento anisotrópico geral, critérios de convergência ponto a ponto e equações de diferença que removem efetivamente as oscilações das distribuições dos fluxos, algumas vezes encontradas nas soluções das ordenadas discretas. As técnicas numéricas e teorias básicas usadas nos códigos são estudadas e resumidas. Problemas padrões são resolvidos e as soluções, comparadas com as publicadas, mostram que os códigos podem ser usados com confiança em análises de problemas de reatores nucleares.

STUDY AND APPLICATION OF ANISN AND DOT-II NUCLEAR
CODES IN REACTOR PHYSICS PROBLEMS

ABSTRACT

To solve time-independent neutrons and/or gamma rays transport problems in nuclear reactors, two codes available at IPEN were studied and applied to solve benchmark problems. The ANISN code solves the one-dimensional Boltzmann transport equation for neutrons, or gamma rays, in plane, spherical, or cylindrical geometries. The DOT-II code solves the same equation in two-dimensional space for plane, cylindrical and circular geometries. General anisotropic scattering are allowed in both codes. Moreover, pointwise convergence criteria, and alternate step function difference equations are also used in order to remove the oscillating flux distributions, sometimes found in discrete ordinates solutions. Basic theories and numerical techniques used in these codes are studied and summarized. Benchmark problems have been solved using these codes. Comparisons of the results show that both codes can be used with confidence in the analysis of nuclear problems.

ÍNDICE

	<u>página</u>
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Relevância	4
1.2 Objetivos do Trabalho	5
2. CLASSIFICAÇÃO DOS CÓDIGOS	5
2.1 Códigos de Geração de Seções de Choque em Multi- grupos	5
2.2 Códigos de Projetos Estáticos	7
2.3 Códigos de Problemas Dependentes do Tempo	8
2.4 Problemas Computacionais Padrões	9
2.4.1 Definição de um Problema Computacional Pa- drão	9
3. APLICAÇÕES PRÁTICAS DOS CÓDIGOS	11
3.1 Cálculos Estáticos	12
3.2 Cálculos de Repleção do Núcleo	14
3.3 Cálculos Cinéticos	17
3.4 Cálculos do Ciclo de Combustível	19
3.5 Cálculos de Blindagem	23
4. O CÓDIGO ANISN	28
4.1 Teoria	30
4.1.1 Sistema de Coordenadas	30
4.2 Médias da função Distribuição	34

	<u>página</u>	
4.3	Equação de Transporte em Ordenadas Discretas	35
4.4	Definição do Termo de Fonte	41
4.5	Coefficientes de Quadratura Angular	42
4.6	Solução da Equação de Transporte "Adjoint"	43
5.	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM ORDENADAS DISCRETAS	44
5.1	Solução da Diferença de "Diamond"	45
5.2	Correções de Fluxos Negativos	47
5.3	Iteração e Testes de Convergência	49
5.3.1	Iteração Interna	49
5.3.2	Condições de Contorno	51
5.3.3	Iteração Externa	53
5.3.4	Pesquisas de Autovalores Implícitos	56
5.4	Problema Padrão Resolvido pelo ANISN	57
5.4.1	Situação Fonte Padrão, IO.1.....	57
5.4.2	O Problema Padrão, IO.1-A1	58
5.4.3	Solução do Problema Padrão	62
6.	O CÓDIGO OCT	69
6.1	Descrição dos Conjuntos de Dados de Quadratura ...	70
6.1.1	Conjuntos de Quadratura Simétricos	70
6.1.2	Conjuntos de Quadratura Assimétricos	74
6.2	Exigências de Espaçamento das Malhas	76
6.3	Convergência	78
6.3.1	Iteração Interna	79
6.3.2	Iteração Externa	82
6.4	Cálculos de Autovalor	84
6.5	Cálculos de Fontes Fixas	85
6.6	Cálculos de Pesquisa	86

	<u>página</u>
6.7 Condições de Contorno	87
6.8 Problemas Padrões Resolvidos pelo DDT-II	90
6.8.1 Situação Fonte Padrão, ID.5	90
6.8.2 O Problema Padrão, ID.5-A1	92
6.8.3 Solução do Problema Padrão, 5.A1-7	94
6.8.4 Situação Fonte Padrão ID.13	97
6.8.5 O Problema Padrão, ID.13-A1	99
6.8.6 Solução do Problema Padrão	101
7. CONCLUSÃO; DISCUSSÃO E SUGESTÕES	108
APÊNDICE I	110
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	114

FIGURAS

	<u>página</u>
1. Diagrama de Fluxo Informativo para Cálculos Estáticos (para estimar a reatividade do núcleo e distribuição de potência)	13
2. Diagrama de Fluxo Informativo para Cálculos de Depleção do núcleo	16
3. Diagrama de Fluxo Informativo para Cálculos Cinéticos (para estimar potência do núcleo versus tempo).....	19
4. Diagrama de Fluxo Informativo para Cálculos do Ciclo de Combustível (para estimar a composição do núcleo a custo de potência para um dado esquema de administração de combustível)	20
5. Diagrama de Fluxo para Análise de Radiação Preliminar ou Paramétrica	26
6. Diagrama de Fluxo para Análise de Radiação Detalhada.	27
7. Sistema de Coordenadas Geométricos e Angulares	31
8. Descrição da Célula de Malhas r-z	71
9. Direções Discretas do DOT-II para Geometrias r-z e x-z	72
10. Direções Discretas do DOT-II para Geometria r- θ	75
11. Geometrias x-z, r-z e r- θ	89
12. Diagrama do "Bundle" do BWR	90
13. Configuração do "Bundle" e Especificação dos Materiais	100

1. INTRODUÇÃO

O projeto de um reator nuclear é uma tarefa muito grande e envolve a coordenação e o conhecimento de várias teorias. O projeto deve ser efetuado dentro de numerosas restrições impostas na operação do reator. A análise nuclear e o projeto do núcleo do reator é altamente dependente de outras áreas, incluindo projeto térmico-hidráulico, análise estrutural, rendimento econômico e assim por diante. Os critérios para a realização de um projeto são muito variados, englobando considerações de desempenho, confiabilidade, economia e segurança. Estes critérios são frequentemente contraditórios por natureza e, conseqüentemente, requerem otimização.

O projeto nuclear completo de uma dada configuração do núcleo é efetuado muitas vezes, inicialmente para avaliar os parâmetros de projeto, identificar restrições e, daí, refinar o projeto, enquanto se interage com outras facetas do projeto e, finalmente, estabelecer um projeto de referência que proporcione uma base de cálculo contra o qual os cálculos de otimização possam ser comparados. Usualmente estes estudos preliminares se baseiam numa forte experiência anterior. Tais estudos são usados para identificar a faixa sobre a qual os parâmetros do sistema podem ser variados enquanto ainda se conformam com as restrições impostas no desempenho do núcleo.

O cálculo da distribuição de potência no núcleo dependerá sensivelmente dos parâmetros, tais como enriquecimento do núcleo, razão moderador-combustível, geometria do núcleo, localização e tipos de controle de reatividade e projeto do elemento combustível. A densidade da potência também dependerá do espaço e do tempo por causa da produção de isótopos e queima do combustível durante a vida do núcleo. Deve-se encontrar os parâmetros de maior importância para o projetista térmico, que são as razões das densidades de potência de picos para a média ("canais quentes" ou fatores de "picos de potência") os quais, juntamente com o perfil de potência axial do núcleo, permitem determinar se as limitações térmicas no desempenho do núcleo serão excedidos por um dado projeto. E, também, verificar se existe uma forte realimentação proveniente da análise térmica do núcleo, visto que a temperatura do núcleo afetará fortemente a densidade do refrigerante e absorção de ressonância, as quais afetam a

reatividade. Deve-se também determinar o carregamento de combustível que garantirá a criticalidade do reator nuclear durante o desejado tempo de vida do núcleo. Isto requer compensação da depleção do combustível bem como dos efeitos da reatividade devido à "realimentação" da temperatura e formação dos produtos de fissão.

Deve ser realizada uma análise para determinar a quantidade da reatividade negativa ou controle requerido para compensar o excesso de reatividade contido no carregamento inicial, bem como permitir a operação flexível e segura do reator. Deve-se alocar esta reatividade entre os vários diferentes mecanismos de controle, incluindo barras de controle móveis e venenos de neutrons solúveis no refrigerante. É importante estudar a interação de tais elementos de controle com o comportamento nuclear do núcleo nas situações estáticas e dinâmicas. Tais cálculos são necessários para se efetuar o projeto detalhado dos elementos de controle individuais, assim como dos modelos das barras de controle e as sequências de retiradas e inserções durante a operação do reator. Deve-se estudar as mudanças de reatividade inerentes que ocorrem no núcleo com as mudanças de temperatura e potência, calculando os vários coeficientes de realimentação de reatividade que determinam o comportamento cinético do núcleo. De particular interesse são os coeficientes de reatividade que caracterizam as mudanças de temperatura, de densidade do refrigerante ou moderador, e o coeficiente de temperatura da reatividade para o combustível.

Durante a operação do reator a composição do combustível varia e medido que os isótopos físséis são consumidos e produtos da fissão produzidos com particular atenção à produção de isótopos físséis, dando origem às importantes quantidades, taxa de produção e taxa de conversão e suas variações com o tempo, com os cuidados necessários próprios do tipo de reator em questão (se rápido, térmico produtor ou conversor, etc.). O projetista nuclear deve monitorar estes processos durante a vida do núcleo, num esforço de verificar a composição do combustível e a reatividade em função da remoção de energia. Isto requer estudo de depleção e das cadeias de produção para os principais isótopos acoplados com as equações que determinam o fluxo de neutrons no núcleo. O cálculo da multiplicação no núcleo e a distribuição de potência deve ser feito várias vezes durante a vida da operação do núcleo, bem como das mudanças de composi-

ção. O estudo da interação da distribuição de potência no núcleo com a produção ou depleção dos nuclídeos dependente do tempo é conhecido como análise de depleção ou análise de queima. A análise de depleção está intimamente relacionada com o tópico de administração do combustível nuclear, no qual se tenta otimizar o carregamento de combustível, administração e recarregamento no sentido de se obter a geração da potência mais econômica, dentro das restrições de projeto impostas na operação do reator.

Um outro problema importante que requer estudos estatísticos e muitos cálculos é o da blindagem. No sentido de proporcionar proteção contra os neutrons e raios gama produzidos no reator, blindagem é colocada em volta do reator e de qualquer objeto exposto. O principal problema associado com blindagem é o de determinar a intensidade ou nível de neutrons e raios gama na faixa de energia relevante nos contornos externos do reator e encontrar quais materiais e quanto de material e qual configuração geométrica reduzirá a intensidade dos neutrons ou raios gama a um nível aceitável.

É notável que as responsabilidades de se projetar um reator nuclear são variadas e numerosas. Para determinar o conjunto de parâmetros do sistema que proporcione segurança, confiabilidade e operação econômica do reator, informações precisas e detalhadas são requeridas para o projeto real, e aplicações sofisticadas da teoria básica das reações nucleares em cadeia, na qual se fundamentam são necessárias. As principais ferramentas usadas consistem de vários modelos de comportamento do neutron no reator, os quais são executados por uma multiplicidade de programas de computador ou códigos que simulam este comportamento.

Os programas de computador ou códigos que representam as simulações matemáticas do núcleo do reator são geralmente muito complexos e são o produto do resultado de muitos anos de extensivo desenvolvimento e testes nos vários laboratórios nucleares existentes no mundo. Os códigos de projeto nuclear podem ser classificados em três grandes categorias: (1) códigos para desenvolver seções de choque dependentes da energia, para os subsequentes cálculos de autovalores em códigos que utilizam a teoria de multigrupo; (2) códigos de projetos estáticos para resolver uma grande classe de problemas que dependem da determinação da constante de multiplicação

e caracterização da distribuição do fluxo, e (3) códigos dependentes do tempo, que podem ser subdivididos em códigos de depleção, para os quais o período de tempo é longo e códigos cinéticos, para curtos períodos de tempo conforme requerido em análise de segurança.

Aqui estuda-se dois códigos estáticos, em disponibilidade no Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, os quais resolvem a equação em ordenadas discretas de teoria de transporte em multigrupos, o ANISN (General ANisotropic SN)¹ e o DOT II (Discrete Ordinates Transport)²⁹, que resolvem a equação de transporte em uma e duas dimensões, respectivamente. Estes códigos de teoria de transporte servem de base para muitos diferentes tipos de cálculos, tais como criticalidade, coeficiente de reatividade, dimensão crítica, atenuação do fluxo, "group collapsing" das seções de choque e remoção das seções de choque de espalhamento dos grupos de baixa para os de alta energia, preservando a taxa líquida de transferência entre os grupos (no caso do ANISN) e cálculos de blindagem. É mostrada a função de ambos os códigos no contexto geral da análise de sistemas nucleares e na área de engenharia nuclear que diz respeito a cálculos de blindagem. No intento de reavaliar e reaverificar a validade destes códigos, três problemas padrões foram resolvidos: um modelo do reator "Lady Godiva" pelo ANISN, um problema de fonte fixa num meio absorvedor e um problema de transporte de neutrons em um "bundle" de barras do BWR pelo DOT-II, todos em concordância com os resultados publicados.

1.1 Relevância

O desenvolvimento dos códigos tem se baseado nas teorias fundamentais e básicas e nos dados mais atualizados possíveis para estudar e compreender os problemas físicos reais de projetos nucleares. É também com o propósito de obter flexibilidade no desenvolvimento do código tornando-o aplicável a uma grande variedade de tipos de reatores. Os códigos, até então existentes, abrangem uma grande variedade de atividades avançadas de projetos e o desenvolvimento destes tem sido contínuo e melhorado em concordância com as exigências inovadoras da indústria nuclear paralelamente aos recentes avanços teóricos²⁶ e experimentais, bem como à versatilidade e

capacidade crescente dos grandes computadores digitais. Fatores que determinam o melhoramento dos códigos e constituem desafios aos projetistas de reatores são os seguintes: concorrência para a construção de projetos nucleares economicamente atrativos, confiabilidade no que diz respeito à segurança, problemas de projeto atribuídos aos novos tipos de montagens de reatores e combustíveis, disponibilidade limitada dos protótipos experimentais, maior proveito no uso dos dados nucleares mais completos, refinamento das aproximações teóricas e melhores computadores digitais.

1.2 Objetivos do Trabalho

- A. Estudo de códigos destinados à solução da equação de transporte de neutrons (estado estacionário).
- B. Estudo da teoria usada em cálculos de reatores.
- C. Uso dos códigos na solução de problemas padrões publicados pela Sociedade Nuclear Americana.
- D. Análise e comparação de códigos.

2. CLASSIFICAÇÃO DOS CÓDIGOS

A maioria dos códigos de projetos de reatores é baseada nas simplificações das equações gerais do transporte da partícula. Por exemplo, em códigos nos quais a dependência de energia é tratada em detalhes, a dependência espacial é usualmente ignorada ou aproximada. Em códigos nos quais é descrito o comportamento espacial completo do fluxo escalar, a aproximação em multigrupos é feita. E em alguns códigos cinéticos tanto a dependência espacial como a energética é ignorada. Partindo-se disso, os códigos podem ser divididos em três grandes categorias de acordo com a variável de maior interesse, a saber: códigos de geração de seções de choque em multigrupos (energial), códigos de projetos estáticos (espacial) e códigos para problemas dependentes do tempo.

2.1 Códigos de Geração de Secções de Choque em Multigrupos

A faixa de energia dos neutrons, desde o evento de fissão até a eventual captura ou fuga nas energias térmicas, é grande. As próprias secções de choque dependem sensivelmente da energia, e é evidente que se deve proceder cuidadosamente na geração das constantes de poucos grupos para uso nas equações de transporte ou de difusão em multigrupos. Variações na composição do material e efeitos da temperatura nos sistemas práticos também causam variações de ponto a ponto. Além disso, desde que a distribuição de energia não é determinada até que as equações sejam resolvidas, alguns valores devem ser inicializados para o cálculo das constantes e então iteradas à medida em que a distribuição de energia é determinada. Desde que a energia do neutron é a variável de interesse aos níveis de outras características do núcleo do reator, códigos especiais são designados especificamente para a geração de constantes. Estas constantes, que devem ser desenvolvidas de uma forma adequada para cálculos de projeto, originam-se com medidas experimentais e dados derivados.

A dependência espacial do fluxo de neutrons é considerada desprezível. Na prática, um reator é usualmente dividido num certo número de regiões de composição química uniforme, para proposição de cálculos e, dentro de cada região, as secções de choque de grupo são tomadas independentes da posição.

Para se determinar as constantes, usualmente, procede-se em dois passos. Primeiramente a faixa de energia de interesse é dividida em uma estrutura de multigrupos muito fina e os dados das secções de choque, supridos por um código de biblioteca, são simplesmente ponderados sobre estes grupos (por exemplo, na faixa de moderação pode-se usar um espectro $1/E$). Aproximações apropriadas para as integrais de ressonância de interesse são também incluídas neste conjunto de "constantes de grupos finos". Estas constantes servem, então, como dados das secções de choque microscópicas usadas nos códigos de espectro rápido e térmico, que efetuam um cálculo aproximado da dependência de energia do neutron para a montagem nuclear de interesse, e então pondaram ou reduzem as constantes de grupos finos em constantes para poucos grupos sobre os espectros aproximados. Deve ser notado que, enquanto as constantes de grupos

finos são usualmente avaliados sem referência a um sistema específico sob consideração, os códigos de geração de espectro geram constantes para poucos grupos para o sistema específico de interesse.

2.2 Códigos de Projetos Estáticos

O segundo grupo de códigos é aquele que usa secções de choque de grupo como entrada, para resolver problemas de projetos estáticos. Estes códigos são usados para obter as mais detalhadas e precisas respostas para os problemas físicos de projeto de reatores. Os códigos de teoria de transporte e difusão são usados para obter a constante de multiplicação ou autovalor do sistema, o fluxo de neutrons em cada grupo de energia e ponto do espaço e direção (nos casos dos códigos de transporte).

Problemas de projetos para os quais os códigos de teoria de transporte podem ser usados incluem a determinação dos fatores de desvantagem do fluxo ou condição de contorno, corrente de neutrons em um vazio, efetividade dos projetos de blindagem, valor das barras de controle e outros problemas envolvendo espalhamento anisotrópico ou forte absorção de neutrons. Os códigos de teoria de difusão são usados para problemas onde a aproximação de difusão é válida. Isto engloba uma larga classe de problemas para reatores, incluindo a determinação da distribuição do fluxo em todo o sistema, os efeitos da disposição do combustível, análise de teoria da perturbação, predições da reatividade, etc.

Um código de coeficiente de temperatura unidimensional é também classificado no grupo de códigos estáticos. Este código é baseado na teoria de difusão e é usado para obter coeficientes de temperatura para entradas nos códigos de problemas cinéticos dependentes do tempo. Um outro código estático que usa o método de Monte Carlo, completamente diferente dos outros métodos de determinação da distribuição do neutron, é o código de Monte Carlo. Este simplesmente segue a história do neutron, desde seu nascimento até a absorção final ou fuga, usando métodos estatísticos para selecionar os eventos que podem acontecer ao neutron na montagem. Pelo acompanhamento de muitas destas histórias, uma descrição precisa da

distribuição do neutron no estado estacionário pode ser gerada. Apesar desta método requerer muito tempo de computador, é requerido para resolução de problemas com geometrias complexas ou problemas para os quais uma solução mais analítica esteja em falta. Os códigos de Monte Carlo são usados, por exemplo, para resolver problemas de fluxo e gerar probabilidades de escape às colisões em geometrias difíceis.

2.3 Códigos de Problemas Dependentes do Tempo

São aqueles que consideram o tempo como a variável de maior importância e são menos detalhados na descrição física. Entretanto, representam os métodos disponíveis para estudar a economia do ciclo de combustível e prever o comportamento do transiente do sistema.

Os códigos de depleção no modelo pontual (zero-dimensional) e no modelo unidimensional acompanham as variações dos inventários do combustível, materiais férteis, venenos queimáveis e dos produtos de fissão em toda a vida de operação de um reator. Muitos ciclos de combustíveis envolvidos tem sido analisados usando os códigos de depleção. Devido ao número de variáveis envolvidas, tais como densidade de potência, taxa de recarga, exigências de excesso de reatividade e variação dos padrões de recarga, ainda que o problema de depleção seja o mais simples, pode requerer soluções em vários pontos no tempo e posição. Um aspecto importante do problema de depleção do combustível é o de encontrar um arranjo de combustível e material fértil que mantenha um perfil estável da densidade de potência especificada, durante o tempo necessário.

Outro tipo de problema intimamente relacionado ao problema de depleção é o da análise econômica do ciclo de combustível. O valor do material físsil, custos de fabricação, custos de reprocessamento, os custos de financiamento, e vários métodos de estimativas são alguns dos fatores que são considerados pelos códigos econômicos.

Um outro conjunto de códigos que consideram o tempo como variável, são aqueles que resolvem as equações cinéticas. A es

cala de tempo envolvida é, logicamente, muito diferente da dos códigos de depleção sendo medida de milissegundos para minutos e horas. Análises da resposta do transiente do reator sob todos os tipos de condições normais e acidentes postulados são de maior importância para todo reator.

2.4 Problemas Computacionais Padrões

Desde o começo de sua implantação, em meados de 1967, o Comitê de Problemas Computacionais Padrões da Divisão de Matemática e Computação da Sociedade Nuclear Americana (CBPC) empenhou-se no desenvolvimento de problemas computacionais padrões¹⁵, que seriam de valor para a indústria nuclear.

O objetivo principal do CBPC é proporcionar soluções precisas aos problemas computacionais matematicamente bem definidos relacionados à indústria nuclear. As soluções podem ser analíticas, ou muito precisamente aproximadas, e a expectativa é de que estes problemas e soluções provem:

- a. ser úteis no desenvolvimento e avaliação das técnicas de soluções numéricas;
- b. auxiliar na avaliação e verificação dos códigos de computador;
- c. facilitar na comparação dos computadores específicos e códigos específicos de computador.

Problemas e soluções que são aceitos pelo CBPC como padrões são publicados no "Benchmark Problem Committee, Argonne Code Center Benchmark Book, ANL-7416" e seus suplementos 1 e 2^{3,4}. Antes que o problema seja aceito como padrão, o CBPC requer que pelo menos duas soluções obtidas independentemente (isto é, diferentes pessoas usando códigos diferentes) estejam em boa concordância.

2.4.1 Definição de um Problema Computacional Padrão

Um problema computacional padrão é um problema matematicamente bem definido, para o qual as soluções analíticas ou precisamente aproximadas são conhecidas. A exigência de que

o problema seja matematicamente bem definido tem como função principal eliminar as discrepâncias entre as soluções que são devidas às diferentes formulações matemáticas do "mesmo" problema. Por exemplo, as equações em multigrupos escritas na formulação matricial podem ter uma matriz completa dos coeficientes de difusão ou a mais convencional matriz diagonal dos coeficientes de difusão. Estas duas formulações podem resultar em duas soluções muito diferentes, o que é indesejável para um padrão. Definindo dois problemas padrões, um para cada tipo de formulação, eliminaria tais discrepâncias.

Para acentuar a clareza e usabilidade de um problema padrão, um problema computacional padrão é usualmente dividido em três partes distintas: situação de fonte padrão, definição do problema padrão e solução do problema padrão.

A situação de fonte padrão é uma descrição da situação física da qual os problemas padrões são derivados. Detalhes do sistema, tais como dimensões, materiais, temperaturas, etc., são dados na situação de fonte. Situações de fonte também servem para interrelacionar problemas padrões, proporcionando, deste modo, alguma continuidade entre problemas.

Na segunda parte, a definição do problema padrão, o modelo matemático do problema a ser resolvido é dado incluindo as equações a serem resolvidas, os coeficientes da equação, a geometria, as condições iniciais e/ou condições de contorno, se aplicáveis. Até este ponto existe considerável flexibilidade no desenvolvimento de um padrão computacional, visto que o resultado final é um problema que é matematicamente bem definido. Por exemplo, um problema da teoria de difusão estática bidimensional de dois grupos de energia com condições de contorno externo de fluxo zero, constituiria uma definição de problema padrão e, a mesma descrição do problema, mas com condições de contorno externas de corrente de retorno zero, constituiria uma segunda definição de problema padrão.

Finalmente, a terceira parte é a solução do problema padrão. A solução, se de natureza numérica, deve também incluir resultados que mostrem como a precisão depende do nível de

discretização (isto é, k_{ef} versus o número de pontos espacial da malha), o computador usado, a quantidade do núcleo e o tempo da unidade central de processamento requerido, etc..

3. APLICAÇÕES PRÁTICAS DOS CÓDIGOS

O projeto de um reator nuclear é dependente de muitos fatores interrelacionados³⁴, e não é praticável apresentar todos os problemas e suas relações neste documento. Deve ser notado também que não é possível separar os problemas um do outro e resolvê-los independentemente. Por esta razão um projeto nuclear completo de um dado núcleo é executado várias vezes. O primeiro trabalho no desenvolvimento do projeto é dirigido no sentido de identificar e resolver os sérios problemas do projeto e estabelecer as restrições. Então sucessivas análises mais refinadas são feitas. Realimentação do fluxo de fluido, transferência de calor e o trabalho de projeto da instalação devem ser levados em consideração durante cada iteração e os fatores de custos devem ser avaliados a cada passo. É muito útil no decorrer do trabalho estabelecer projetos de "referência", que proporcionam uma base de cálculo e coerência no empenho do trabalho. À medida em que o projeto se aproxima de um balanço ótimo dos vários fatores que devem ser considerados, novos códigos mais sofisticados devem ser usados. Consequentemente, projeto nuclear ainda requer um alto grau de conhecimento e julgamento no sentido de compreender os problemas interrelacionados e usar os códigos e técnicas de cálculo correta e eficientemente.

Como um exemplo da maneira através da qual um conjunto de códigos pode ser usado para se chegar ao projeto de um reator, uma breve descrição dos métodos usados é dada a seguir, tomando por base o reator de alta temperatura dos E.U.A., o reator HTGR de Peach Bottom.

3.1 Cálculos Estáticos

A maior parte dos cálculos em projetos nucleares consiste simplesmente em cálculos estáticos com a proposição de determinar a importância das barras de controle, posições críticas das barras, carregamento de combustíveis, reatividade de excesso, fatores de "picos de fluxo", distribuições aproximadas de potência, coeficientes de temperatura, etc., Um diagrama esquemático dos programas de computador e fluxo de informações requeridos para efetuar os cálculos estáticos é mostrado na figura 1.

A análise começa com uma estimativa da composição do núcleo, a qual pode ser obtida previamente de cálculos estáticos ou de uma análise do ciclo de combustível. Com esta estimativa da composição do núcleo, o espectro dependente de energia pode ser calculado para ser usado na obtenção das seções de choque ponderadas dos grupos maiores. As seções de choque dos grupos maiores obtidas são frequentemente usadas diretamente num cálculo de teoria de difusão para determinar a reatividade e a distribuição de potência no núcleo ou numa parte do mesmo. Um modelo de cálculo r-z bidimensional do núcleo permitirá a execução de estimativas da posição crítica da barra, reatividade do núcleo e distribuições de potência axial aproximadas. Um modelo de cálculo r- θ , permitirá estudos de esquemas de "zoneamento" radial, distribuição de potência radial e importância das barras individuais. Cálculos unidimensionais, axial e radial, são frequentemente adequados para cálculos de avaliação, nos quais um certo número de variáveis importantes é estudado em separado para determinar o efeito das mesmas nas características do núcleo. Cálculos de células unitárias, uni e bidimensional, são efetivos no estudo de distribuições locais do fluxo. Não obstante, antes de se efetuar um cálculo de teoria de difusão, deve-se homogeneizar as heterogeneidades do núcleo.

Dependendo do grau de heterogeneidade, os cálculos de homogeneização (obtenção de fatores de homogeneização) podem requerer cálculos simples ou mesmo recorrer à utilização de apropriados códigos de transporte, como na homogeneização de barras de controle e venenos queimáveis acumulados (lumped burnable poison). Uma vez que os fatores de "autoblindagem" forem obtidos, um cálculo de teoria de difusão pode ser efetuado com confiança.

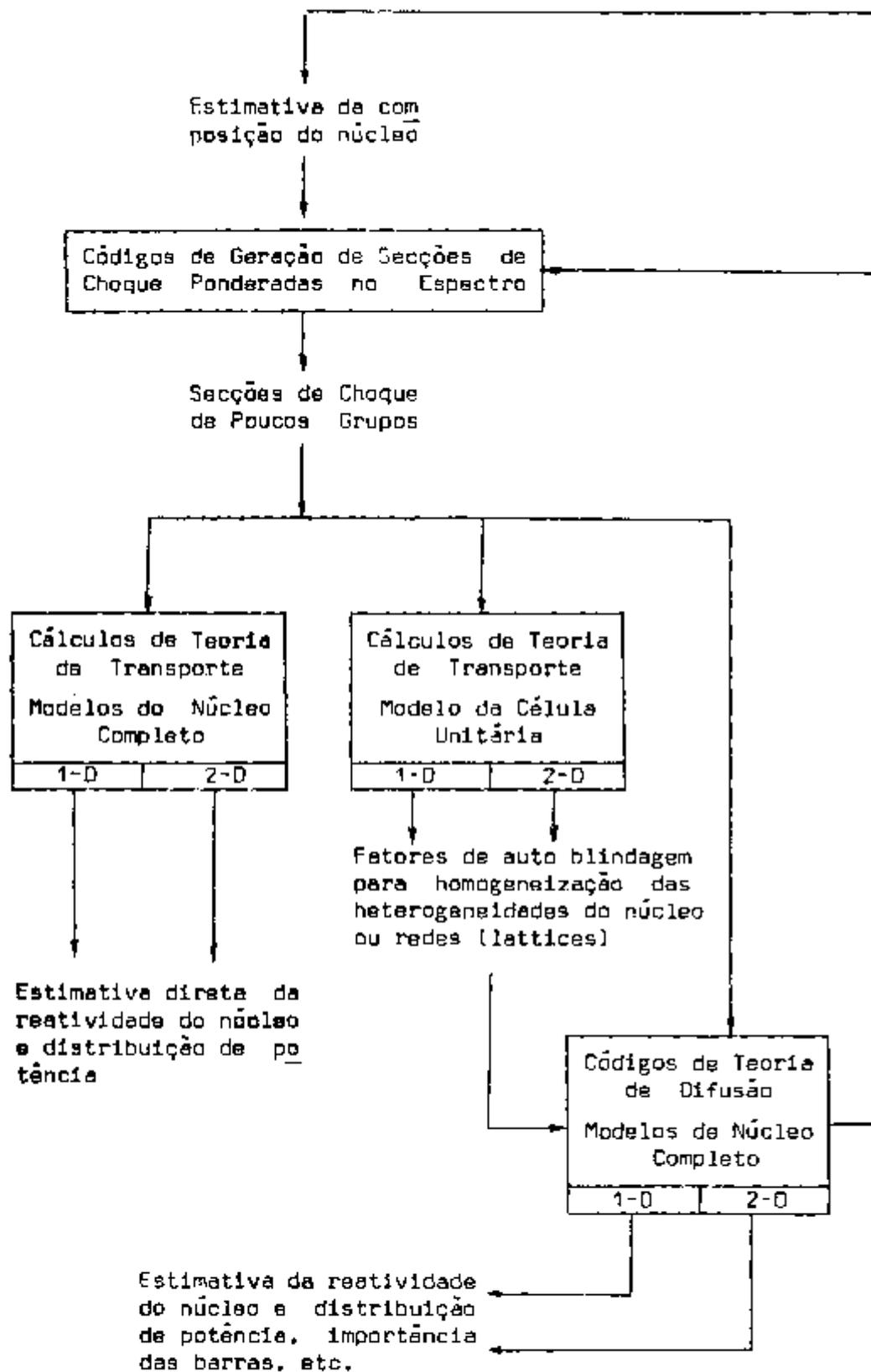


Figura 1 - Diagrama de Fluxo Informativo para cálculos estáticos (para estimar a reatividade do núcleo e distribuição de potência).

Os resultados dos cálculos de teoria de difusão e de teoria de transporte devem sempre ser examinados para verificar se uma análise consistente está sendo obtida. Por exemplo, se o espectro dependente da energia, computado no cálculo de teoria de difusão, for muito diferente daquele utilizado para obter as secções de choque médias de grupos maiores, então a composição do núcleo utilizado no cálculo final foi significativamente diferente da que foi utilizada no código de geração do espectro de ponderação. Neste caso, outra iteração das secções de choque de grupos maiores é necessária. O problema aludido acima pode ser minimizado com a utilização de maior número de grupos de energia. Assim a composição do núcleo pode ser variada consideravelmente da usada no cálculo do espectro sem introduzir muito erro. O próprio cálculo em multigrupos reestimarã o espectro do neutron e melhorará o processo de ponderação, como também permitirá se fazer uma boa estimativa da densidade de potência [local] nas interfaces das regiões.

3.2 Cálculos de Depleção do Núcleo

Cálculos de depleção são extremamente necessários nos projetos nucleares de todos os reatores de potência e de muitos reatores de ensaios. As condições restritivas de projeto, tanto do ponto de vista das temperaturas do núcleo, como das "reservas" de reatividade (reactivity shutdown margins), ocorrem com frequência durante a vida do reator (não necessariamente no núcleo inicial). Cálculos de depleção são necessários para avaliar as margens de segurança e demonstrar, apesar de todas as incertezas possíveis, que o núcleo sempre operará dentro dos limites de projeto.

No esforço de finalizar um projeto nuclear, a análise de depleção deve, usualmente, ser tão detalhada quanto possível, e deve se levar em consideração a dependência espacial e temporal do que se segue:

- a. formação (buildup) (a partir dos materiais férteis) e depleção de material fissil;
- b. depleção do material fértil;
- c. depleção do veneno queimável (veneno de controle);

- d. formação de produtos de fissão;
- e. formação e depleção dos nuclídeos de metais pesados, tais como U^{234} , U^{236} , plutônio, etc. e
- f. movimento das barras de controle para manter a criticidade.

Dois níveis de sofisticação podem usualmente ser identificados nestes cálculos. No primeiro nível, o cálculo é relacionado principalmente com uma grosseira distribuição de potência, consequentemente, o modelo de cálculo do núcleo pode ser razoavelmente grosseiro, adequado apenas para permitir uma representação ru de das barras, mas não detalhada o suficiente para mostrar os picos (spikes) de fluxo próximo das interfaces. Um cálculo de primeiro nível, além de proporcionar uma avaliação de autovalor e autovetor, pode também envolver cálculos de depleção unidimensional, tanto radial, como axial, através do qual um esquema de programação de barras ou zoneamento aproximado pode ser estudado. Tais cálculos u usualmente dão boas estimativas da reatividade do núcleo e são adequados para proporcionar uma visão geral.

Os cálculos de segundo nível envolvem o uso de modelos de cálculos muito detalhados para estudar os picos da potência e o efeito preciso das barras de controle, refletores, esquemas de recarregamento (refueling), temperatura, etc., na composição do núcleo no tempo e espaço. Um cálculo de segundo nível pode ser uma síntese de estudos unidimensionais ou um cálculo explícito bidimensional, no qual o núcleo é dividido em várias centenas de regiões de depleção. Estimativas de picos de fluxos locais, mais uma estimativa precisa da reatividade do núcleo, devem ser obtidas desta análise. Conforme o diagrama de fluxo informativo da figura 2, um cálculo de depleção começa com uma estimativa da composição do núcleo, a partir da qual as seções de choque microscópicas médias de grupo são determinadas.

Com as seções de choque microscópicas do núcleo e uma estimativa da composição do núcleo inicial, fatores de auto blindagem podem ser determinados, usando códigos de transporte (ANISN, por exemplo). Isto é particularmente importante em se tratando de veneno queimável (burnable poison), embora materiais combustíveis pos-

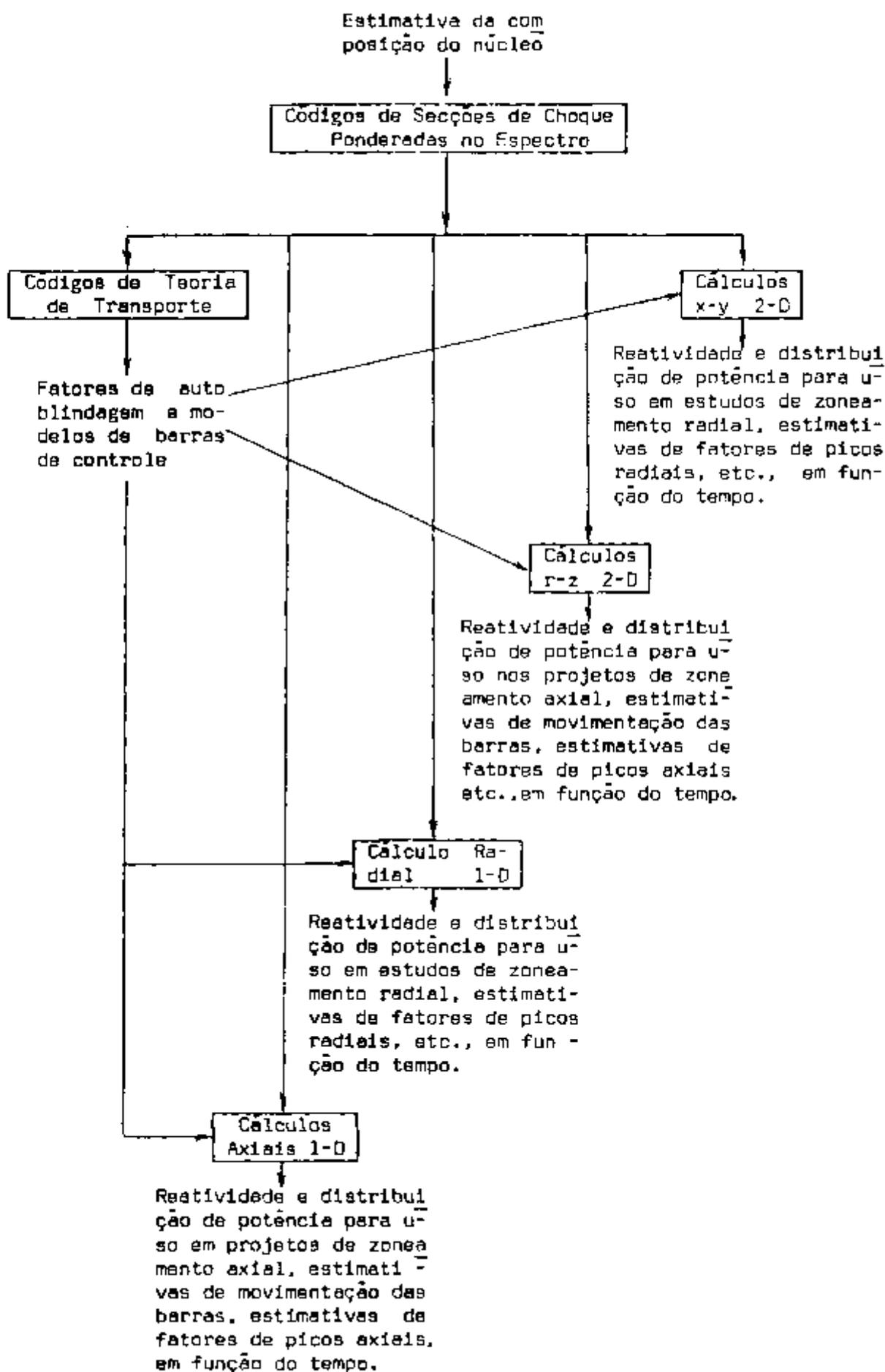


Figura 2 - Diagrama de Fluxo Informativo para cálculos de depleção do núcleo.

sam também ser auto blindados. Fatores de auto blindagem são entradas (input) para o cálculo de depleção; como a concentração de um material varia durante a queima, o fator de auto blindagem deve também ser variado pelo código.

O código de depleção tem dois segmentos principais: o segmento de teoria de difusão para cálculo do fluxo, e um segmento de depleção para calcular a queima (burnup) e a formação (buildup) de núclídeos. O segmento de depleção requer, tanto como entrada, ou como um "preassembled data package", constantes de decaimento dos núclídeos, fração (yields) dos produtos de fissão e equações que acoplam os núclídeos.

3.3 Cálculos Cinéticos

Os cálculos cinéticos são necessários para:

- a. projetar sistemas de proteção adequados;
- b. avaliar o desempenho da instalação durante as condições normais de transição e
- c. avaliar o desempenho da instalação e margens de segurança durante situações de acidentes postulados e durante operação anormal.

Uma vez mais, novamente, as seções de choque ponderadas obtidas da redução de grupos (group collapsing) devem ser determinadas. Se um cálculo de cinética pontual é para ser efetuado, estas seções de choque são então usadas em cálculos estáticos para determinar coeficientes de temperatura, reatividade inicial ou da perturbação que vai provocar o acidente, tempo de vida do neutrão e fração de neutrons atrasados. (vide figura 3).

Códigos de teoria de difusão uni e bidimensional são frequentemente utilizados para determinar os coeficientes de temperatura dependentes da temperatura. Um modelo de transferência de calor e dados termodinâmicos e nucleares apropriados devem ser fornecidos para os cálculos cinéticos pontuais. Para reatores do tipo HTGR, um elemento médio de combustível é modelado na geometria (r-z) para a maior parte dos cálculos de acidentes. Isto é feito com um còdi

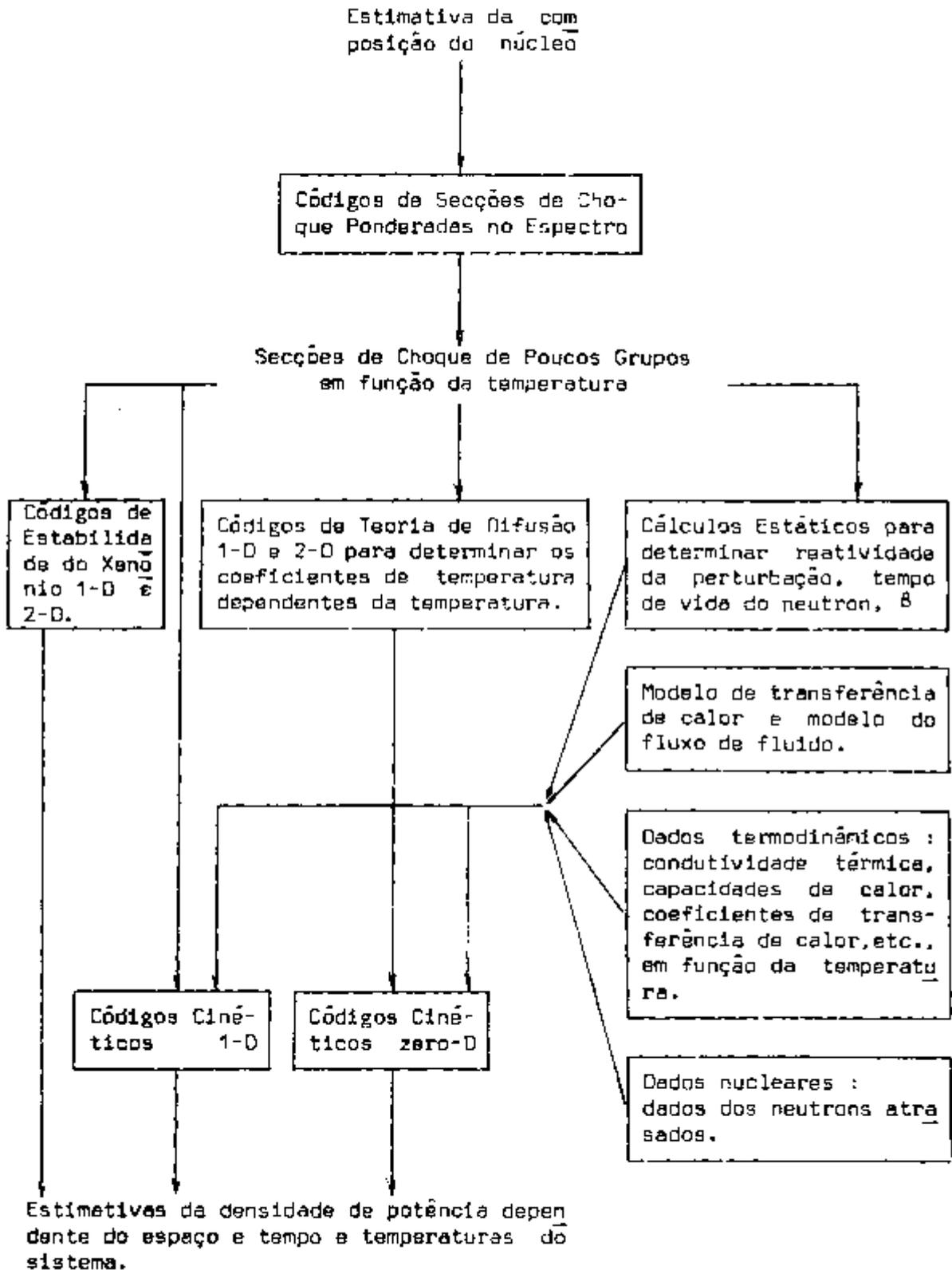


Figura 3 - Diagrama de Fluxo Informativo para cálculos cinéticos (para estimar potência do núcleo versus tempo).

go de transferência de calor e fluxo de fluido. Durante o transiente, a distribuição de temperatura em todo o elemento médio é computada em função do tempo, e as temperaturas do combustível ponderadas em todo o volume e do moderador são usadas para calcular a reatividade de realimentação. Uma vez que o elemento combustível médio é modelado, o transiente resultante é característica das propriedades médias do núcleo, um cálculo subsequente é efetuado para o elemento combustível mais quente usando o pulso de potência determinado previamente.

Durante um transiente, é claro que a temperatura de entrada e a taxa de fluxo do refrigerante deverão variar. Durante as variações no nível de potência, o sistema de proteção e controle reagirá para manter a temperatura e pressão do vapor dentro dos limites. O resultado será uma taxa de fluxo do refrigerante e temperatura de entrada que devem ser levados em consideração nas análises de cinética pontual.

3.4 Cálculos do Ciclo de Combustível

Estudos do ciclo de combustível são necessários para obter as primeiras estimativas da composição inicial do núcleo e da composição do combustível de recarga. Estas estimativas devem, é claro, levar em consideração a remoção de calor, potência de bombeamento do refrigerante, picos de temperatura do combustível, etc. e uma concordância entre a composição do núcleo do reator que dá o mais baixo custo do ciclo de combustível e a que resulta nas temperaturas mais aceitáveis para o sistema. O ciclo de combustível resultante, então, fornecerá a estimativa da composição para subsequentes cálculos estáticos, cinéticos e estudos de depleção.

Novamente, de acordo com a figura 4, a análise começa com uma estimativa da composição do núcleo. Seções de choque de grupos estendidos são preparados como antes, e então usados como entradas para um dos vários códigos do ciclo de combustível.

A primeira avaliação do ciclo de combustível pode ser obtida determinando as características do ciclo de equilíbrio num cálculo zero dimensional usando um código adequado. Se somente uma

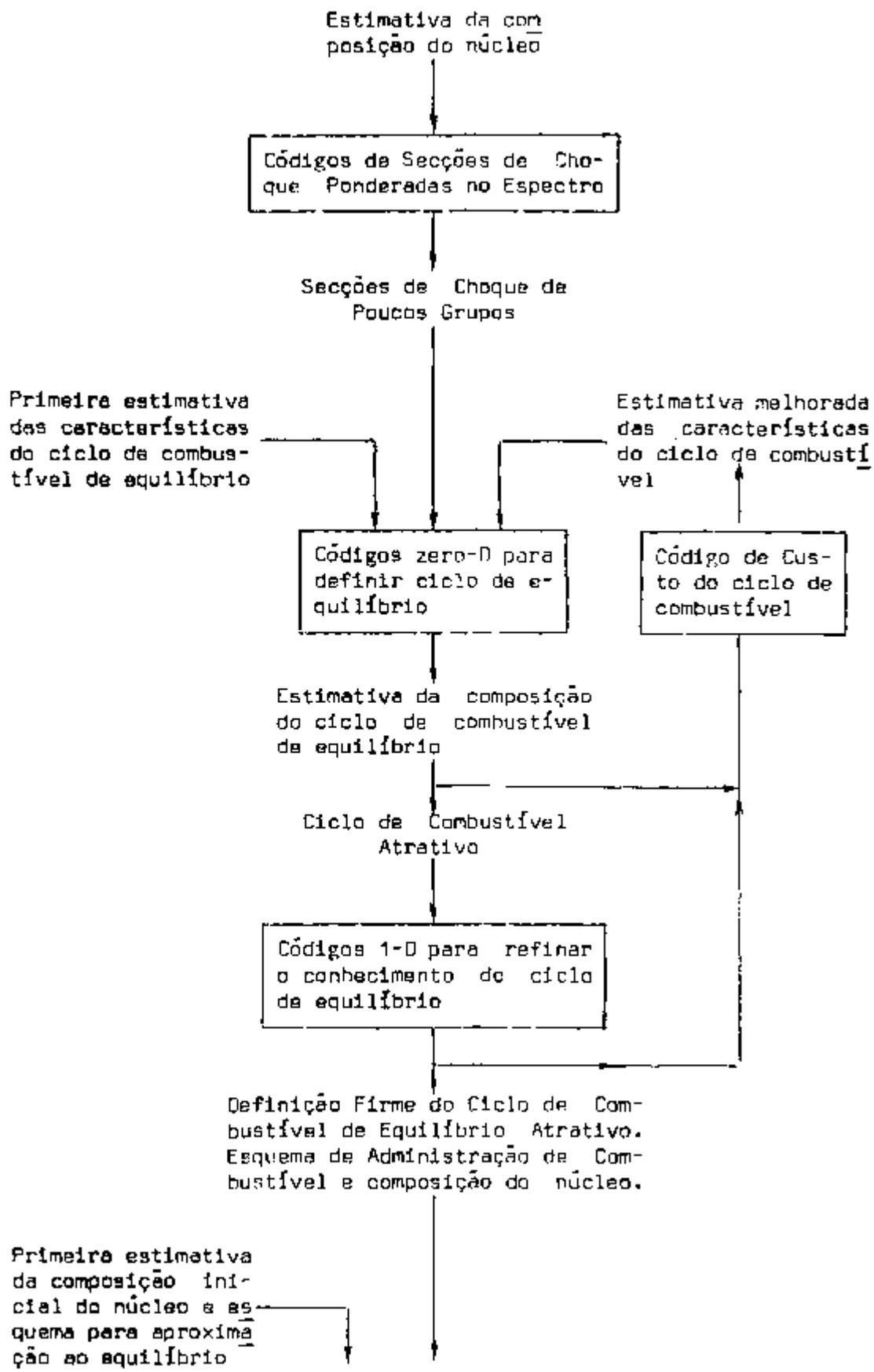


Figura 4 - Diagrama de Fluxo Informativo para Cálculos do Ciclo de Combustível (para estimar a composição do núcleo e custo de potência para um dado esquema de administração de combustível).

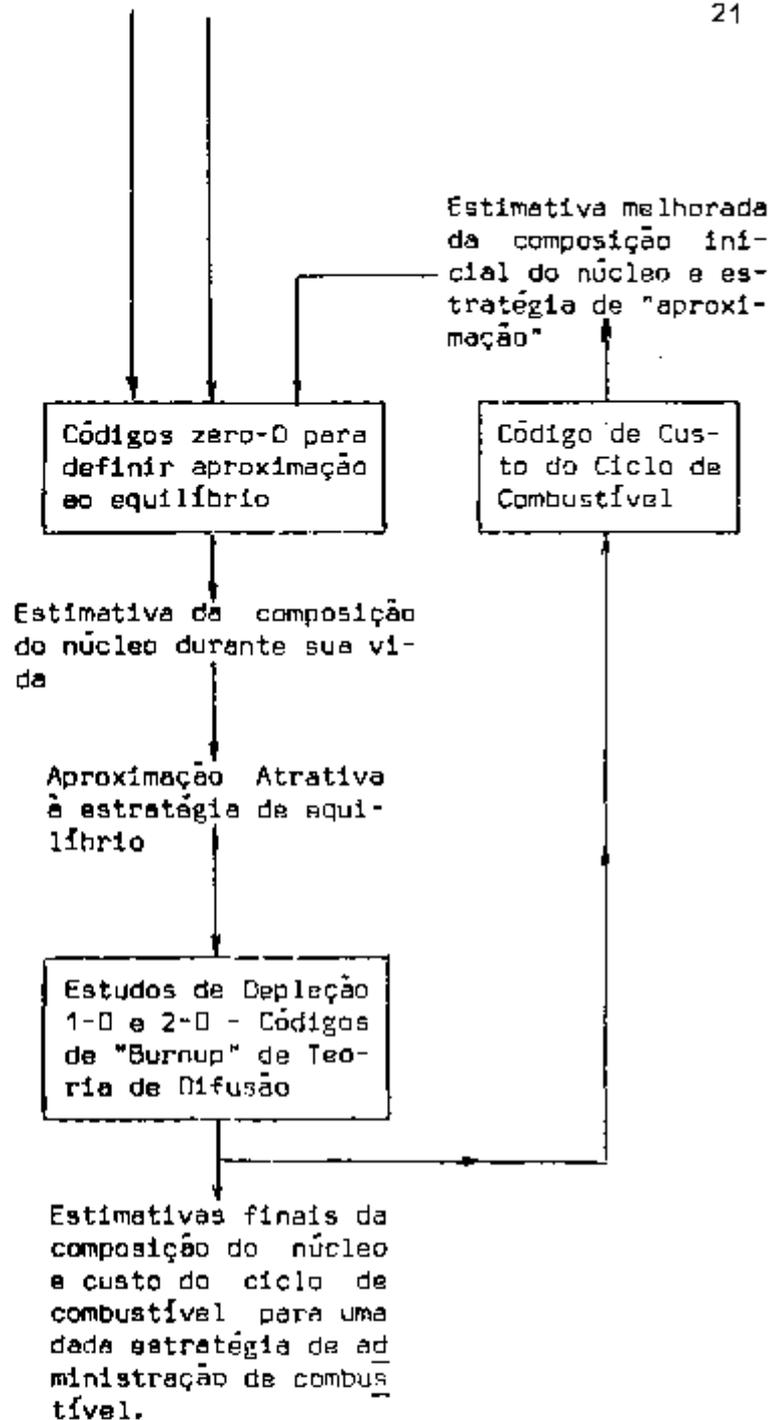


Figura 4 - (continuação)

fração do núcleo é recarregada por ano, o código específico determinará diretamente o carregamento por ano necessário para preencher as exigências de reatividade ρ , alternativamente, a reatividade de excesso dependente do tempo.

Estes dados de carregamento podem ser usados como entrada para um código de custo de combustível, bem como outras entradas requeridas, tais como custos de material de combustível, custos de fabricação, custos de capital, custos de transporte (shipping costs) e custos de reprocessamento (reprocessing charges).

Uma avaliação adequada do ciclo de combustível de equilíbrio pode ser obtida com códigos de depleção zero dimensionais e posteriores detalhes podem ser obtidos com códigos unidimensionais, particularmente se zoneamento é muito importante, visto que uma estimativa do ciclo de combustível de equilíbrio é usualmente um bom indicador dos méritos relativos de um particular esquema de administração de combustível. Para esquemas atrativos, o ciclo de combustível completo, do começo ao fim da vida da instalação, pode ser determinado com códigos zero dimensionais ou com unidimensionais. O cálculo de "approach-to-equilibrium" com certos tipos de códigos pode requerer uma estimativa do carregamento inicial, mais uma estimativa das exigências de alimentação (feed) anual. Vários segmentos do reator são considerados separadamente nestes códigos, e a saída destes é a composição do núcleo em qualquer tempo durante a vida. O uso adequado destes códigos levará à estratégia de "approach-to-equilibrium" ótimo.

Quando as especificações de carregamento e níveis de inventário são conhecidos para a aproximação do equilíbrio (approach-to-equilibrium), o custo do ciclo de combustível para este período da vida do núcleo pode ser calculado. Um código de custo do ciclo de combustível determinará o custo do ciclo de combustível correspondente ao valor presente.

Uma vez que o esquema completo de administração do combustível tenha sido especificado, estudos de depleção uni e bidimensional podem ser empreendidos para determinar a reatividade de excesso (excess reactivity) e "shutdown margin" em função do tempo, modelos de programação de barras, distribuições detalhadas de potência dependentes do tempo, coeficientes de temperatura, etc.,

Indubitavelmente, ajustamentos à estimativa inicial do ciclo de combustível serão necessários quando estudo detalhado do desempenho do núcleo do reator revelar áreas problemáticas.

Uma segunda ou terceira iteração no ciclo de combustível pode ser necessária se a estimativa original do ciclo levar a distribuições de potência ou "shutdown margins" inaceitáveis.

3.5 Cálculos de Blindagem

Nesta área da engenharia nuclear, as principais ferramentas do cálculo disponíveis para resolver os problemas de radiação são os métodos de "kernel", momentos, difusão, "removal diffusion", harmônicos esféricos, Monte Carlo e de ordenadas discretas.^{2.13}

O método de "kernel" não é rigoroso, apesar de poder ser utilizado em geometrias tridimensionais, os efeitos devidos às variações do ângulo de espalhamento são completamente ignorados. O método dos momentos pode tratar o transporte de radiação rigorosamente num meio homogêneo infinito. Tem sido largamente usado nos cálculos dos fatores de crescimento (buildup factors) do meio infinito para uso nos cálculos de "kernel" de raios gama e é utilizado também no estudo de sensibilidade da distribuição do fluxo num meio infinito às variações das seções de choque. Porém, a limitação geométrica evita seu uso para a maioria dos problemas práticos. O método da teoria de difusão não obtém sucesso quando aplicado aos problemas de penetração por causa das considerações impostas na ordem de espalhamento e imposição de fluxo aproximadamente isotrópico. O método de "removal-diffusion" emprega uma combinação do método de "kernel" usando seções de choque de "removal" e o método de difusão. Porém ainda não é uma técnica rigorosa e sofre os efeitos das várias considerações limitativas. O método de harmônicos esféricos é uma técnica rigorosa que tem sido usada com sucesso para problemas unidimensionais. Este método também está sujeito a várias dificuldades, incluindo o rápido aumento de esforço computacional à medida em que a dimensão do problema e a ordem de anisotropia são aumentadas como é frequentemente requerido em problemas de blindagem. O método de Monte Carlo tem demonstrado versatilidade no seu

uso em transporte de radiação. E isto é especialmente verdadeiro para geometrias complexas e transporte complicado de partículas múltiplas.

Infelizmente, o método da analogia de Monte Carlo também tem aplicação limitada aos problemas de penetração, porque o tempo computacional gasto em certos problemas não corresponde às expectativas econômicas e, além do mais, não oferece uma precisão tão acurada.

Neste ponto o método de ordenadas discretas tem demonstrado sua versatilidade na resolução de problemas difíceis de blindagem. A importante diferença entre a técnica de espalhamento anisotrópico usada neste método e as técnicas baseadas nos polinômios de Legendre, as quais são frequentemente usadas nos métodos de Monte Carlo, ou de momentos, é que os efeitos angulares e energéticos do espalhamento são tratados independentemente. Isto é dizer que a lei do espalhamento não está incluída no método de ordenadas discretas, mas está implicada nas matrizes das seções de choque. Como um resultado disto, as seções de choque de transferência de energia podem ser convenientemente baseadas numa informação muito mais precisa do que na informação angular. Por exemplo, os coeficientes de transferência de multigrupo podem ser derivados dos dados incluindo uma expansão P_{15} da seção de choque de espalhamento diferencial no sistema centro de massa, enquanto que os resultados finais serão usados para uma expansão P_3 no sistema laboratório. Então, um cálculo P_3 do ANISN pode ser superior a um cálculo de Monte Carlo, usando uma representação P_3 dos mesmos dados básicos. A evidência até o presente demonstra que uma boa descrição do efeito de transferência de energia requer uma maior ordem de aproximação do que é necessário para descrever adequadamente o efeito do ângulo.

Em suma, o método de ordenadas discretas parece ser muito atrativo para uso em problemas de blindagem³¹. O desenvolvimento de uma técnica para espalhamento anisotrópico, o uso da diferença de função do passo como uma alternativa para a diferença de "diamond" no evento de um fluxo negativo, novo critério de convergência tem, quando aplicado em códigos desenvolvidos para novos computadores maiores, dado boas soluções para problemas difíceis.

E trabalhos correntes na aceleração de convergência e outras técnicas, tais como fontes analíticas de primeiras colisões em geometrias bidimensionais tem apresentado expectativas de posterior aperfeiçoamento da técnica.

A título de ilustração da aplicação dos códigos ANISN e DOT II, um diagrama esquemático simplificado dos métodos preliminares e de um projeto detalhado³⁸, dos quais constituem parte integral, é apresentado nas figuras 5 e 6. Ambos os métodos são utilizados no Centro de Vôo Espacial de George C. Marshall.

Na figura 5 mostra-se o método de projeto preliminar ou paramétrico, no qual o código APPROPOS³⁸ (GAMBIT¹¹ ou GAMLEG-W³⁹) é usado para preparar as seções de choque do neutron, do foton e outros dados básicos para uso nos códigos de transporte ou de processamento. As seções de choque são as entradas (input) para o código ANISN³⁶. O código ANISN calcula os fluxos de neutrons e de ftons na geometria do reator. A partir destes fluxos fontes de energia e distribuições de neutrons e ftons ou taxas de geração de calor são obtidas usando o código de processamento de dados, NAGS³⁹. Estas fontes e distribuições são usadas como entradas (input) para o código de "kernel" pontual KAP-VI¹⁴. O código KAP-VI proporciona níveis de radiação de raios gama e de neutrons rápidos em localizações externas ao reator. Fontes de radiação, taxas de geração de calor, ambiente de radiação, interna e externamente ao reator, bem como a efetividade da blindagem podem ser calculadas usando o método de projeto preliminar ou paramétrico-

Para cálculos paramétricos ou preliminares, vários procedimentos alternativos de cálculos são possíveis. O primeiro procedimento envolve cálculos onde tanto uma solução de transporte de neutrons como de ftons é desejada. Este procedimento de cálculo começa com uma das "fitas" da "Master Library". O código SATURN³⁹, pode ser usado para preparar a "fita" de seção de choque para o ANISN. Cálculos paramétricos usando estes dados podem ser efetuados com o ANISN. O segundo procedimento envolve cálculos onde a definição proporcionada pelos dados da biblioteca de neutrons de grupos finos não é requerida, ou onde o tempo de computação não é importante. Com este procedimento, um cálculo simples de grupo fino, é efetuado com o código ANISN no modelo de geometria básica. A

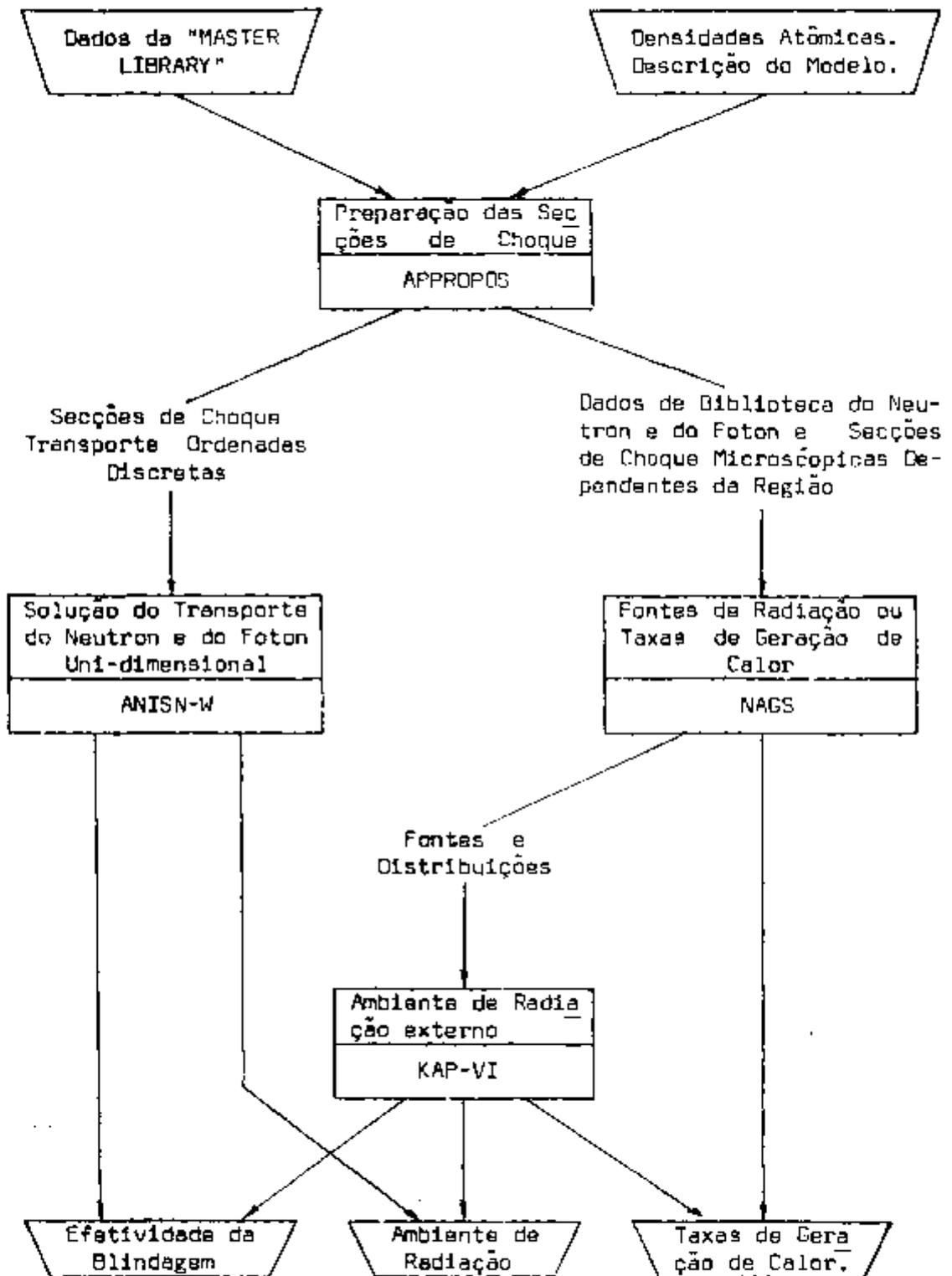


Figura 5 - Diagrama de Fluxo para Análise de Radiação Preliminar ou Paramétrica.

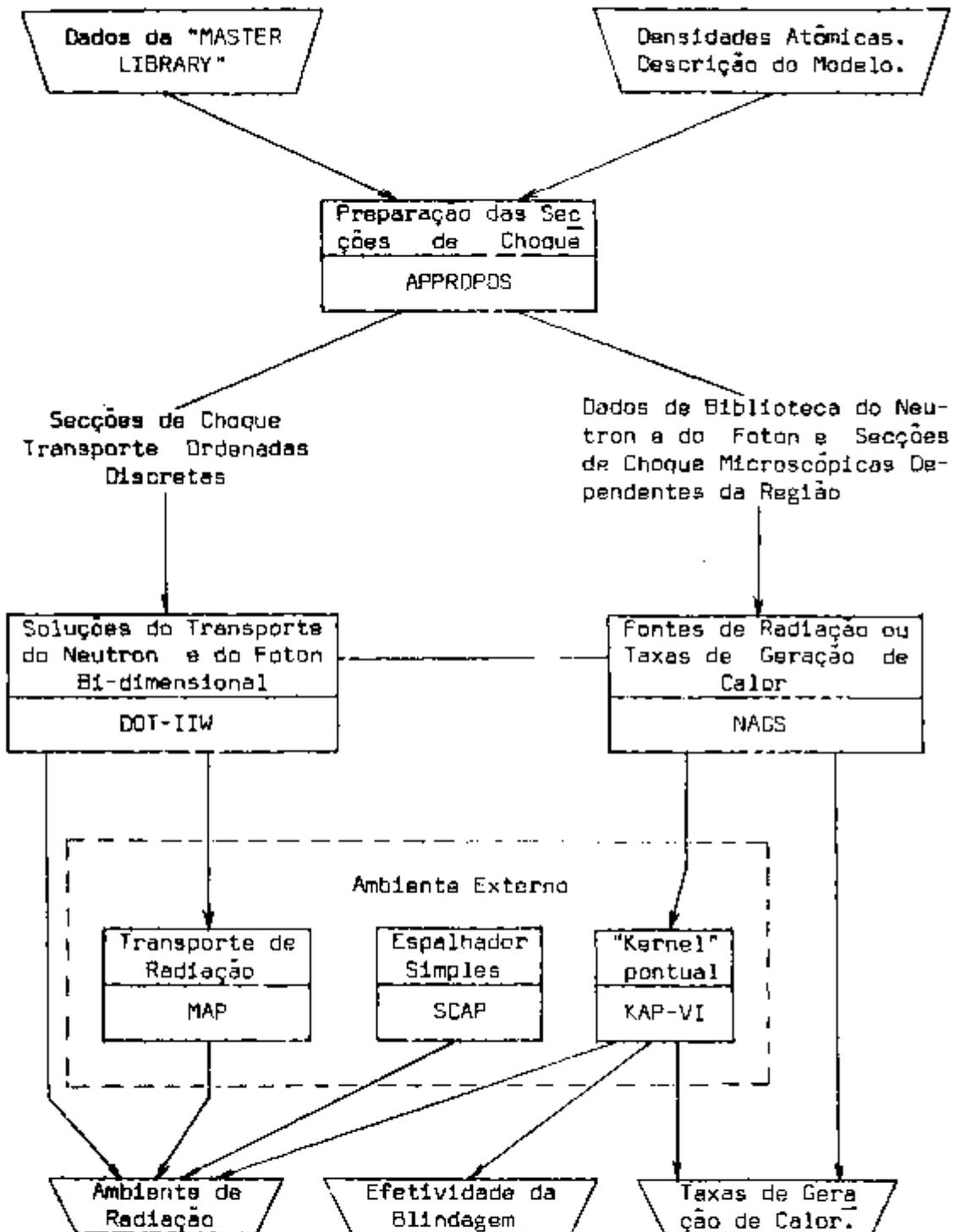


Figura 6 - Diagrama de Fluxo para Análise de Radiação Detalhada.

partir dos cálculos do ANISN, "fine-group weighting spectra" por região, são obtidos para uso no código APPROPDS. A seguir um simples cálculo do código APPROPDS é efetuado para gerar todas as composições paramétricas sob estudo. Finalmente, cálculos de foton-neutron simultâneos, de número de grupos reduzidos, são executados com o código ANISN sobre cada uma das configurações específicas. Os efeitos dos raios gama secundários por região e/ou por elementos na taxa total de dose de raios gama podem ser prontamente obtidos, por exemplo, pelos cálculos NAGS-ANISN alternadamente.

No método de projeto detalhado (fig. 6), as seções de choque do neutron e do foton preparadas pelo código APPROPDS são usadas como entrada para o código de transporte de ordenadas discretas, bidimensional, DOT-II. O código DOT-II computa os fluxos de neutrons e ftons bidimensionais em toda a geometria do reator. O código de processamento de dados NAGS processa estes fluxos e calcula a deposição de energia, fontes de energia e distribuições de neutrons e ftons dentro do sistema reator. Estas fontes e distribuições são usadas como entradas para o código de "kernel" pontual KAP-VI. O código KAP-VI proporciona níveis de radiação de raios gama e de neutrons rápidos em localizações externas ao reator. Adicionalmente, os fluxos de fuga superficial da geometria do problema do DOT-II são usados como entradas para o código de transporte de radiação, MAP. O código MAP³⁷ computa o ambiente de radiação em superfícies ou pontos selecionados externos à geometria do problema resolvido pelo DOT-II e inclui providências para o transporte da componente não espalhada usando técnicas opcionais de "kernel" pontual.

O código SCAP¹⁴ é usado para computar o ambiente de radiação externo usando, como fontes de entrada, a saída do código KAP-VI ou do código MAP. Fontes de radiação, taxas de geração de calor, ambiente de radiação interno e externo ao reator e efetividade da blindagem podem ser calculados usando o método de projeto detalhado. Os códigos SATURN, DOG³⁷, e ADOQ³⁷ são códigos adicionais para manuseio e preparação de dados.

Para análise de radiação de projeto detalhado, vários procedimentos alternativos de cálculo são possíveis. O primeiro procedimento de calcular o ambiente de radiação com o DOT-II usan-

do dados das secções de choque de transporte do neutron-foton acoplados podem ser "by passed" calculando o ambiente de radiação do foton e do neutron separadamente. O código APPROPPOS gera os dados das secções de choque e o código NAGS pode ser usado para gerar os dados da fonte de raios gama secundários. Conforme mostrado na figura 6, vários códigos são capazes de calcular o ambiente de radiação externo. Novamente caminhos alternados podem ser escolhidos para tomar vantagens da capacidade de uma técnica particular. Por exemplo, os resultados do "kernel" pontual podem ser obtidos eficientemente para a geração de taxas de isodose nos contornos externos a um sistema nuclear. Outra técnica útil é o acoplamento de dois cálculos sucessivos do DOT-II usando uma fonte de contorno fixa do primeiro cálculo do DOT-II. Os fluxos angulares de três intervalos de malhas axiais contíguos podem ser preservados do primeiro cálculo do DOT-II. Estes dados são escritos numa fita pelo DOT-II para entrada direta num segundo cálculo do DOT-II. A exigência principal no modelo geométrico do primeiro cálculo do DOT-II é que o fluxo líquido de partículas que atravessam o intervalo da malha deve ser conservado. Esta exigência é satisfeita sobrepondo parcialmente os modelos geométricos nos dois cálculos. Outras variações do procedimento de cálculo são possíveis e são dependentes principalmente dos parâmetros de saída dos cálculos desejados. Por causa da natureza modular destes códigos a compatibilidade de dados entre códigos permite-nos considerável flexibilidade em se proceder a análise para um problema particular sob estudo.

4. O CÓDIGO ANISN

O ANISN resolve a equação de transporte de Boltzmann linear, dependente da energia, unidimensional com espalhamento anisotrópico geral para as geometrias esférica, cilíndrica e retangular. Resolve problemas homogêneos e não homogêneos e "adjoint" ou regular (forward). Os problemas não homogêneos podem ter uma fonte volumé

trica fixa, ou uma "shell source" especificada dependente do ângulo em qualquer intervalo da malha; fissões podem ser incluídas para um sistema subcrítico. As condições de contorno vácuo, reflexão, "white" ou "albedo" podem ser especificadas. Cálculo de "time absorption", pesquisas de concentrações, pesquisas de raios externos, pesquisas de "bucklings" ou pesquisas de espessura de zonas são também resolvidos. As seções de choque, fontes fixas distribuídas, ou "shell sources" podem ser entradas através de "tapes" e/ou cartões.

4.1 Teoria

A equação geral de Boltzmann de transporte de neutrons é escrita em termos do fluxo de neutrons $\psi(r, v, \Omega)$ como:

$$\Omega \cdot \nabla \psi(r, v, \Omega) + \sigma \psi(r, v, \Omega) = S(r, v, \Omega) \quad (1)$$

onde $\psi(r, v, \Omega)/v$ tem dimensões de neutrons por unidade de volume por unidade de velocidade $v\Omega$.

A equação acima é uma declaração do fato de que numa situação independente do tempo, perdas devido a fuga e colisões são iguais aos ganhos das fontes S.

A taxa de perda devido às colisões é o produto da seção de choque macroscópica total, σ , e o fluxo. Em geral, S depende de ψ através das colisões de espalhamento e das taxas de reações. Depois de definirmos os sistemas de coordenadas e médias de ψ , a equação (1) vai ser derivada para uma célula finita num espaço de fase, e S especificada em detalhe.

4.1.1 Sistema de Coordenadas

Sistemas de coordenadas tridimensionais para geometrias retangular, cilíndrica e esférica são apresentadas na figura 7.

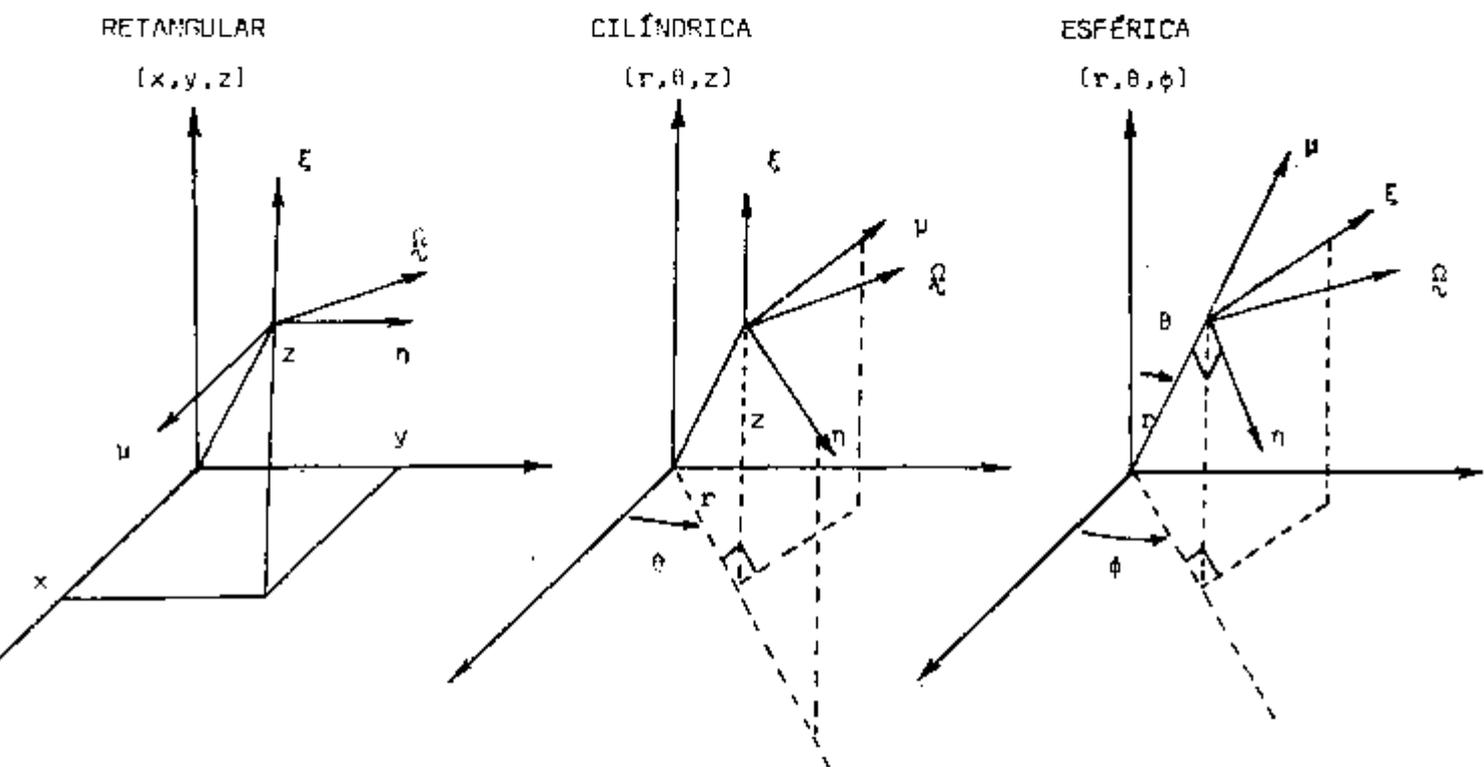


Figura.7 - Sistemas de coordenadas geométricas e angulares.

No código ANISN apenas problemas unidimensionais podem ser resolvidos, isto é, com uma apropriada seleção dos eixos de coordenadas, a geometria e composição do sistema sob consideração devem ser reduzíveis a uma das seguintes geometrias:

- retangular: na direção x , a composição do material pode variar e o sistema pode ser finito; no plano $y-z$, a composição deve ser uniforme e o sistema geométrico é infinito.
- esférica: as composições dos materiais podem variar em função do raio, mas devem ser uniformes em qualquer caixa esférica de um dado raio.
- cilíndrica: na direção do eixo do cilindro, o sistema deve ser finito; a composição do material pode variar com o raio, mas deve ser uniforme numa superfície anular de um dado raio.

Além do mais, condições de contorno e outras condições, tal como a distribuição de fontes independentes deve ser consistente com o modelo unidimensional.

Quando estes sistemas de coordenadas geométricos ortogonais são usados, as variáveis angulares podem ser medidas num sistema de coordenadas retangulares (μ, η, ξ) localmente alinhadas com os vetores unitários do sistema geométrico. Alinhamentos típicos são mostrados na figura 7. Para a direção discreta $\hat{\Omega}_m$, as componentes de $\hat{\Omega}_m$ ao longo dos eixos μ , η e ξ são ν_m , η_m e ξ_m ; e estas coordenadas são os cossenos direcionais de $\hat{\Omega}_m$. Consequentemente, $\nu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1$. A direção $\hat{\Omega}_m$ pode ser descrita como um ponto na superfície de uma esfera unitária com o qual uma área superficial, ω_m , é associado.

No sistema geométrico considerado, a distância da origem é medida por r_i (ou x_i), $i = 1$ a $IM + 1$, de modo que o sistema sob consideração é dividido em IM intervalos. As áreas

das superfícies ortogonais em r_i e r_{i+1} são denotadas por A_i e A_{i+1} . O volume encerrado entre r_i e r_{i+1} é chamado de $V_{i+1/2}$. A tabela I dá os valores de A e V para as três geometrias consideradas.

TABELA I

Geometria	Variável	r	A	V
plana	x	x_i	1	$x_{i+1} - x_i$
cilíndrica	r	r_i	$2\pi r_i$	$\pi (r_{i+1}^2 - r_i^2)$
esférica	r	r_i	$4\pi r_i^2$	$4\pi (r_{i+1}^3 - r_i^3)/3$

Conforme já mencionado, para a representação direcional²⁵, direções discretas $\hat{\Omega}_m$, $m = 1$ até MM, são selecionadas e um ângulo sólido ω_m é associado a cada direção. Ao contrário da representação da coordenada espacial, a representação da coordenada angular não define as "margens" da célula direcional exceto através da escolha de ω_m . Velocidades na faixa $\Delta v_g = v_{g-1/2} - v_{g+1/2}$ formam o grupo de velocidades g , $g=1$ até IGM, com os grupos contendo os menores subcritos correspondendo às mais altas velocidades.

A idéia básica do método usado no ANISN para a seleção da equação de transporte pode ser resumida como se segue:

- todas as variáveis, r (ou x), v e $\hat{\Omega}$, são discretizadas por conjunto de pontos;
- constantes, tal como σ , e funções são definidas para cada ponto ou cada célula definidas pelos pontos discretos.
- a equação de transporte, condições de contorno e outras condições, são convertidas em equações para os pontos discretos ou células de

finidas acima:

- o conjunto final de equações acopladas é resolvido numericamente.

4.2 Médias da Função Distribuição

A média no grupo de $\psi(\vec{r}, v_g)$ na faixa de velocidades Δv_g é definido como $\psi_g(\vec{r}, \Omega)$, de modo que ψ_g tem as mesmas dimensões de ψ . No ANISN todos os neutrons em Δv_g são considerados como uma unidade com o fluxo angular de grupo definido como

$$N_g(\vec{r}, \Omega) = \psi_g(\vec{r}, \Omega) \Delta v_g. \quad (2)$$

Notando que N_g tem dimensões de neutrons por unidade de volume por unidade de ângulo sólido vezes velocidade, isto é, as dimensões do fluxo angular.

Para definir a forma discreta da equação de transporte de Boltzmann, várias médias de N_g são necessárias. Primeiro, a média de N_g sobre o volume da célula espacial entre r_i e r_{i+1} e sobre o ângulo sólido ω_m é definida como

$$N_{g,i+1/2,m} = \frac{1}{V_{i+1/2} \omega_m} \int_{V_{i+1/2}} \int_{\omega_m} N_g(\vec{r}, \Omega) d\Omega dV, \quad (3)$$

a seguir a média de N_g sobre a face da célula espacial em r_i e sobre o ângulo sólido ω_m é definida como

$$N_{g,i,m} = \frac{1}{A_i \omega_m} \int_{A_i} \int_{\omega_m} N_g(\vec{r}, \Omega) d\Omega dA, \quad (4)$$

com uma definição similar da média sobre a face em r_{i+1} , $N_{g,i+1,m}$.

Finalmente, a média de N_g sobre a célula entre r_i e r_{i+1} e sobre a "face" da célula direcional é definida como

$$N_{g,i+1/2,m-1/2} = \frac{1}{\alpha_{i+1/2,m-1/2}} \int_{\alpha_{i+1/2,m-1/2}} \int N_g(\vec{r}, \Omega) d\alpha, \quad (5)$$

e, de uma maneira similar, para a outra "face" uma definição para $N_{g,i+1/2,m+1/2}$.

Conforme escrito acima, a área "facial" (correspondendo à área geométrica A_i na equação 4) não é definida. A determinação de $\alpha_{m+1/2}$ será discutida depois que a forma discreta da equação de transporte for derivada.

4.3 Equação de Transporte em Ordenadas Discretas

Em termos das médias definidas acima, perdas numa célula finita são iguais aos ganhos, como na equação (1). O número de neutrons perdidos da célula pelo fluxo através da face em r_{i+1} é o produto do fluxo médio na face, da área facial, do ângulo sólido, e do cosseno direcional do fluxo. Este produto é $\omega_m u_m A_{i+1} N_{g,i+1,m}$. Onde u_m é o produto vetorial de \hat{Q}_m e da normal da superfície da célula espacial. A perda líquida devido aos fluxos através da superfície da célula espacial é então

$$\omega_m u_m (A_{i+1} N_{g,i+1,m} - A_i N_{g,i,m}) \quad (6)$$

De uma maneira totalmente análoga, mas não tão precisamente definida, a perda líquida devido aos fluxos através das "faces" da célula direcional é

$$\alpha_{i+1/2,m+1/2} N_{g,i+1/2,m+1/2} - \alpha_{i+1/2,m-1/2} N_{g,i+1/2,m-1/2} \quad (7)$$

Este termo representa a perda devido à redistribuição angular em geometrias curvas, e sua conexão com a equação (6) é discutida posteriormente.

A perda devido às colisões na célula é o produto do número médio de neutrons na célula, o volume da célula, o ângulo sólido e a seção de choque macroscópica total ponderada no espaço e energia:

$$\omega_m \sigma_{g,i+1/2} V_{i+1/2} N_{g,i+1/2,m} \quad (8)$$

Finalmente, com uma fonte média definida exatamente como o fluxo médio na equação (3), as perdas podem ser igualladas aos ganhos, obtendo, através disso, a forma discreta da equação de transporte:

$$\begin{aligned} & \omega_m \mu_m (A_{i+1} N_{g,i+1,m} - A_i N_{g,i,m}) + \alpha_{m+1/2,i+1/2} N_{g,i+1/2,m+1/2} - \\ & - \alpha_{m-1/2,i+1/2} N_{g,i+1/2,m-1/2} + \omega_m \sigma_{g,i+1/2} V_{i+1/2} N_{g,i+1/2,m} = \\ & = \omega_m V_{i+1/2} S_{g,i+1/2,m} \end{aligned} \quad (9)$$

Esta equação é escrita mais simplesmente se os subscritos centrais forem omitidos, uma convenção que será adotada daqui por diante. Então, a equação (9) torna-se:

$$\begin{aligned} & \omega_m \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} + \omega_m \sigma V N = \\ & = \omega_m V S, \end{aligned} \quad (10)$$

para o fluxo no grupo g.

Para definir os coeficientes α , requer-se que a soma em m da equação (10) (integral de μ da equação (1)) dê a equação do balanço de neutron. Isto será verdade se

$$\sum_{m=1}^{MM} (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) = \alpha_{MM+1/2} N_{MM+1/2} - \alpha_{1/2} N_{1/2} \quad (11)$$

$$-\alpha_{1/2} N_{1/2} = 0,$$

o que simplesmente mostra que a redistribuição líquida é zero. Para assegurar que esta condição seja satisfeita, $\alpha_{MM+1/2}$ e $\alpha_{1/2}$ são colocados iguais a zero. Além do mais, no caso de fluxo constante em qualquer ponto, todos os N's são iguais e $\sigma N = S$. Nesta situação, a equação (10) mostra que

$$\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} = -\omega_m \mu_m (A_{i+1} - A_i), \quad (12)$$

a qual, com $\alpha_{1/2} = 0$, serve para definir os α 's "recursively".

Da equação (12), então, nota-se que todos os α 's tendem a zero em geometria plana, quando $A_{i+1} = A_i$ (para todo i), de modo que não existe, conforme esperado, redistribuição nesta geometria. Além disso, com o primeiro e último α 's iguais a zero, o lado esquerdo da equação (12) quando somado em m desaparece. Portanto, o lado direito também desaparece, isto é,

$$\sum_{m=1}^{MM} \omega_m \mu_m = 0 \quad (13)$$

Esta exigência é satisfeita por todos os conjuntos de quadratura com coeficientes simétricos. Conjuntos simétricos são também requeridos para assegurar que outros sistemas simétricos quaisquer não tenham diferentes soluções "à esquerda" e "à direita". Por estas razões, o código ANISN requer que a equação (13) seja satisfeita.

Para uma adicional compreensão da natureza dos α 's, divide-se a equação (10) por ωV e faz-se as dimensões das malhas angular e espacial tenderem a zero. Em geometria plana, $\omega \rightarrow du$, $V \rightarrow dx$, e a equação (10) torna-se

$$\mu \frac{\partial N}{\partial x} + \sigma N = S. \quad (14)$$

Em geometria esférica $\omega \rightarrow du$, $V \rightarrow 4\pi r^2 dr$ e $A \rightarrow 2 \times 4\pi r dr$. O primeiro termo da equação (10) torna-se

$$\frac{\pi}{r^2} \frac{\partial (r^2 N)}{\partial r}, \quad (15)$$

quando a equação (12) é dividida por ωV , o lado esquerdo dá

$$(\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}) / \omega V = \frac{1}{V} \frac{\partial \alpha}{\partial u} \quad (16)$$

O lado direito dá $-2\frac{\mu}{r}$. Integrando com respeito a μ da $\frac{a}{V} = -\frac{\mu^2}{r} + \text{constante}$. Por causa de a tender a zero nos extremos do intervalo de μ ($\alpha_{m+1/2} = \alpha_{1/2} = 0$), a constante é $\frac{1}{r}$. Então

$$\frac{\alpha_{m+1/2} N_{1/2} - \alpha_{m+1/2} N_{m-1/2}}{\omega V} \rightarrow \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^2) N], \quad (17)$$

e a equação (10) torna-se, no limite de pequenos intervalos,

$$\frac{\mu \hat{\alpha} (r^2 N)}{r^2 \partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^2) N] + \sigma N = S, \quad (18)$$

a qual é a forma da conservação da equação de transporte em geometria esférica.

Em geometria cilíndrica requer-se mais cuidado. O primeiro termo da equação (10) dá, quando dividido por ωV ,

$$\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rN), \quad (19)$$

em analogia à geometria esférica. Para examinar o segundo termo da equação (10), define-se $\alpha_{m+1/2} = B_{m+1/2} (A_{l+1} - A_l)$, de modo que a equação (12) torna-se

$$B_{m+1/2} - B_{m-1/2} = -\omega \mu_m, \quad (20)$$

e o termo aplicável da equação de transporte é

$$\frac{(A_{l+1} - A_l) [B_{m+1/2} N_{m+1/2} - B_{m-1/2} N_{m-1/2}]}{\omega V}, \quad (21)$$

o qual no limite de pequenos intervalos espaciais torna-se

$$\frac{1}{r} \frac{[B_{m+1/2} N_{m+1/2} - B_{m-1/2} N_{m-1/2}]}{\omega}, \quad (22)$$

o que, de certa forma, é análogo à derivada angular no limite de pequenos intervalos. Em geometria cilíndrica, as duas componentes de

Ω_m são μ_m e η_m com

$$\begin{aligned}\mu_m &= (1 - \xi_m^2)^{1/2} \cos \phi_m ; \\ \eta_m &= (1 - \xi_m^2)^{1/2} \sin \phi_m .\end{aligned}\quad (23)$$

Nesta geometria, $d\Omega = d\xi d\phi$. Tornando os intervalos de ϕ pequenos para ξ fixo, temos, da equação (20):

$$\frac{B_{m+1/2} - B_{m-1/2}}{\Delta\xi} \rightarrow \frac{1}{\Delta\xi} \frac{\partial B}{\partial \phi} = -\mu \quad (24)$$

Integrando, tem-se, usando a equação (23):

$$\frac{B}{\Delta\eta} = -\eta + \text{constante.} \quad (25)$$

Agora, para ξ fixo, este coeficiente deve tender a zero em $\phi = 0$ (straight out) e $\phi = \pi$ (straight in), isto é, em $\eta = \pm D$, de modo que a constante da equação (25) é zero. Novamente para ξ fixo, temos [da equação (22)]:

$$\frac{1}{r\Delta\xi} \frac{\partial(\beta N)}{\partial \phi} \rightarrow -\frac{1}{r} \frac{\partial(\eta N)}{\partial \phi} . \quad (26)$$

Combinando as equações acima, tem-se a forma da conservação da equação de transporte em geometria cilíndrica:

$$\frac{\mu}{r} \frac{\partial(rN)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\eta N)}{\partial \phi} + \kappa N = S. \quad (27)$$

Das discussões acima nota-se que os coeficientes κ , com forme definidos, não somente preservam o balanço de neutrons na forma discreta da equação de transporte [equações (10) e (11)], como também se reduzem, no limite de pequenos intervalos, à forma analítica da equação de transporte.

A determinação da constante na equação (25), baseado no fato de que não existe redistribuição angular em certas direções (1

gualando o primeiro e o último α 's a zero), está relacionada com o uso de certas direções não ponderadas, como as direções iniciais em cálculos de fluxo. Em geometria esférica, $\mu = -1$ é escolhida como a direção inicial não ponderada. Em geometria cilíndrica, os $\mu_m = - (1 - \xi_m^2)^{1/2}$ [da equação (24)] são usados como direções iniciais para um dado nível ξ .

Assim, em geometria cilíndrica, existem conjuntos de α 's para cada nível ξ , com o primeiro e o último α 's sobre cada nível sendo zero.

4.4 Definição do Termo de Fonte

A fonte da equação (10) pode incluir termos de colisão, fontes de fissão e fontes independentes dos fluxos. Estas últimas denotadas por $Q_{g,i+1/2,m}$.

O número de neutrons de fissão produzidos no g -ésimo grupo é :

$$(FN)_{g,i+1/2} = \nu \sigma_{g,i+1/2}^f \sum_{m=1}^{MM} \omega_m^N \phi_{g,i+1/2,m} \quad (28)$$

onde a soma angular é feita para formar a componente isotrópica do fluxo angular, porque a fissão é considerada um processo isotrópico. Aqui, $\nu \sigma^f$ é a secção de choque de fissão macroscópica vezes o número médio de neutrons por fissão, ν . A fonte dos neutrons de fissão é considerada como sendo proporcional ao número produzido em todos os grupos vezes a probabilidade do neutron ser liberado no g -ésimo grupo (espectro de fissão).

Nestes termos, a fonte de fissão é:

$$S_{\text{fissão.g.i+1/2}} = \chi_g \sum_{H=1}^{IGM} (FN)_{h,i+1/2} \equiv \chi_g F_{g,i+1/2} \quad (29)$$

A forma analítica do termo de fonte de colisão é:

$$\int_{v'} \iint_{\Omega'} \sigma_s(r, v', \Omega' + v\Omega) \psi(r, v', \Omega') dv' d\Omega'. \quad (30)$$

No ANISN, a secção de choque diferencial é assumida ser expandida em polinómios de Legendre.

$$\sigma_s(r, v', \Omega' + v\Omega) = \sum_{l=0}^{\text{ISCT}} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{sl}(r, v' + v) P_l(\Omega', \Omega), \quad (31)$$

e a expansão é limitada depois do termo ISCT.

Em geometria plana e esférica, a substituição da equação (31) dentro da (30) dá

$$\sum_{l=0}^{\text{ISCT}} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \int_{v'} \sigma_{sl}(r, v' + v) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(r, \mu', v') d\mu' dv'; \quad (32)$$

e este termo é representado na forma discreta por

$$\sum_{l=0}^{\text{ISCT}} (2l+1) P_l(\mu_m) \sum_{h=1}^{\text{IGM}} \sigma_{sl, i+1/2}^{g+h} \sum_{m'=1}^{\text{MM}} \omega_m P_l(\mu_m) N_{h, i+1/2, m'} \quad (33)$$

onde $\sigma_{sl, i+1/2}^{g+h}$ é alguma apropriada média de grupo; e o factor de 1/2 foi incluído em ω_m .

Em geometria cilíndrica, o teorema de adição para $P_l(\Omega', \Omega)$ dá uma forma mais complicada para a fonte de colisão de espalhamento:

$$\sum_{l=0}^{\text{ISCT}} (2l+1) \left\{ \sum_{h=1}^{\text{IGM}} \sigma_{sl, i+1/2}^{g+h} \left[P_l(\xi_m) \sum_{m'=1}^{\text{MM}} \omega_m P_l(\xi_m) N_{h, i+1/2, m'} + \right. \right. \\ \left. \left. + 2 \sum_{r=1}^l \frac{(l-r)!}{(l+r)!} P_l^r(\xi_m) \sum_{m'=1}^{\text{MM}} \omega_m P_l^r(\xi_m) \cos r(\phi_m - \phi_{m'}) N_{h, i+1/2, m'} \right] \right\} \quad (34)$$

Na prática, este termo pode ser calculado tão facilmente como equação (33); mas, para um dado ISCT, mais integrais angulares do fluxo são requeridas.

Para as três geometrias, com espalhamento anisotrópico linear, o termo de fonte total torna-se

$$S_{g,1+1/2,m} = Q_{g,1+1/2,m} + x_g \sum_{h=1}^{IGM} v \sigma_{h,1+1/2}^f \bar{N}_{h,1+1/2} + \sum_{h=1}^{IGM} \sigma_{s0,1+1/2}^{g+h} \bar{N}_{h,1+1/2} + 3\mu_m \sum_{h=1}^{IGM} \sigma_{s1,1+1/2}^{g+h} I_{h,1+1/2} \quad (35)$$

onde a componente isotrópica do fluxo angular é

$$\bar{N}_{h,1+1/2} = \sum_{m=1}^{MM} \omega_m N_{h,1+1/2,m} \quad (36)$$

e a corrente I , é

$$I_{h,1+1/2} = \sum_{m=1}^{MM} \omega_m \mu_m N_{h,1+1/2,m} \quad (37)$$

4.5 Coefficientes de Quadratura Angular

O código ANISN aceita quaisquer coeficientes de quadratura que satisfaçam certas exigências simples, tais como eq. (13); a soma dos pesos de quadratura devem ser iguais à unidade e μ_m deve ser diferente de zero.

A equação (13) e a soma dos pesos são verificados por

$$\left| 1 - \sum_{m=1}^{MM} \omega_m (1 + \mu_m) \right| \leq 1.1^{-4} \quad (38)$$

No uso do código, pode-se aplicar quaisquer coeficientes que passem por estes testes. Em particular os conjuntos Gauss-Legendre, "Double Gauss-Legendre e Gauss-Tschebycheff podem ser usados. Em adição a estes conjuntos, os conjuntos "projection-invariant" podem ser aplicados. Porém, certas restrições adicionais são aconselháveis no uso de qualquer conjunto. A condição de "teoria de difusão"

$$\sum_{m=1}^{MM} \omega_m \mu_m^2 = \frac{1}{3} \quad (39)$$

deve ser satisfeita. Se a opção de espalhamento anisotrópico é usada, os conjuntos de quadratura que integram corretamente os polinômios de Legendre são requeridos. Por outro lado, por exemplo, se o fluxo fosse constante no ângulo, a avaliação de um momento P_2 podia dar um resultado não zero, e o balanço de neutrons seria afetado. Além do mais, a componente isotrópica do fluxo poderia incluir outras contribuições de momentos mais altos. Em geral, para espalhamento anisotrópico, a ordem de quadratura deve ser de aproximadamente duas vezes ISCT e pelo menos S_4 .

Em geometria plana e esférica, o número MM de direção é igual ao número de μ_m mais 1. Assim, para uma quadratura S_4 cinco direções são usadas. A direção adicional ($\mu = -1$) é a direção inicial não ponderada.

Uma quadratura P_3 ou DP_1 também usa cinco direções. Em geometria cilíndrica, o código usa $n(n+4)/4$ direções, isto é, para uma quadratura S_4 , oito direções são usadas. Estas são $n(n+2)/4$ direções ponderadas e $n/2$ direções iniciais. O arranjo de pontos nos níveis ξ sobre a esfera unitária é mostrado na seção 5.1, ou referência (24).

4.6 Solução da Equação de Transporte "Adjoint"

O código AVISN resolve a forma "adjoint" da equação (10) pela transposição (em energia) da matriz espalhamento e da fonte de

fissão do termo de fonte. A matriz associada com o tratamento dos termos de fuga da equação de transporte não é transposta (transposed). Aos níveis disso, por causa dos conjuntos direcionais angulares serem assumidos simétricos, o cálculo "adjoint" do operador de fuga procede-se como no cálculo direto, mas os resultados do cálculo "adjoint" são identificados com $-\frac{\Omega}{m}$. Por exemplo, a condição de contorno de fluxo "no-incoming" num problema "adjoint" é interpretado como uma condição de fluxo "no-outgoing". Uma análise não publicada deste tratamento tem demonstrado que as equações de diferença são exatamente "adjoint" em geometria plana. O erro, se houver, em geometrias curvas é pequeno e decresce com o decréscimo das dimensões da malha angular espacial. Além do mais, para transpor a matriz de secção de choque de espalhamento, o código ANISN, inverte a ordem de grupo das secções de choque, a fonte (se houver), o espectro de fissão e velocidades e as estimativas dos fluxos de entrada (input).

Esta inversão é uma conveniência, porque o "adjoint" de um problema de "downscatter" é um problema de "upscatter" mais consumidor de tempo. Procedendo-se na ordem inversa nos grupos, o problema de "upscatter" torna-se, uma vez mais, um problema de "downscatter". A experiência tem demonstrado que se o teste de convergência "point-wise" é usado, o código ANISN obtém o mesmo autovalor de multiplicação em ambos os cálculos direto e "adjoint", mesmo em problemas de multigrupo e multiregião.

5. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM ORDENADAS DISCRETAS

As equações derivadas acima, juntamente com as condições de contorno, são resolvidas por procedimentos iterativos. Cada grupo de velocidade é tratado separadamente, começando do grupo de mais alta energia para soluções do fluxo direto ou, correspondentemente, do grupo de mais baixa energia para o fluxo "adjoint". O processo é começado com uma avaliação inicial da densidade de fissão ou fluxos de neutrons e um autovalor paramétrico (no caso homogêneo) e termina quando os critérios de convergência são satisfeitos.

A equação (13) contém cinco incógnitas : N_{i+1} , N_i , $N_{m+1/2}$, $N_{m-1/2}$ e N . Somente duas destas incógnitas podem ser supostas conhecidas das condições de contorno da célula. Equações de diferença são requeridas para reduzir o número de incógnitas ao número de equações. Nesta seção, a equação (13) é resolvida e procedimentos para avaliar a solução são descritos.

5.1 Solução da Diferença de "Diamond"

As equações de diferença de "diamond" supõe que, dentro de uma célula,

$$N_{i+1} + N_i = N_{m+1/2} + N_{m-1/2} = 2N ; \quad (40)$$

Se o fluxo está sendo seguido numa direção negativa e na ordem crescente de m , N_{i+1} e $N_{m-1/2}$ podem ser supostos conhecidos. Usando a equação (40) na equação (13) para resolver N , dá

$$N = \frac{-L\alpha N_{i+1} + \alpha N_{m-1/2} + VS}{-2\mu A_i + 2\alpha_{m+1/2}/\omega + V} , \quad (41)$$

onde $\alpha = (\alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2})/\omega$ e $A = A_{i+1} + A_i$. Usando a equação (12) nota-se que

$$-2\mu A_i + 2\alpha_{m+1/2}/\omega_m = -\mu A + \alpha , \quad (42)$$

de modo que

$$N = \frac{-\mu AN_{i+1} + \alpha N_{m-1/2} + VS}{-\mu A + \alpha + \sigma V} , \quad (43)$$

Uma vez que N é conhecido, a equação (40) dá

$$N_{m+1/2} = 2N - N_{m-1/2} \quad (44)$$

$$N_i = 2N - N_{i+1}$$

Em consequência, a equação (43) é usada como uma relação de recorrência quando se procede para dentro em i para um dado m , aumentando m , novamente se procede para dentro em i . Nas direções para fora ($\mu > 0$), N_i é suposto conhecido ao invés de N_{i+1} .

Usando a equação (40) na equação (19), dá

$$N = \frac{\mu AN_i + \alpha N_{m-1/2} + VS}{\mu A + \alpha + V\sigma}$$

$$N_{i+1} = 2N - N_i \quad (45)$$

$$N_{m+1/2} = 2N - N_{m-1/2}$$

O código ANISN usa a fórmula de recorrência

$$N = \frac{|\mu| AN^* + \alpha N_{m-1} + VS}{|\mu| A + \alpha + V\sigma} \quad (46)$$

onde $N^* = N_{i+1}$ se $\mu_m < 0$, e $N^* = N_i$ se $\mu_m > 0$. A solução da equação (10) é efetuada usando a equação (46) "recorrentemente". Valores iniciais de N_{i+1} são obtidos das condições de contorno externas do sistema. Porém, nenhum valor inicial de $N_{m-1/2}$ está disponível para iniciar o cálculo com a equação (46). As direções iniciais de cálculo é que proporcionam as condições iniciais necessárias. Nestas direções não existe redistribuição angular, de modo que

$$N_{m+1/2} = N_{m-1/2} = N = (N_{i+1} + N_i)/2 \quad (47)$$

Também para estas direções $\alpha_{m-1/2} = 0$. Então, usando a equação (12),

$$\frac{\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2}}{\omega_m} = - \mu_m (A_{i+1} - A_i) (N_{i+1} + N_i)/2. \quad (48)$$

quando esta relação é substituída na equação (10), a equação resultante é

$$\mu A (N_{i+1} - N_i)/2 + \sigma V N = S V \quad (49)$$

O uso da relação de diferença de "diamond" para resolver esta relação para N em termos de N^* , dá

$$N = \frac{|\mu| A N^* + V S}{|\mu| A + \sigma V} \quad (50)$$

Esta equação para as direções espaciais é a mesma que a equação (46) com $\alpha = 0$. A equação (49) é convenientemente usada em todas as direções se, nas direções especiais $\alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2} = 0$. Isto é feito dando às direções espaciais o peso zero. Além do mais, o uso de pesos zero não afeta as simetrias requeridas nos coeficientes de quadratura remanescente.

5.2 Correções de Fluxos Negativos

Conforme indicado acima, a equação (46) é avaliada para todo i , $i = IM, IM-1, \dots, 1$, começando com a direção de μ mais negativo. Valores de $N_{m+1/2}$ assim obtidos tornam-se entradas para o cálculo com a direção do próximo μ mais negativo; este cálculo então, procede-se na mesma sequência de i . Quando o cálculo das direções para fora começa, condições de contorno à esquerda são usados para inicializar N_{im} no contorno, e o cálculo se precede para $i = 1$ até IM para cada uma das direções (com μ positivo e crescente). Nesta sequência de cálculos com conjuntos de quadratura tendo pesos positivos, $|\mu|A, \alpha$, e V da equação (46) são quantidades positivas. Se S e σ são positivos, então N sempre será positivo se $N_{m-1/2}$ e N^*

forem positivos. Isto é fisicamente significativo e é uma situação desejável. Porém, uma vez que N é calculado, as extrapolações $N_{i+1} = 2N - N_{i+1}$ (ou $N_{i+1} = 2N - N_i$) e $N_{m+1/2} = 2N - N_{m-1/2}$, podem produzir valores negativos de N^* ou $N_{m+1/2}$ como entradas para o próximo cálculo. Estes valores negativos podem produzir oscilações ou N negativo. Para prevenir fluxos de entradas negativos, o procedimento seguinte é usado. Se, por exemplo, o resultado da extrapolação der $N_{m+1/2} = 2N - N_{m-1/2} < 0$, então $N_{m+1/2}$ é colocado igual a zero na equação (10), dando

$$\mu(A_{i+1}N_{i+1} - A_iN_i) - \alpha_{m-1/2}N_{m-1/2}/\omega_m + \sigma VN = VS. \quad (51)$$

Usando a relação de diferença de "diamond" $2N = N_{i+1} + N_i$, esta relação é resolvida para N , dando

$$N = \frac{|\mu|N^*A + \alpha_{m-1/2}N_{m-1/2}/\omega_m + VS}{2|\mu|A^* + \sigma V}. \quad (52)$$

onde $A^* = A_{i+1}$ quando $N^* = N_i$, e $A^* = A_i$ quando $N^* = N_{i+1}$. Então, se $N_{m+1/2}$ acontece de ser negativo, é colocado igual a zero; e N é ajustado para conservar neutrons na célula com $N_{m+1/2} = 0$. Se, depois que a extrapolação for efetuada sobre os resultados da equação (46), for encontrado que o fluxo espacial extrapolado (N_i ou N_{i+1}) é negativo, então

$$N = \frac{|\mu|A_{i+1}N_{i+1} + \alpha N + VS}{2\alpha_{m+1/2}/\omega_m + V\sigma} \quad (53)$$

ou

$$N = \frac{|\mu|A_iN_i + \alpha N + VS}{2\alpha_{m+1/2}/\omega_m + V\sigma}$$

é usado, dependendo se N_{i+1} ou N_i está sendo extrapolado. Se depois de usar tanto a equação (52) como a equação (53), a extrapolação para o fluxo remanescente der um resultado negativo, uma correção final é feita para o fluxo em questão, colocando-o igual a zero e calculando N de

$$N = \left[\frac{1}{V} \left[A_{i+1} N_{i+1} + \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} / \omega + VS \right] \right] / V\omega$$

ou

(54)

$$N = \left[\frac{1}{V} \left[A_i N_i + \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} / \omega + VS \right] \right] / V\omega.$$

As correções feitas acima garantem valores positivos de N con- tanto que a fonte e secção de choque numa célula sejam positivos. Es- tas correções também preservam o balanço de neutron, visto que o ajustamento de N é feito a partir da afirmação de conservação da e- quação (10) de uma maneira consistente com suposição de fluxo zero.

Nas versões mais recentes outras técnicas são utilizadas como, por exemplo, o modelo de diferença ponderada, o qual não será discutido aqui.

5.3 Iteração e Testes de Convergência¹⁸

5.3.1 Iteração Interna

Uma passada através da malha direcional espacial completa em um grupo usando a equação (46) é uma iteração inter- na. Porém, S depende de N através do espalhamento direto do grupo (σ_{s0}^{g+g}) e através da fonte de fissão. A fonte de fissão é re- recalculada somente depois de uma iteração externa completa (todos os grupos), mas a fonte espalhadora dentro do grupo é recalculada como parte de cada ciclo de iteração interna.

$$\sigma = c_{i+1/2}^r + \sigma_{s0,i+1/2}^{g+g} \quad (55)$$

$$S = \sigma_{s0,i+1}^{g+g} - \bar{N}_{g,i+1/2} + S'_{g,i+1/2,m}$$

onde \bar{N} é definido na equação (38). Se a equação (10) for somada so- bre todas as direções, a equação de balanço de neutrons é obtida :

$$A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + (\sigma_r^F + \sigma_{SD}^{G+R}) V \bar{N} = (\sigma_{SD}^{G+R} \bar{N}^p + S') V, \quad (56)$$

onde o superposto p indica que o fluxo é de uma iteração precedente. À medida em que as iterações se procedem, \bar{N}^p se aproxima de \bar{N} . Para acelerar o processo, o nível dos fluxos é variado por um fator designado para dar à equação (56) uma fonte que dependa de \bar{N} ao invés de \bar{N}^p . Multiplicando a equação (56) por f e rearranjando os termos da direita, dá

$$f \left[A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + (\sigma_r^F + \sigma_{SD}^{G+R}) \bar{N} \right] = \left[f \sigma_{SD}^{G+R} \bar{N}^p + S' \right] V + V(f - 1)S' + f \sigma_{SD}^{G+R} (\bar{N}^p - \bar{N}) V. \quad (57)$$

Isto seria uma declaração exata do balanço para um nível de fluxo $f \bar{N}_{g,i+1/2}$ se

$$(f - 1)VS' + f \sigma_{SD}^{G+R} (\bar{N}^p - \bar{N}) V = 0 \quad (58)$$

Devido a f ser uma constante e as outras quantidades dependentes de i , o melhor que pode ser feito é requerer que

$$f = \frac{\sum_i VS'}{\left[\sum_i VS' + V \sigma_{SD}^{G+R} (\bar{N}^p - \bar{N}) \right]} \quad (59)$$

Todos os fluxos são multiplicados por f depois de cada iteração interna, assegurando, desta forma, que os neutrons sejam conservados em todo o sistema. Notando que, quando \bar{N}^p aproxima-se de \bar{N} , f aproxima-se da unidade. O procedimento acima, na prática, acelera a convergência.

Para o teste da convergência, as quantidades

$$E_2 = \left| \sum_i V_{i+1/2} \sigma_{SD,i+1/2}^{G+R} \left[\bar{N}_{i+1/2} - \bar{N}_{i+1/2}^p \right] \right| \quad (60)$$

e no caso de $\frac{g^*g}{s_0}$ ser pequeno)

$$E_3 = \sum_1 V_{1+1/2} (\sigma_{1+1/2}^B - \sigma_{s_0}^{g^*g}) |\bar{N}_{1+1/2} - \bar{N}_{1+1/2}^D| \quad (61)$$

são calculadas e requer-se que sejam menores do que ϵ_g , onde

$$\epsilon_g = \frac{4\epsilon \sum_1 V_{1+1/2} \left\{ \sum_{g=1}^{IGM} [Q_{g,1+1/2} + X_{g,F,1+1/2}] \right\}}{(IGM + 3)} \quad (62)$$

Então, ϵ_g é total vezes uma fonte "média" (onde ϵ é uma quantidade de entrada). As equações (60) e (61) são, de uma certa forma, medidas das fontes "falsas" que são requeridas pequenas quando comparadas com as fontes verdadeiras. Se E_2 e E_3 forem menores do que ϵ_g , então a iteração interna estará terminada. Para problemas de penetração, foi considerado vantajoso adicionar o critério de convergência abaixo:

$$\text{Max}_1 \left| \frac{\bar{N}_{1+1/2} - \bar{N}_{1+1/2}^D}{\bar{N}_{1+1/2}^D} \right| < \epsilon_a \quad (63)$$

(ϵ_a é também uma quantidade de entrada)

5.3.2 Condições de Contorno

O código ANISN permite especificações para as condições de contorno em cada uma das duas superfícies externas de um problema. Estes contornos são intitulados "Left" e "Right", onde o contorno "right" tem a coordenada de maior dimensão. As condições de contorno são as seguintes:

- a. Vácuo o fluxo angular, $N(r, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado, não retorna. O código permite que partículas escapem do sistema.

- b. **Reflexiva:** o fluxo angular, $N(r, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado, retorna no mesmo contorno (da mesma forma que uma reflexão no espelho), em função da energia e do ângulo, isto é, o fluxo que sai, retorna na exata direção oposta na qual deixou o sistema.
- c. **Periódica:** o fluxo angular, $N(r, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado, retorna no outro contorno em função da energia e do ângulo, isto é, o fluxo que sai no contorno direito retorna no esquerdo, na exata direção na qual deixou o contorno direito.
- d. **"White" :** o fluxo angular, $N(r, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado, é integrado na variável angular, Ω . Este fluxo é então retornado isotropicamente no mesmo contorno em função da energia e do ângulo.
- e. **"Albedo":** o fluxo angular, $N(r, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado, é integrado na variável angular, Ω . O fluxo é então retornado isotropicamente no mesmo contorno, em função da energia e do ângulo, proporcionado pelo "albedo" de entrada dependente da energia. Se o "albedo" (ou fração de retorno das partículas) não for especificado, um "albedo" de 1.0 é assumido.

Continuando a discussão anterior, outros testes de iteração interna são associados com as condições de contorno implícitas. Uma condição de contorno zero não causa problemas, porque os fluxos de entrada tanto do contorno da esquerda como da direita são

colocações iguais a zero. Uma condição de contorno refletida à esquerda ajusta os fluxos de entrada iguais aos de saída (especularmente) no contorno. Entretanto, uma condição de contorno refletida à direita requer que a informação de uma iteração prévia seja utilizada. Para acelerar a convergência da iteração requerida por esta situação implícite, o código ANISN usa um tratamento de dois passes. Uma iteração interna é feita normalmente. Uma segunda iteração interna é feita usando o fluxo de saída da primeira iteração como uma fonte de fluxo de entrada. Esta fonte de contorno é a única usada para a segunda iteração. Os resultados das duas iterações são combinados de tal maneira que a fuga líquida no contorno seja zero. Este tratamento de dois passes é considerado convergente quando a fuga líquida no contorno for menor do que ϵ_g .

5.3.3 Iterações Externas

Uma vez que a iteração interna é obtida no primeiro grupo, o cálculo se procede para cada grupo até que as soluções internas convergidas para cada grupo sejam obtidas. Os cálculos são efetuados descendentemente em energia, de $g = 1$ até $g = IGM$. A parte de "downscattering" da fonte para cada grupo subsequente é recalculado tão logo a informação do fluxo esteja disponível. Consequentemente, se não existir fonte de fissão ou "upscatter" [o que implica numa fonte independente, Q], o cálculo é terminado logo que uma solução interna convergida seja obtida em todos os grupos. Entretanto, se fissão ou "upscatter" estiver presente, a iteração deve ser continuada porque estas fontes dependem dos fluxos que estão sendo calculados. O ciclo de iterações requeridos para dar convergência de "upscatter" e fissão é chamado de iteração externa.

Convergência de "upscatter" é acelerada de uma maneira análoga ao procedimento usado para acelerar a convergência de espalhamento dentro do grupo. Devido a secção de choque total ser a soma das secções de choque de absorção (σ^a), "upscatter" (σ^{up}), espalhamento dentro do grupo ($\sigma_{g \rightarrow g}^{g \rightarrow g}$) e "downscatter" (σ^{down}), com

$$\sigma_g^{\text{down}} = \sum_{h>g} \text{IGM} \sigma_{s0}^{h+g}$$

$$\sigma_g^{\text{up}} = \sum_{h<g} \text{IGM} \sigma_{s0}^{h+g}$$
(64)

ambos os lados, direito e esquerdo, da equação de balanço dependem de σ^{up} . Para esclarecer este ponto, a equação de balanço é escrita:

$$A_{i+1} I_{g,i+1} - A_i I_{g,i} + (\sigma_g^a + \sigma_{s0}^{g+g} + \sigma_g^{\text{up}} + \sigma_g^{\text{down}}) V \bar{N}_g =$$

$$= V(Q_g + \chi_g F + \sum_h \sigma_{s0}^{g+h} \bar{N}_h)$$
(65)

onde somente as componentes isotrópicas da fonte sobrevivem à soma de m feita para formar a equação. Somando a equação (65) sobre todos os grupos dá

$$\sum_g \left[A_{i+1} I_{g,i+1} - A_i I_{g,i} + (\sigma_g^a + \sigma_{s0}^{g+g} + \sigma_g^{\text{up}} + \sigma_g^{\text{down}}) V \bar{N}_g \right] =$$

$$= \sum_g V(Q_g + \chi_g F^p) + \sum_h V(\sigma_{s0}^{h+h} \bar{N}_h + \sigma_h^{\text{down}} \bar{N}_h + \sigma_h^{\text{up}} \bar{N}_h^p)$$
(66)

Aqui, o superscrito p indica que as fontes de fissão e "upscatter" dependem de informação prévia. A dependência da fonte de "self-scatter" da informação precedente é removida pela iteração interna, e a fonte de "down-scatter" é baseada nos últimos fluxos disponíveis. Da equação (66), um fator de escala "upscatter" é definido da mesma forma que para iteração interna.

$$f^{\text{up}} = \frac{E_5}{E_5 + E_2}$$
(67)

onde

$$E_5 = \sum_{g,1} V(Q_g + \chi_g F) \quad (68)$$

e

$$E_2 = \sum_{g,1} V \sigma_g^{up} (\bar{N}^p - \bar{N}_g). \quad (69)$$

Quando "upscatter" está presente, o fator de escala f^{up} é usado para ajustar o nível de todos os fluxos antes que outra iteração externa seja executada. Para convergência da fonte de "upscatter", é necessário que E_2 seja menor do que E_5 .

O processo de escalonamento assume que a iteração interna converge, e o código possui características que restringem o número de iterações internas, então torna-se necessário que estas características sejam usadas com cuidado em problemas de "upscatter".

Se não existir fonte Q , a fonte total de fissão é normalizada a um nível especificado por um parâmetro de entrada. Todos os dados de fluxo são feitos consistentes com esta normalização. Depois de uma iteração externa, a fonte de fissão é recalculada e a razão,

$$\lambda = \frac{\sum_1 V (F + \sum_{g,1} Q_g)}{\sum_1 V (F^p + \sum_{g,1} Q_g)} \quad (70)$$

é formada antes da renormalização da fonte de fissão. Assim, λ é a taxa de multiplicação. Antes de cada iteração externa subsequente, o espectro de fissão χ_g , é multiplicado por $1/\lambda$, de modo que λ tenda à unidade, à medida em que a iteração se procede.

Nestes termos, a constante de multiplicação do sistema (K) é o produto de sucessivos λ 's. Nos cálculos da constante de multiplicação, K é formado pela divisão da somatória em energia do espectro de fissão inicial e pela somatória em energia do espectro de fissão corrente:

$$\kappa = \frac{\sum_{g=1}^G \chi_g^{\text{inicial}}}{\sum_{g=1}^G \chi_g} \quad (71)$$

Convergência da fissão é assumida quando $|1 - \lambda| < \epsilon$. Ambas as convergências, de fissão e "upscatter", são requeridas antes que uma sequência de iterações externas seja terminada. Tem-se notado que em muitos problemas a convergência da fissão tem sido atingida antes da convergência do "upscatter".

5.3.4 Pesquisas de Autovalores Implícitos

Até este ponto, os métodos descritos são suficientes para permitir conclusão de problemas do tipo multiplicação e fonte (ou uma combinação subcrítica das duas). É frequentemente desejável pesquisar outros autovalores, como por exemplo, o raio para o qual um sistema é crítico.

O código ANISN permite pesquisar os seguintes autovalores: (1) "time absorption", (2) concentração de um elemento (ou mistura, ou elemento na mistura), (3) espessura da zona, (4) uma dimensão do sistema para obter um nível desejado de multiplicação e (5) "bucklings".

Nestas situações, o espectro de fissão não é variado; aos níveis disso, o parâmetro desejado é alterado para fazer λ se aproximar da unidade. Em termos gerais, um valor convergido de ($\lambda \neq 1$) é obtido por uma sequência de iterações externas para a configuração inicial do sistema. Então o sistema é alterado (pela variação do parâmetro desejado por uma quantidade de entrada especificada); e outra sequência de iterações externas é efetuada para obter um segundo λ , convergido.

A partir deste ponto, procedimentos de interpolação linear (parabólico quando possível), modificados por salvaguardas de precaução, são usados para pesquisar um valor do parâmetro que faz λ igual à unidade.

5.4 Problema Padrão Resolvido pelo ANISN

Uma montagem de uma pequena esfera crítica (small spherical critical assembly) foi projetada pelos métodos da teoria do transporte de multigrupos. Este problema, da área de neutrônica, é um modelo do reator "Lady Godiva". É um problema de autovalor que usa as seções de choque de Hansen-Roach para seis grupos de energia. O problema fonte foi reduzido por aproximação em multigrupos e consideração de espalhamento isotrópico. Cálculos das ordenadas discretas em multigrupos, utilizando o modelo matemático de quadratura de Gauss-Legendre em todo o intervalo, com a máxima variação relativa do fluxo escalar de 10^{-6} entre as iterações internas, e da fonte entre iterações externas.

5.4.1 Situação Fonte Padrão, IC.1

Identificação : 1

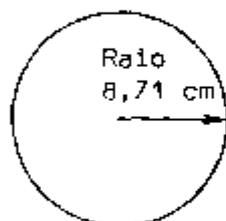
Data submetida: julho de 1966 Por: K.D. Lathrop (S.G.A.)

Data adotada : 1º de agosto de 1966 Por: D.R. Vondy (ORNL)

Título Descritivo: "Small Spherical Critical Experiment (Lady Godiva)"

Função Sugerida : Soluções Testes da Teoria de Transporte e Conjuntos de Seções de choque em multigrupos.

Configuração :



$$\begin{aligned} \psi(r, \mu) &= 0 \\ \text{em } r &= 8,71 \text{ cm} \\ \text{para } \mu &< 0 \end{aligned}$$

Detalhes :

Densidade atômica homogênea por cm^3 :

$$U^{235} : 0,045447 \times 10^{24}$$

$$U^{238} : 0,00256 \times 10^{24}$$

Referência (32)

	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4	Grupo 5	Grupo 6
		U-235 - Sacções de Choque (microscópicas, barnas)				
σ_a	1,260000 E+00	1,30000 E+00	1,33000 E+00	1,35000 E+00	1,66000 E+00	2,94000 E+00
$\nu \sigma_f$	3,557000 E+00	3,19500 E+00	3,08700 E+00	2,98800 E+00	3,51800 E+00	5,71000 E+00
ν_t	4,25000 E+00	4,50000 E+00	4,65000 E+00	5,20000 E+00	7,0000 E+00	1,20000 E+01
σ_{g-1}	1,20000 E+00	1,77000 E+00	2,30000 E+00	3,42000 E+00	6,18000 E+00	9,06000 E+00
σ_{g-1-g}	0,00000 E+00	2,70000 E-01	2,40000 E-01	5,50000 E-01	3,50000 E-01	0,0000 E-02
σ_{g-2-g}	0,000000 E+00	0,0000 E+00	3,70000 E-01	6,70000 E-01	4,0000 E-01	9,0000 E-02
σ_{g-3-g}	0,00000 E+00	0,0000 E+00	0,00000 E+00	6,50000 E-01	4,50000 E-01	7,00000 E-02
σ_{g-4-g}	0,000000 E+00	0,0000 E+00	0,00000 E+00	0,0000 E+00	4,45000 E-01	7,0000 E-02
σ_{g-5-g}	0,000000 E+00	0,0000 E+00	0,00000 E+00	0,0000 E+00	0,0000 E+00	6,0000 E-02

	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4	Grupo 5	Grupo 6
		U-238 - Seções de Choque (microscópicas, berns)				
σ_a	5,66000 E-01	5,35000 E-01	1,44000 E-01	1,40000 E-01	1,60000 E-01	4,00000 E-01
$\nu\sigma_f$	1,72500 E+00	1,21300 E+00	1,08000 E-01	0,00000 E+00	0,00000 E+00	0,00000 E+00
σ_t	4,00000 E+00	4,40000 E+00	4,50000 E+00	5,250000E+00	8,20000 E+00	1,18000 E+01
σ_{g+E}	1,25400 E+00	1,82500 E+00	2,90600 E+00	4,53000 E+00	7,96000 E+00	1,14000 E+01
σ_{g-1+g}	0,00000 E+00	3,30000 E-01	3,50000 E-01	8,00000 E-01	5,00000 E-01	8,00000 E-02
σ_{g-2+g}	0,00000 E+00	0,00000 E+00	4,60000 E-01	9,60000 E-01	5,50000 E-01	8,00000 E-02
σ_{g-3+g}	0,00000 E+00	0,00000 E+00	0,00000 E+00	7,90000 E-01	6,40000 E-01	1,00000 E-01
σ_{g-4+g}	3,00000 E+00	0,00000 E+00	0,00000 E+00	0,00000 E-00	5,30000 E-01	9,00000 E-02
σ_{g-5+g}	0,00000 E+00	0,00000 E+00	0,00000 E+00	2,00000 E+00	0,00000 E+00	7,00000 E-02

Constantes de Cuadratura Angular

Conjunto nº 1		Conjunto nº 2		Conjunto nº 3	
coseno (μ)	peso (w)	coseno (μ)	peso (w)	coseno (μ)	peso (w)
-1,0	0,0	-1,0	0,0	-9,90238 E-01	0,0
-9,89401 E-01	1,35762 E-02	-9,80145 E-01	2,53071 E-02	-9,80501 E-01	2,44936 E-02
-9,44575 E-01	3,11268 E-02	-8,98333 E-01	5,55953 E-02	-9,09265 E-01	4,13296 E-02
-8,65631 E-01	4,75793 E-02	-7,62766 E-01	7,84267 E-02	-8,31997 E-01	3,92569 E-02
-7,55404 E-01	6,23145 E-02	-5,91717 E-01	9,06709 E-02	-7,46751 E-01	4,00796 E-02
-6,17876 E-01	7,47980 E-02	-4,09283 E-01	9,06709 E-02	-6,50426 E-01	6,43753 E-02
-4,58017 E-01	9,45732 E-02	-2,37234 E-01	7,84267 E-02	-5,37097 E-01	4,42107 E-02
-2,51604 E-01	9,13017 E-02	-1,01667 E-01	5,55953 E-02	-3,92289 E-01	1,06625 E-01
-9,50125 E-02	9,47253 E-02	-1,38551 E-01	2,53071 E-02	-1,38957 E-01	1,37170 E-01
9,50125 E-02	9,47253 E-02	1,98551 E-02	2,53071 E-02	1,38957 E-01	1,37170 E-01
2,81604 E-01	9,13017 E-02	1,01667 E-01	5,55953 E-02	3,92289 E-01	1,37170 E-01
4,58017 E-01	9,45732 E-02	2,37234 E-01	7,84267 E-02	5,37097 E-01	4,42107 E-02
6,17876 E-01	7,47980 E-02	4,09283 E-01	9,06709 E-02	6,50426 E-01	6,43753 E-02
7,55404 E-01	6,23145 E-02	5,91717 E-01	9,06709 E-02	7,46751 E-01	4,00796 E-02
8,65631 E-01	4,75793 E-02	7,62766 E-01	7,84267 E-02	8,31997 E-01	3,92569 E-02
9,44575 E-01	3,11268 E-02	8,98333 E-01	5,55953 E-02	9,09265 E-01	4,13296 E-02
9,89401 E-01	1,35762 E-02	9,80145 E-01	2,53071 E-02	9,80501 E-01	2,44936 E-02

Programa : ANISN

Resultados Principais:

	Resultados Publicados		Resultados Obtidos
Computador	IBM - 7090	IBM - 360/75	IBM - 370/155
(40 intervalos espaciais, ordem de quadratura angular 16)			
1. Fator de Multiplicação	0,998674	0,998666	0,998670
2. Número de Iterações			
Externas	17	17	16
Internas	412	412	684
3. Tempo de Máquina	~5 min.	1,32 min.	1,68 min.

4. Razão da fuga superficial para perda total

	Resultados Publicados		Resultados Obtidos*
Grupo	IBM - 7090	IBM - 360/75	IBM - 370/155
1	0,0799757	0,0799753	0,0799755
2	0,146858	0,146856	0,146856
3	0,0912166	0,0912276	0,0912262
4	0,147259	0,147256	0,147257
5	0,091786	0,0917863	0,0917872
6	0,0112374	0,0112371	0,0112372
Total	0,568346	0,568339	0,568342

(*) Estes resultados foram obtidos utilizando as constantes de quadratura de Gauss (conjunto nº 1), ou seja, as mesmas que foram utilizadas para os resultados publicados.

Resultados Adicionais:

Intervalos Especiais	Ordem de Quadratura Angular	Resultados Publicados			Resultados Obtidos		
		IBM - 7090	IBM - 360/75	IBM - 370/155	Fator de Multiplicação	Tempo de Máquina (min)	Fator de Multiplicação
10	4	1,00506	1,00505	1,0050564	0,39	0,46	0,16
20	8	0,998534	0,998534	0,9985599	0,58	0,46	0,46
40	16	0,99674	0,99666	0,996670	1,32	1,68	1,68
80	32	0,996152	0,996133	0,996141	4,32	34,24	34,24
160	64	---	0,995068	0,995964	13,62	151,75	151,75

Resultados Obtidos, resolvendo o mesmo problema, com a utilização do conjunto nº 2, de constante de quadratura:

1. Fator de Multiplicação - $k = 0,996483$
2. Número de Iterações
 - Externas = 16
 - Internas = 689
3. Tempo de Máquina = 2.69 min.
4. Razão de fuga superficial para perda total

Grupo 1	-	0,0799928
Grupo 2	-	0,146887
Grupo 3	-	0,0912439
Grupo 4	-	0,147275
Grupo 5	-	0,0917931
Grupo 6	-	<u>0,0112378</u>
Total		0,568429

Resultados Obtidos com a utilização do Conjunto nº 3 de constantes de quadratura (obtidos com o código 00Q):

1. Fator de Multiplicação - $k = 0,997205$
2. Número de Iterações
 - Externas = 17
 - Internas = 678
3. Tempo de Máquina = 2.77 min.
4. Razão de fuga superficial para perda total

Grupo 1	-	0,0799233
Grupo 2	-	0,146769
Grupo 3	-	0,0911835
Grupo 4	-	0,147214
Grupo 5	-	0,6917002
Grupo 6	-	0,0112380
		<hr/>
Total		0,568105

Comparação entre os Resultados Obtidos e Publicados

Solução padrão: com a utilização das constantes de quadratura de Gauss (Conjunto nº 1):

$$k_{ef}(IBM - 370/155) - k_{ef}(IBM - 360/75) = 0,000004 \rightarrow$$

$$\rightarrow \Delta t_{CPU} = 0,36 \text{ min.}$$

$$k_{ef}(IBM - 370/155) - k_{ef}(IBM - 7090) = -0,000004 \rightarrow$$

$$\rightarrow \Delta t_{CPU} = \text{(sem referência para comparação)}$$

Diferença entre Resultados Obtidos (pelo computador IBM - 370/155, IPEN) e os Publicados (com a utilização dos computadores IBM-360/75 e IBM-7090, UCCTC) da razão fuga superficial para perda total:

Grupos	(obtidos) - (publicados) (IBM - 370/155) (IBM - 360/75)	(obtidos) - (publicados) (IBM - 360/75) (IBM - 7090)
1	0,000002	-0,0000002
2	0,0	-0,000032
3	0,0600006	-0,0000004
4	0,000001	-0,000002
5	0,0000009	-0,0000008
6	0,0000001	-0,0000002

Intervalos Espaciais	Ordem de Quadratura	$K_{ef}(\text{obtido}) - K_{ef}(\text{publicado})$ IBM - 370/155 IBM - 360/75	$K_{ef}(\text{obtido}) - K_{ef}(\text{publicado})$ IBM - 370/155 IBM - 7090
10	4	0,0000006	0,0000004
20	8	0,000003	0,000003
40	16	0,000004	-0,000004
80	32	0,000009	-0,0000011
160	64	-0,000004	--

Diferença entre os Resultados Obtidos (com a utilização das constantes de quadratura do Conjunto nº 2) e os Resultados Publicados:

$$K_{ef}(IBM - 370/155) - K_{ef}(IBM - 360/75) = -0,000187 \rightarrow \Delta t_{CPU} = 1,37 \text{ min.}$$

$$K_{ef}(IBM - 370/155) - K_{ef}(IBM - 7090) = -0,000183 \rightarrow \Delta t_{CPU} = (\text{sem referência})$$

e com relação à razão da fuga superficial para perda total:

Grupos	(obtidos) - (publicados)		(obtidos) - (publicados)	
	IBM - 370/155	IBM - 360/75	IBM - 370/155	IBM - 7090
1	0,0000175		0,000017	
2	0,000031		0,000029	
3	0,0000163		0,000015	
4	0,000019		0,000016	
5	0,0000068		0,000005	
6	0,0000008		0,0000005	

Diferença entre os Resultados Obtidos (com a utilização das constantes de quadratura do Conjunto nº 3) e os Resultados Publicados:

$$K_{ef}(IBM - 370/155) - K_{ef}(IBM - 360/75) = 0,000535 \rightarrow \Delta t_{CPU} = 1,45 \text{ min.}$$

$$K_{ef}(IBM - 370/155) - K_{ef}(IBM - 7090) = 0,000539 \rightarrow \Delta t_{CPU} = (\text{sem referência})$$

e com relação à razão da fuga superficial para perda total:

Grupos	(obtidos) - (publicados)		(obtidos) - (publicados)	
	IBM - 370/155	IBM - 360/75	IBM - 370/155	IBM - 7090
1	-0,000052		-0,00005	
2	-0,000087		-0,000089	
3	-0,000044		-0,000045	
4	-0,000042		-0,000042	
5	-0,000006		-0,000006	
6	+0,0000009		+0,0000009	

Observa-se que um mesmo problema foi resolvido utilizando diferentes conjuntos de quadratura, proporcionando uma boa concordância entre os resultados, o que era de se esperar, pois se trata de uma característica própria do método S_n . Os bons resultados deste problema, além de testar os diferentes conjuntos de quadratura, testam também, simultaneamente, a operação dos códigos de ANISN e DOQ (Discrete Ordinates Quadrature). nas instalações do IPEN, uma vez que o Conjunto nº 3 de constantes de quadratura foi obtido com a utilização do código DOQ.

6. O CÓDIGO DOT

O método de ordenadas discretas ou método S_n de Carlson, já citado anteriormente, é uma das técnicas confiáveis para predição do transporte de neutrons ou fotons através da matéria numa grande variedade de cálculos em engenharia nuclear. O programa DOT utiliza esta técnica para resolver a equação de transporte de Boltzmann, bidimensional com espalhamento anisotrópico geral para as geometrias (x - y), (r - z) e (r - θ), usando a técnica de diferença de "diamond". Resolve problemas diretos (forward) ou "adjoint", homogêneos ou não homogêneos. Os problemas não homogêneos podem ter uma fonte fixa volumétrica distribuída ou uma fonte de contorno específica dependente do ângulo nos contornos direito ou superior; fissões podem ser incluídas para um sistema subcrítico. As condições de contorno vácuo, refletida, periódica, "white" ou "albedo", podem ser especificadas. Cálculos de "time absorption", pesquisas de concentração ou pesquisas de espessuras de zonas podem ser resolvidos. Cálculos com constantes de quadratura simétrica ou assimétrica também podem ser efetuados. Dependendo da versão, o código permite uma escolha entre as acelerações de convergência, super-relaxação sucessiva, iteração gaussiana, "space point scaling" ou Chebyshev, para se obter uma solução do fluxo nas iterações internas.

6.1 Descrição dos Conjuntos de Dados de Quadratura

Esta seção apresenta uma descrição dos dados de quadratura das ordenadas discretas necessários para os cálculos com o DOT-II. Informações adicionais sobre os fluxos angulares superficiais são incluídas por fazerem interface com outros códigos de computador.

6.1.1. Conjuntos de Quadratura Simétricos

Os fluxos angulares são obtidos pelo código DOT-II em pontos da malha em cada célula de malhas na geometria dos cálculos. Estes fluxos são fluxos de direções discretas com direções representativa de pontos sobre uma esfera unitária. Na obtenção de uma solução numérica da equação de transporte de Boltzmann, a integração da variável contínua, Ω , é representada por um conjunto de direções discretas (Ω_s) e um correspondente conjunto de pesos (P_s). Esta representação da quadratura mecânica é obtida usando um conjunto de cossenos direcionais (μ_m, η_m) para as direções discretas (Ω_s), e um conjunto de pesos de nível (w_m) para a soma dos pesos dos pontos que são do nível m .

Na resolução para os fluxos angulares numa geometria $r-z$, a descrição de uma célula de malhas bidimensional está indicada na figura 8. Devido à simetria no ângulo θ , as soluções pontuais são necessárias somente nos pontos A, B, C, D e P no volume finito da célula de malhas mostrado. Os pontos A, B, C e D são pontos médios de cada superfície da célula de malhas. Os fluxos angulares, obtidos em cada um destes pontos, são então usados para calcular os fluxos angular e escalar no ponto médio P da célula de malhas.

Em A, B, C, e D, o fluxo angular é calculado para um hemisfério da esfera unitária centrada em cada ponto. O hemisfério é dividido nos seus quatro octantes, conforme mostrado na figura 9. Estes octantes representam uma ordem de quadratura angular S_8 na geometria $r-z$. Os números nos círculos da figura 9, representam os

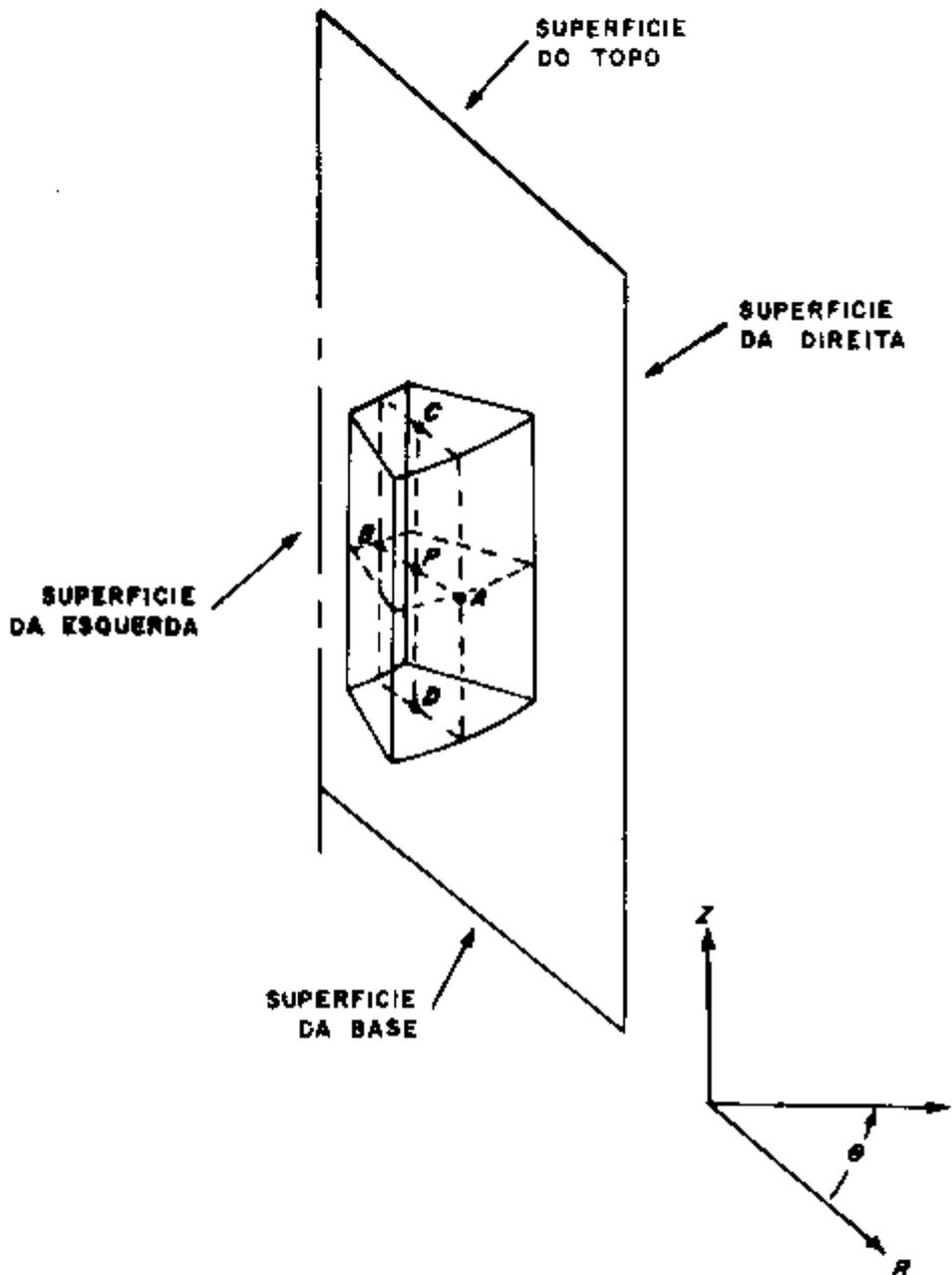


FIGURA 8. DESCRIÇÃO DA CELULA DE MALHAS 1-2.

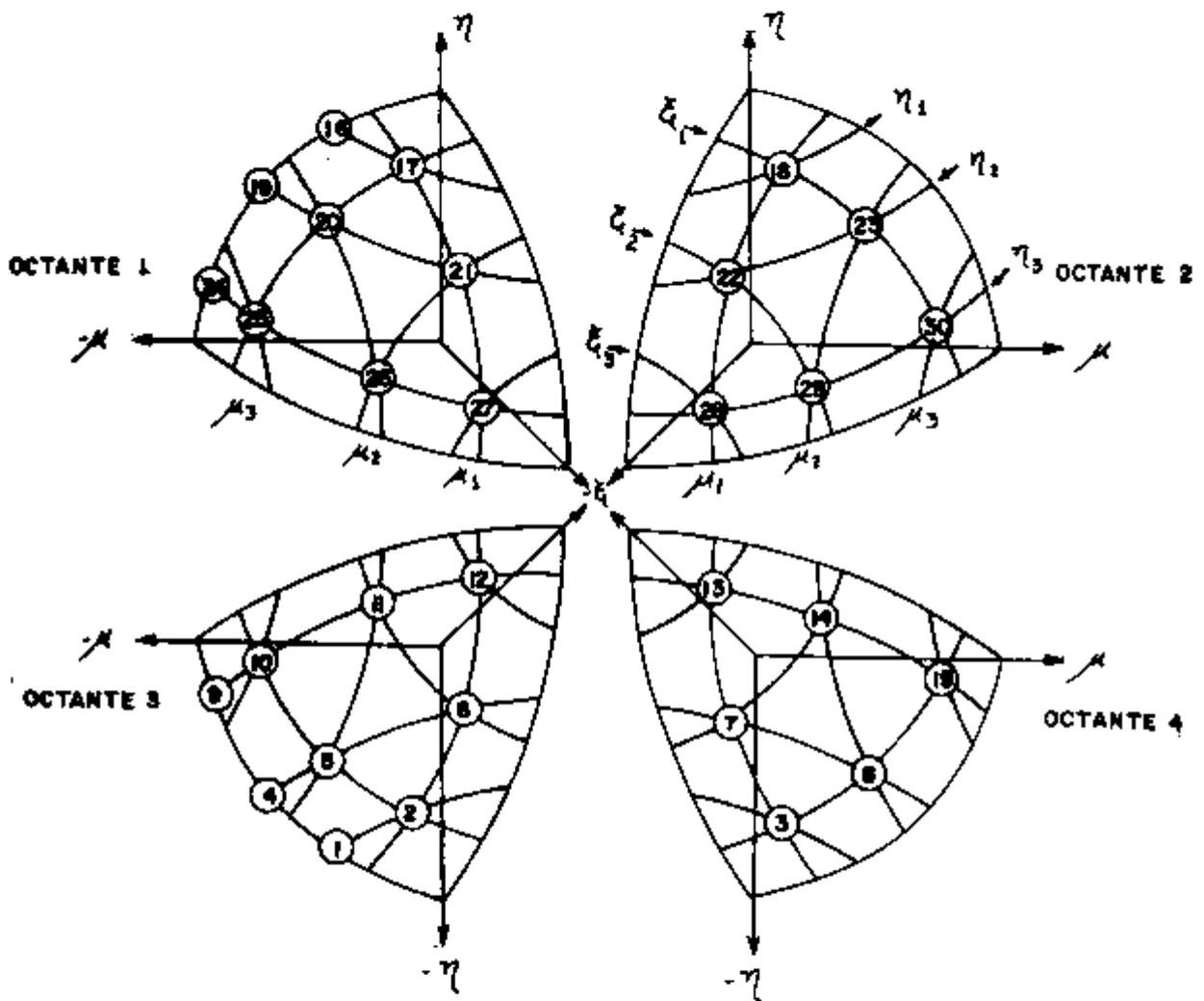


FIGURA 3. DIREÇÕES DISCRETAS DO DOT-II PARA GEOMETRIAS 1-2 E X-Y

pontos nos quais os fluxos angulares são obtidos com o DOT-II numa solução S_6 . Conforme mostrado na figura, os vetores unitários (μ, η, ξ) são representados numa quadratura angular como cossenos, $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3$. Com a mesma distribuição de μ_1, η_1, ξ_1 de cada vetor unitário, as direções discretas da superfície do hemisfério se localizam em latitudes, as quais mantem simetria rotacional com relação a todos os eixos no hemisfério. Nenhum "check" na simetria rotacional é feita pelo código DOT II; deve-se verificar independentemente a validade dos dados de quadratura.

As exigências para "rotation-reflection invariance", com respeito à rotação de 90° dos eixos e com respeito às reflexões com relação a um eixo e à origem, são conceitos importantes na seleção de um conjunto de dados de quadratura generalizados. É conveniente e desejável usar um conjunto padrão de dados de quadratura mecânica que de maneira nenhuma desvie os resultados desfavoravelmente com relação ao eixo geométrico. Por esta razão, um conjunto de conjuntos de dados de quadratura completamente simétricos que satisfazem certas condições de momentos pares, bem como a "rotational invariance" foram desenvolvidos e calculados (pelo código DDQ) na forma necessária para uso no código DOT.

O código requer que:

$$(1) \quad \sum_{m=1}^M \omega_m = 1,0$$

$$(2) \quad \sum_{m=1}^M \eta_m \mu_m \omega_m = 0,0$$

$$(3) \quad \mu_m \neq 0 \quad \text{e} \quad \eta_m \neq 0 \quad \text{para todo } m.$$

e a condição da "teoria de difusão"

$$(4) \quad \sum_{m=1}^M \omega_m \mu_m^2 = 1/3$$

Conforme mostrado na figura 9, uma solução S_6 com o DOT-II contém 30 direções discretas. A solução numérica requer u ma direção de "inicialização", a qual deve ser resolvida em cada nível n_1 no hemisfério. A cada uma destas direções de "inicialização", indicadas como 1, 4, 9, 16, 19 e 24 na figura 9, é designado um peso da quadratura igual a zero e não entram na solução do fluxo escalar. Portanto, somente 24 fluxos angulares com pesos diferentes de zero são obtidos no hemisfério. A integração do fluxo angular no DOT-II para obter o fluxo escalar é simplesmente a somatória dos produtos dos fluxos angulares e os apropriados pesos de quadratura. Para comparação, uma representação da quadratura angular de ordem S_6 na geometria $r - \theta$ é mostrada na figura 10. A reorientação dos dados de quadratura permite ao código seguir o fluxo lógico das partículas no plano da solução.

Os dados dos fluxos angulares obtidos do código DOT-II, para uso em outros códigos, são os dados superficiais da célula de malhas no raio externo, superfície superior, raio interno e superfície inferior da geometria dos cálculos. Estes dados são os fluxos angulares do ponto A, para todas as células de malhas de raio externo, do ponto C para todas as células de malhas superficiais superiores, do ponto B, para todas as células de malhas de raio interno e do ponto D, para todas as células de malhas superficiais inferiores (figura 8).

6.1.2 Conjuntos de Quadratura Assimétricos

Algumas vezes é desejável obter um alto grau de resolução do fluxo escalar ao longo de um eixo particular ou eixos sem pagar a penalidade dos excessivos requerimentos de armazenamento de dados no núcleo (do computador) e os altos custos de tempo de computador. Para obter esta resolução angular, certos conjuntos de quadratura tem sido desenvolvidos usando os códigos de computador DDQ e ADDQ. Estes conjuntos são especificamente trabalhados para obter a resolução angular na direção do eixo z e contêm vários graus de resolução de nível. Estes conjuntos devem satisfazer as equações de (1) a (4) inclusive, da seção anterior, observando, porém, que a condi

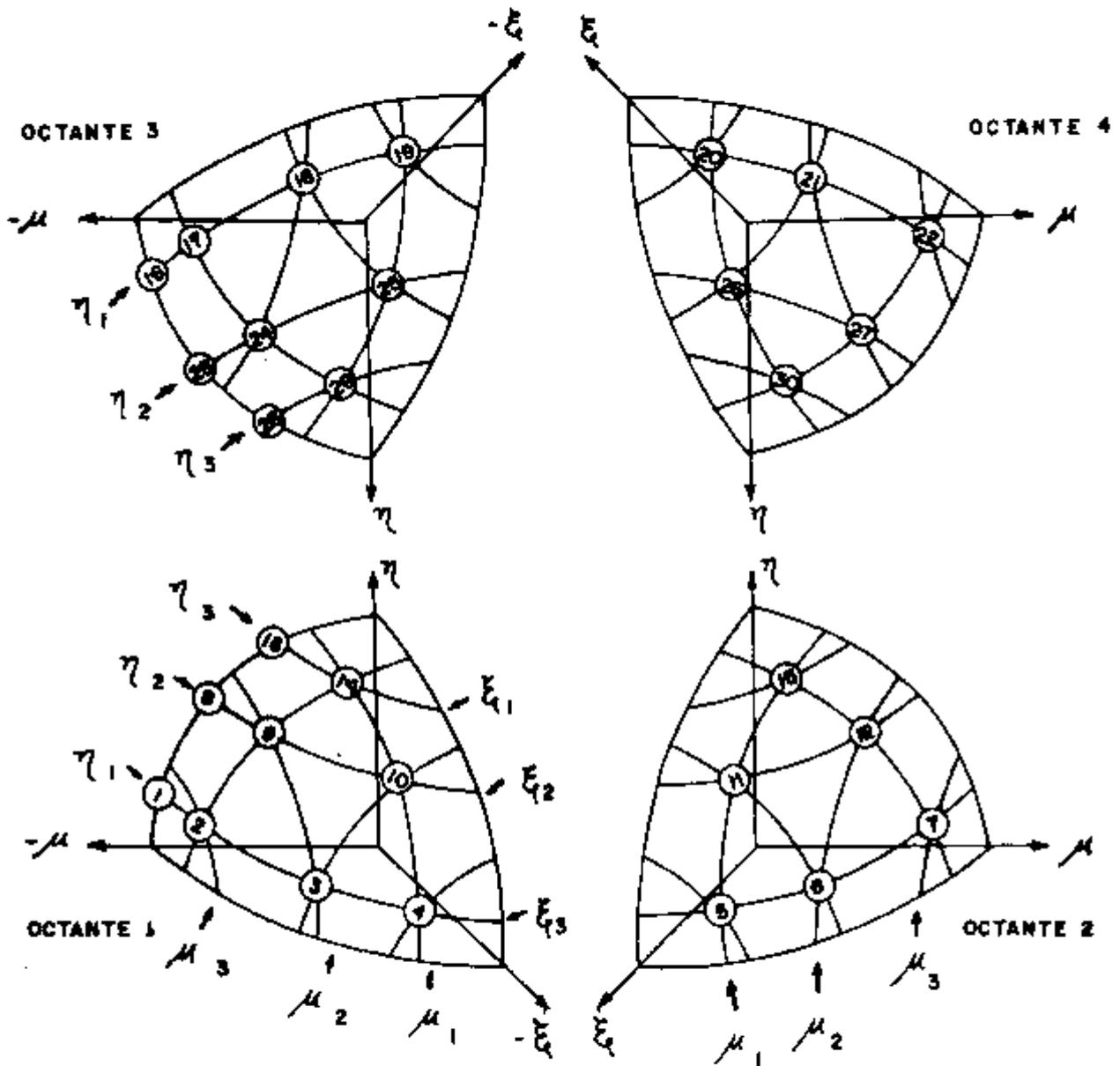


FIGURA 10. DIREÇÕES DISCRETAS DO DOT-II PARA GEOMETRIA 1-0

ção de contorno no topo ou na base refletida ou periódica não pode ser utilizada se os dados de quadratura forem assimétricos com relação a $\eta = 0,0$. Se uma condição de contorno periódica ou refletida for especificada, os dados de quadratura assimétricos devem ter "matching angles" (ETA mates) em cada hemisfério.

6.2 Exigências de Espaçamento das Malhas

O uso de adequados espaçamentos entre malhas num cálculo com o DOT-II e/ou ANISN é preceptivo para obter uma solução precisa do fluxo e distribuição de fissão resultante enquanto se conserva a disponibilidade de armazenamento de dados no núcleo do computador. Para eliminar (ou reduzir) fluxos angulares e/ou escalares negativos que resultam de um espaçamento inadequado entre malhas, algumas regras simples para definir os adequados espaçamentos entre malhas são apresentadas. Soluções do fluxo escalar e/ou angular podem ainda ocorrer, mesmo que estas orientações sejam seguidas, a ocorrência dos fluxos negativos e seus efeitos resultantes na solução real serão minimizados. As relações empíricas (critérios 1 e 2), requerem um razoável julgamento intuitivo, no momento de usá-las.

O espaçamento do intervalo de malha radial é aproximado pela seguinte relação:

$$\text{critério 1 :} \quad \Delta R \leq \frac{1,0 + \frac{\sigma_{g \rightarrow g}^{s0}}{t}}{4\pi \frac{K}{g}}$$

onde σ_g^t é a maior secção de choque de grupo total ou de transporte corrigida.

$\sigma_{g \rightarrow g}^{s0}$ é a correspondente secção de choque de espalhamento dentro do grupo para o grupo selecionado acima.

Este critério afastou-se um pouco do original por causa da rotina de ajuste de fluxos negativos geralmente utilizada nos cálculos do ANISN e do DOT-II.

A dimensão do intervalo da malha axial é aproximada pela seguinte relação:

$$\text{critério 2 : } \Delta Z \leq 2,0/\sigma_g^t$$

onde σ_g^t é a maior secção de choque de grupo total ou de transporte corrigida na região para qualquer grupo.

Em problemas onde as limitações de armazenagem na memória do núcleo impedem adesão às duas instruções acima, uma escolha intuitiva da malha deve ser feita para evitar resultados questionáveis. O seguinte procedimento deve ser seguido:

critério 3 : critérios 1 e 2 devem ser aplicados próximos dos contornos das regiões ou onde ocorrer alto gradiente do fluxo.

critério 4 : a dimensão da malha não deve variar mais do que um fator de 2 entre intervalos de malhas adjacentes.

critério 5 : os intervalos próximos à periferia de um núcleo refletido nos problemas em geometrias $r - z$ e $r - \theta$ devem seguir os critérios 1 e 2.

O restante da malha radial no núcleo, refletor, etc., pode ser determinado pelo critério 4.

Justificativa para uso dos critérios 3, 4 e 5 pode ser baseado de antemão no conhecimento de que a maioria das partículas em qualquer ponto de uma região é produzida por fontes ou é proveniente de grupos de energia mais alta ao invés do transporte direto dos pontos mais próximos.

Na periferia de um reator refletido, esta condição não existe por causa do retorno dos neutrons térmicos do refletor; conseqüentemente, o critério 1 deve ser aplicado na periferia do núcleo se os fluxos negativos são para ser evitados. Embora fluxos negativos possam ocorrer usando os critérios 3, 4 e 5, a localização destes fluxos negativos e o nível relativo do fluxo em volta do fluxo negativo deve agora ter um efeito desprezível na solução geral do problema.

Uma aproximação da dimensão do intervalo da malha em grandes regiões de vazio não centrais (tal como o vazio entre um reator e uma blindagem externa) pode ser representada por um método sugerido por Putnam³³. Vazios não centrais devem ser manuseados pela escolha dos intervalos de malha na região de vazio como se uma seção de choque total de $\sigma_k^t = 1/\bar{r}$ existisse na região (onde \bar{r} é um raio médio). Onde existir uma grande extensão de vazios não centrais, arranja-se os pontos de tal forma a definir várias regiões de um vazio contíguas com diferentes dimensões de intervalos de malha para permitir menos intervalos de malha nas regiões externas onde \bar{r} é maior.

Vários cálculos foram efetuados pelo ANISN e pelo DGT-II, utilizando as recomendações acima e o crédito nestes critérios na determinação do espaçamento do intervalo entre malhas tem-se verificado na prática.

5.3 Convergência

A solução numérica das equações de diferença em coordenadas discretas de multigrupo é baseada em dois níveis de esquema iterativo. Os dois tipos de iterações realizadas são as iterações internas e externas. As iterações internas são iterações de grupo usadas para solucionar os fluxos angulares em todas as células das malhas para um particular grupo. Uma iteração externa é a usada para solucionar o conjunto completo de equações de grupos. Da comparação dos conjuntos de iterações externas sucessivas, o autovalor e convergência podem ser avaliados.

6.3.1 Iteração Interna

O cálculo no código DDT-II procede-se a partir de estimativas de entrada dos fluxos de grupos. A fonte de fissão, fonte fixa e espalhamento dentro do grupo (isotrópico e anisotrópico), são assumidos fixos dentro de uma solução de grupo. O procedimento usado no DDT-II para resolver os fluxos de grupo é baseado num modelo fixo na solução dos fluxos escalar e angular. O cálculo de grupo (uma iteração interna) começa no contorno superior mais externo da célula de malhas (IM, JM). Os fluxos angulares da linha do topo ($j = JM$) são obtidos pela aplicação das condições de contorno da direita e do topo e obtêm-se as soluções discretas para dentro ($\mu_m < 0,0$) e para baixo ($\eta_m < 0,0$) numa passada da direita para a esquerda através das células de malhas de j -ésima linha.

A condição de contorno da esquerda é aplicada usando os fluxos angulares dados para a célula de malhas mais interna ($i = 1$). Então todas as direções discretas para fora ($\mu_m > 0,0$) e para baixo ($\eta_m < 0,0$) são calculadas numa passada da esquerda para direita através das mesmas células. O cálculo então procede-se para a próxima linha ($j = JM - 1$) e os fluxos angulares são calculados de uma maneira similar usando os dados dos fluxos angulares da linha de cima ($j = JM$). Este procedimento é seguido para linha $j = 1$, onde a condição de contorno da base é aplicado para calcular os fluxos angulares para cima em $j = 1$. O fluxo angular para cima na linha $j = 1$ é então usado para calcular os fluxos angulares de direções discretas para cima de uma maneira similar à solução do fluxo angular para baixo. O cálculo se procede da linha $j = 1$ até a linha $j = JM$, sempre usando os dados dos fluxos da linha $j - 1$. Este procedimento completa uma iteração interna.

A convergência da iteração interna de grupo é testada comparando o erro em uma ou mais das seguintes quantidades nas iterações internas sucessivas: 1) fluxos ponderados no volume, 2) fluxos das células de malhas ponto a ponto e/ou 3) fluxos de contorno num grupo. As iterações internas são necessárias para resolver o espalhamento dentro do grupo por causa dos neutrons poderem se espalhar de um ângulo para qualquer outro dentro do grupo e por causa do

fluxo em todos os ângulos de todas as células de malhas ser desconhecido no começo do "loop" da iteração interna. As iterações internas são continuadas até que o fluxo escalar convirja de acordo com um dos seguintes critérios:

1. Se a convergência do fluxo ponto a ponto não for desejada, então um teste de iteração integral é usado com EPS(epsilon) como critério. Convergência para o grupo g é obtida se:

$$\left[\sum_i \sum_j \left| \frac{N_{i,j,g}^n - N_{i,j,g}^{n-1}}{N_{i,j,g}^n} \times VD_{i,j} \right| / \sum_i \sum_j VD_{i,j} \right] \leq \text{EPS}$$

onde VD é o elemento de volume da célula de malha e a somatória se estende a todo o sistema.

2. Se a convergência do fluxo escalar ponto a ponto for desejada, a convergência é obtida se:

$$\text{MAX} \left| \frac{N_{i,j,g}^n - N_{i,j,g}^{n-1}}{N_{i,j,g}^n} \right| \leq \text{GDE} \quad \text{para cada célula de malha } i,j \text{ de interesse.}$$

onde o desvio máximo do fluxo é investigado em todas as células de malhas i,j do sistema (sendo GDE dado de entrada).

Opções de Convergência das Iterações Internas

O código DOT-II incorpora uma escolha de quatro técnicas através das quais a solução do fluxo escalar pode ser convergida nas iterações internas. As escolhas são:

- a. Iteração Gaussiana (ou iteração normal),

- b. Superrelaxação Sucessiva,
- c. "Space Point Scaling" e
- d. Aceleração de Chebyshev.

A iteração gaussiana é o método mais simples para resolver problemas iterativos. Esta técnica também requer o maior número de iterações que satisfaçam um dado critério de convergência. A quantidade de armazenamento de dados no núcleo, requerida para esta técnica, é menor do que a requerida por qualquer outra.

Superrelaxação sucessiva é uma técnica de aceleração que é aplicada depois de toda quarta iteração gaussiana. Fatores de aceleração por célula de malhas são aplicados aos fluxos, escalar angular, angular superficial e momentos mais altos. Estes fatores de aceleração são dinamicamente calculados dos enésimos primeiro, segundo e terceiro fluxos escalares. A técnica requer $IM \times JM$ locações de dados adicionais. Para uma grande classe de problemas, esta técnica sempre converge com menos iterações internas do que a iteração gaussiana, excetuando os problemas de penetração onde o fluxo decresce várias ordens de magnitude.

"Space Point Scaling" é uma técnica¹⁸ de aceleração que é aplicada depois de um predeterminado número de iterações gaussianas tiver sido completado. A técnica, através da qual o ciclo de escala é determinado, é baseada na razão de dominância máxima para o grupo de energia. A razão de dominância é aproximada por:

$$\lambda = \frac{\sigma_{EE}}{\sigma_t}$$

e é sempre menor do que 1,0.

O código calcula um fator de aceleração dependente do espaço por intervalo de malha depois do apropriado número de iterações gaussianas ter sido efetuado, e aplica os fatores de aceleração aos fluxos escalar, angular, superficial e aos momentos mais altos. Esta técnica requer a maior locação de dados adicionais de

todas as técnicas, e quase sempre converge com menos iterações internas do que a técnica gaussiana e é muito mais rápida para problemas de baixa razão de dominância (isto é, transporte de fôtons). A técnica é particularmente útil em problemas de penetração.

A aceleração de Chebyshev é uma técnica de aceleração que é aplicada a toda iteração depois da terceira iteração gaussiana. Um fator de aceleração simples é aplicado aos fluxos escalar, angular, superficial e aos momentos mais altos, baseado no método de iteração polinomial de Chebyshev. A técnica requer $IM \times JM$ locações de dados adicionais, e deve somente ser baseada em problemas que contem baixas razões de dominância e contornos de vácuo; a técnica falha para altas razões de dominância.

Em suma, na escolha da técnica de aceleração adequada para resolver um problema, deve-se levar em consideração o seguinte:

- em geral, as técnicas de aceleração de Chebyshev não devem ser usadas;
- em problemas onde o armazenamento de dados não é um fator restritivo, "Space Point Scaling" deve ser usado;
- para problemas de penetração ou de fontes fixas distribuídas, "Space Point Scaling" deve ser usado;
- quando o armazenamento de dados for limitado, superrelaxação sucessiva deve ser usado;
- iteração gaussiana pode ser usada em problemas de extrema limitação em armazenamento de dados.

5.3.2 Iteração Externa

O procedimento é similar ao descrito na seção 5.3.3 (para o ANISN). A taxa de produção de neutrons de fissão por célula de malhas é calculada depois de uma iteração externa completa, da se

guinta forma:

$$FO_{i,j} = \sum_g \sum_m \left\{ v \sigma_f^{m,g} \times N_{i,j,g} \times VO_{i,j} \right\}$$

onde:

$v \sigma_f$ é a secção de choque de produção de neutrons,

N é o fluxo escalar e

VO é o volume da célula de malhas.

Ao mesmo tempo, a fonte de "upscatter" é calculada como:

$$UPI = \sum_g \sum_m \sum_j \sum_i \left\{ \sigma_{g' \rightarrow g}^{g,m} \times N_{i,j,g} \times VO_{i,j} \right\}$$

onde:

$\sigma_{g' \rightarrow g}^{g,m}$ é a secção de choque "upscatter" total.

A taxa da fonte de fissão é então calculada como:

$$S_n = \sum_g \sum_m \sum_j \sum_i \left\{ v \sigma_f^{m,g} \times N_{i,j,g} \times k_{f,g} \times VO_{i,j} \right\}$$

onde: $k_{f,g}$ é o espectro de fissão. A seguir λ , ou o fator de multiplicação é obtido tomando a razão da nova taxa de fissão e da iteração precedente. E a iteração externa é continuada até que

$$|1 - \lambda^n| < EPS$$

$$|1 - \frac{UPI^n}{UPI^{n-1}}| < GNS$$

sejam satisfeitos.

Se a convergência não for obtida, o espectro de fissão e a taxa de produção de neutrons de fissão são ponderados por $1/\lambda$ de modo que λ se aproxima da unidade à medida em que as iterações se procedem. O cálculo do autovalor se dá do mesmo jeito que em 5.33.

Nos cálculos de fonte fixa distribuída sem fissões, (como por exemplo no transporte de ftons), os fluxos escalar e angular são obtidos com uma simples iteração externa, desde que as partículas não sejam transportadas de um grupo de mais baixa energia para um de mais alta por fissão ou "upscatter".

6.4 Cálculos de Autovalor

Num cálculo homogêneo, o autovalor é o fator de multiplicação efetivo estático, ou a razão das fontes para as perdas na equação de transporte de Boltzmann independente do tempo.

Por causa da fonte de fissão ser determinada pelo fluxo calculado na iteração externa anterior, mais do que uma iteração externa deve ser efetuada para convergir a fonte de fissão. Na prática, pode ser requerido aproximadamente de 5 a 20 iterações para atingir convergência da iteração externa (para $\epsilon_{PS} = 10^{-3}$) para problemas cuja matriz de secção de choque não contem secções de choque de "upscatter". Normalmente são requeridas de 2 a 4 iterações externas a mais para convergir o mesmo problema se a matriz contiver secções de choque de "upscatter". O número máximo de iterações internas por grupo requerido para se atingir convergência do fluxo ponto a ponto pode variar de 10 a 100, dependendo do sistema sob análise. É importante obter convergência do fluxo nas iterações internas usando um critério de convergência do fluxo ponto a ponto para que, depois que o escalonamento tenha sido feito nas iterações externas, o número de iterações externas requerido para convergência seja o mínimo. Em problemas com "upscatter", devido ao fato do processo de "upscatter" assumir que o cálculo do fluxo nas iterações internas tem convergido e por causa do código DOT-II ter características que restringem o número de iterações internas, é necessário que a convergência do fluxo ponto a

ponto seja atingida e que as restrições do número de iterações internas sejam usadas com cuidado.

Uma boa estimativa do fluxo é uma exigência essencial para uma solução do autovalor num mínimo tempo de computador.

A melhor estimativa do fluxo é de um cálculo similar do DOT-II, onde o número de malhas e grupos de energia é o mesmo. Mesmo que ocorram pequenas perturbações na composição do material ou no espaçamento da malha, estes dados constituem uma estimativa muito boa para o fluxo. Outra alternativa para se obter uma estimativa adequada do fluxo é considerar dois cálculos unidimensionais com o ANISN. Por exemplo, se um problema de geometria $r - z$ é para ser resolvido com o DOT-II, resolve-se dois problemas com o ANISN, um de geometria cilíndrica (ou radial) e outro de geometria "slab" (ou axial). Destes cálculos pode-se elaborar uma estimativa apropriada para o DOT-II, economizando de 2 a 6 iterações externas com relação a uma estimativa uniforme do fluxo. Se nenhuma maneira prática ou concebível existe para a obtenção de estimativa do fluxo para um dado cálculo do DOT-II, então um fluxo uniforme de 1 neutron/m².seg. deve ser usado nos intervalos de malhas que contem materiais físséis e um fluxo igual a zero nos demais lugares. Nos cálculos de k , o código DOT-II normaliza qualquer estimativa do fluxo de entrada, tal que somente a forma do fluxo ou o gradiente é importante.

6.5 Cálculos de Fontes Fixas

O código DOT-II pode resolver a equação de transporte de Boltzmann independente do tempo para problemas não homogêneos com fontes volumétricas fixas e/ou com fontes de contorno no topo e/ou contorno direto. Os cálculos de fonte fixa de neutrons ou de fotons distribuída são os dois tipos de cálculos mais frequentes. Se as fissões forem incluídas no cálculo de fonte volumétrica distribuída e/ou fontes de contorno, o fator de multiplicação para o sistema deve ser menor do que a unidade para convergência (um problema de fonte torna-se sem sentido para $k > 1,0$). e, também, na medida em que k se apro

xima de 1,0, a convergência torna-se progressivamente difícil. É importante conseguir convergência do fluxo nas iterações internas usando um critério de convergência ponto a ponto por causa das fontes de espalhamento para grupos de mais baixa energia dependerem das soluções dos fluxos nos grupos de mais alta energia. O código DOT-II resolve para os fluxos dois grupos de mais alta para os de mais baixa energia, e qualquer erro na solução do fluxo num grupo de mais alta energia tende a propagar erros na solução para os grupos de menor energia. Por esta razão, o número máximo de iterações internas requerido por grupo para atingir a convergência do fluxo ponto a ponto pode variar de 10 a 100 dependendo do sistema sob análise.

E.6 Cálculos de Pesquisa

O código efetua pesquisas das seguintes quantidades:

- 1) "Time absorption" (Rossi α),
- 2) Concentração de material ou
- 3) Espessura de Zona.

Em cada uma destas pesquisas o procedimento é da seguinte forma:

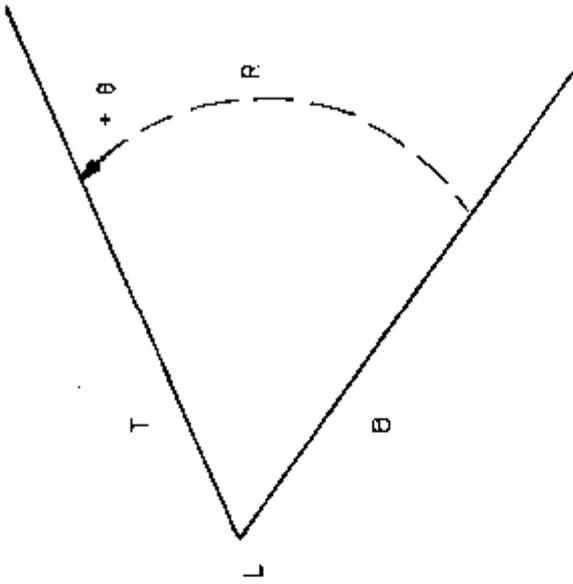
- a. Usando EV, o autovalor inicial, as iterações externas são efetuadas até que a diferença absoluta entre dois sucessivos LAMBDA's seja menor do que $3 \times \text{EPSA}$. Quando este teste for satisfeito, um novo autovalor é determinado por $EV \pm EVM$, onde o sinal positivo é retirado se o sistema for supercrítico (EVM é o modificador do autovalor). (EPSA é dado de entrada).
- b. Usando $EV \pm EVM$, as iterações são efetuadas até que sucessivos LAMBDA's difiram de pelo menos EPSA. Quando isto for satisfeito, uma extrapolação linear é efetuada para determinar um EV tal que $LAMBDA = 1,0$.

- c. Usando o novo EV (acima), iterações são efetuadas até que sucessivos LAMBDA's difiram de pelo menos EPSA. Quando esta exigência for satisfeita, uma extrapolação quadrática é efetuada para determinar um autovalor para $LAMBDA = 1,0$. Este passo é repetido até que $|1,0 - LAMBDA| < LAL$ (dado de entrada). Quando esta exigência for satisfeita, uma extrapolação linear é efetuada em cada iteração até que a diferença entre dois LAMBDA's sucessivos esteja dentro de EPS.

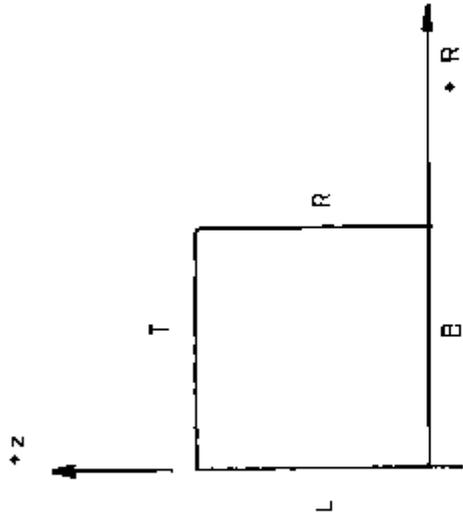
Numa pesquisa de "time absorption", o autovalor determinado é α na quantidade α/v , o valor da absorção $1/v$ tem de satisfazer $LAMBDA = 1,0$. Numa pesquisa de concentração, o autovalor é determinado pelo seu uso na tabela "mixing". A concentração final pode ser determinada inserindo o autovalor numa posição especificada da tabela "mixing" e calcular as novas seções de choque e, consequentemente, a nova concentração. Numa pesquisa de espessura de zona, as dimensões de entrada dos intervalos radiais e axiais são multiplicados pelos correspondentes modificadores axiais e radiais e o autovalor. A correspondência é dada pelos números das zonas de pesquisa radiais e axiais, as quais são especificadas por intervalo.

6.7 Condições de Contorno

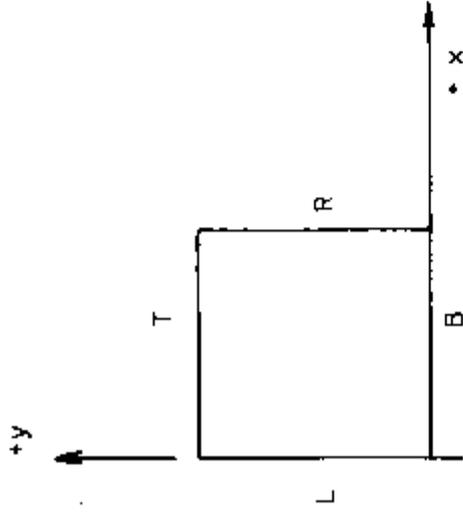
O código DOT-II tem provisões para especificar as condições de contorno em cada uma das quatro superfícies externas de um problema. Estes quatro contornos são titulados "left", "right", "top" e "bottom", conforme indicado na figura 11.



geometria r - θ



geometria r - z



geometria x - y

Figura *1

As seguintes condições de contorno são aplicadas: 1) vácuo, 2) reflexão, 3) periódica, 4) "white", 5) "albedo", conforme definidos em 5.3.2 e 6) fonte (onde o fluxo angular $\phi(r, z, E, \Omega)$, deixando o contorno especificado não é retornado).

O código permite as seguintes escolhas de condições de contorno:

<u>Esquerda</u>	<u>Direita</u>	<u>Topo</u>	<u>Base</u>
Vácuo	Vácuo	Vácuo	Vácuo
Reflexão	Reflexão	Reflexão	Reflexão
Periódica	Periódica	Periódica	Periódica
	"White"	"White"	"White"
	"Albedo"	"Albedo"	"Albedo"
	Fonte	Fonte	

É evidente que:

- a. Uma condição de contorno vácuo no contorno esquerdo é impossível para as geometrias $r - z$ e $r - \theta$.
- b. Uma condição de contorno periódica para um contorno
- c. Uma condição de contorno periódica no contorno esquerdo e direito é impossível para as geometrias $r - z$ e $r - \theta$.
- d. Uma condição de contorno refletida à direita é impossível para as geometrias $r - z$ e $r - \theta$.
- e. Uma especificação de entrada da condição de contorno "albedo" maior do que 1,0 gera partículas.

A opção "albedo" permite especificar uma condição de contorno "albedo" dependente do espaço e da energia nos contornos do to

po, da direita e da base de um problema. Deve-se verificar se as condições de contorno refletida e a "albedo" estão sendo satisfeitas à medida em que se procede a convergência. Esta verificação é necessária por causa dos fluxos angulares que retornam nos contornos da direita e do topo serem calculados nas iterações internas precedentes, para o grupo em questão.

6.8 Problemas Padrões Resolvidos pelo DDT-II

O problema ID.5, é um problema de fonte fixa num meio absorvedor usando a teoria de transporte, dois grupos de energia; designados para testar os códigos de transporte de neutrons bidimensional.

O problema IC.3, é um problema de transporte do neutron, em um "bundle de barras do DWR (Boiling Water Reactor); consiste de uma montagem de elementos combustíveis 7×7 , com composição de diferentes enriquecimentos e com "pínos" de veneno e sem barras de controle. Um problema de ordenadas discretas bidimensional de dois grupos de energia. Tem como propósito testar os métodos de transporte bidimensional e de Monte Carlo em multigrupos, além de poder servir de avaliação da adequacidade da teoria de difusão, probabilidade de colisão e solução com malhas grosseiras. Investigação do fator de multiplicação efetivo, k_{ef} , com espalhamento isotrópico, foi definido para esta situação e resolvido usando o código DDT-III³⁴ e o código TWOTRANZ²³. Foi obtida excelente concordância entre estas duas soluções para a distribuição do fluxo angular e autovalor. No nosso caso foi utilizado o código DDT-II, com uma concordância muito boa entre os resultados.

6.8.1 Situação Fonte Padrão, ID.5

Identificação : 5

Data Submetida: abril de 1970

Por: E.M. Gelbard (EAPL)

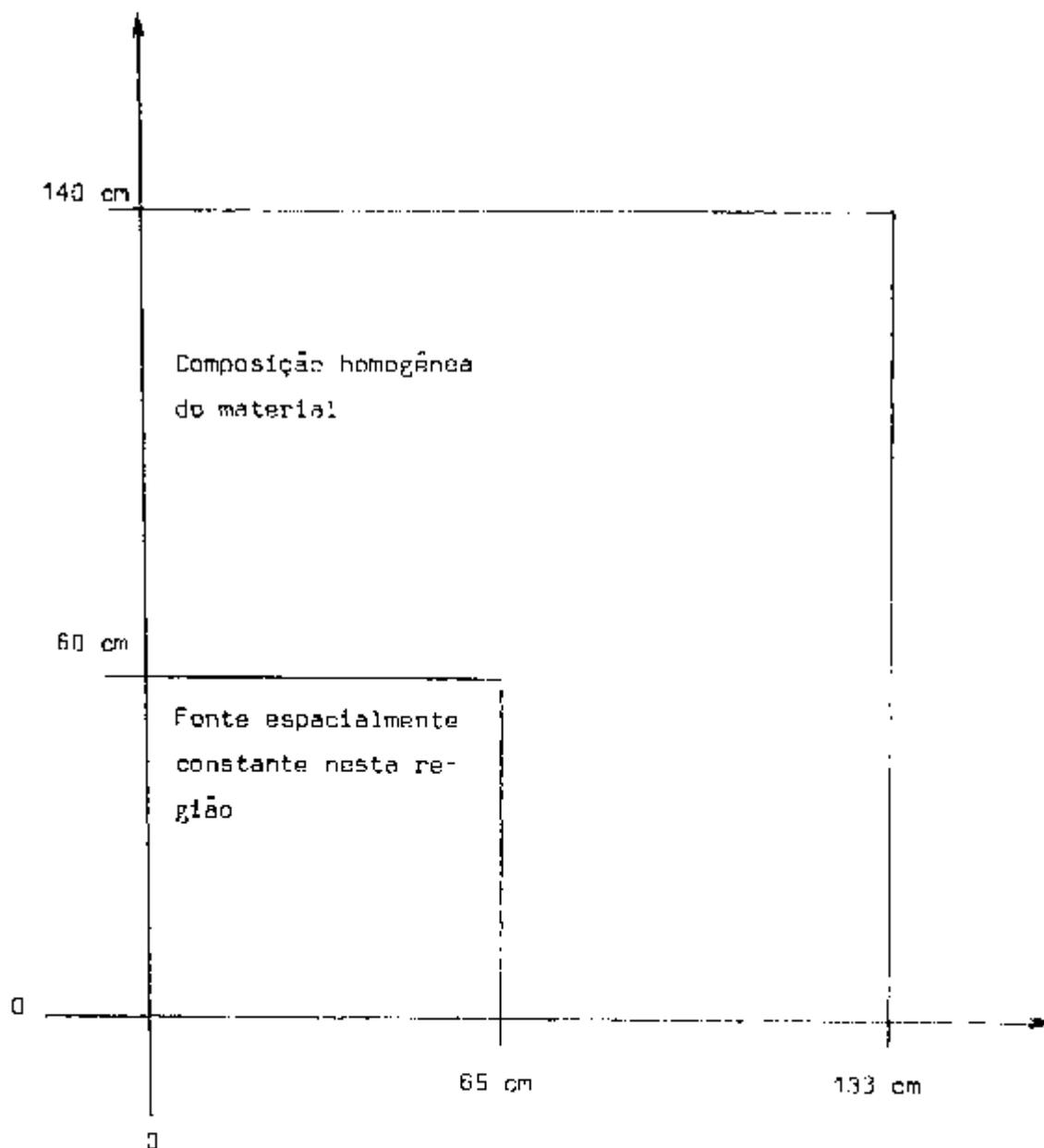
Data Adotada : julho de 1970

Por: R.Froehlich (EUA)

Título Descritivo: Fonte Bidimensional Isolada num Meio Absorvedor

Função Sugerida: Proporcionar Testes Rigorosos dos Programas de Transporte Bidimensional.

Configuração :



Dados:

Secções de choque (cm^{-1}) isotrópicas e densidade da fonte
(neutrons/ cm^3)

	Grupo 1	Grupo 2
σ_a	0,061723	0,096027
$v\sigma_f$	0,0	0,0
σ_t	0,092104	0,103877
$\sigma_{s0}^{g \rightarrow g}$	0,006947	0,004850
$\sigma_{s0}^{g^{-1} \rightarrow g}$	0,0	0,023434
Densidade da Fonte	0,0065460	0,017701

Resultados Primários Esperados:

1. Fluxo Escalar de cada grupo ao longo das linhas verticais e horizontais.
2. Fuga total à direita.
3. Número de iterações em cada grupo.
4. Tempo de máquina total.

Resultados Adicionais Possíveis:

1. Dependência dos resultados e tempo de máquina de:
 - a. malha espacial,
 - b. aproximação angular,
 - c. esquemas de diferença.
2. Fluxo escalar ao longo de linhas seleccionadas.

6.8.3 Solução do Problema Padrão 5-A1-2

Identificação : 5-A1-2

Data Submetida : Outubro de 1971 Por: K.D. Lathrop (LASL)

Data Aceita : Novembro de 1971 Por: D.A. Menzley (ANL)

Título Descritivo : Transporte Bidimensional na Geometria (x,y)

Modelo Matemático

Ordenadas Discretas em duas modificações:

1. Esquema de diferença de "diamond" com o controle do fluxo negativo colocado a zero.
2. Esquema de diferença "Variable-weighted positive".

Características pertinentes da técnica usada.

Todos os cálculos foram executados com o programa TWOTRAN.

Computador: CDC-6500

Data de Resolução: janeiro de 1971 no: LASL

Detalhes dos Cálculos:

Três diferentes malhas espaciais foram usadas. Em cada caso, a intervalos igualmente espaçados entre 0,0 e 65,0 cm e b intervalos igualmente espaçados entre 65,0 e 133,0 cm em x , e c intervalos igualmente espaçados entre 0,0 e 60,0 cm e d intervalos igualmente espaçados entre 60,0 e 140,0 cm em y foram usadas.

	a	b	c	d	n° total de células
A	13	14	12	16	756
B	26	28	24	32	3024
C	39	42	36	48	6804

Dois diferentes ordens de S_n foram usadas, S_8 e S_{12} .

Resultados publicados³

Fuga Total à Direita

Problema	Grupo 1	Grupo 2
AS8ND	0,0005	0,0008
BS8ND	0,000564	0,000901
CS8ND	0,000574	0,000921
AS12ND	0,000496	0,000776
BS12ND	0,000547	0,000872
CS12ND	0,000557	0,000881

Onde o símbolo AS8ND significa malhas de acordo com A, ordem S_8 , cálculo normal de "diamond".

Código utilizado : TWOTRAN

Computador : CDC-6600

Resultados Obtidos com a utilização do código DOT-II, no computador IBM - 370/155.

Fuga Total à Direita

Problema	Grupo 1	Grupo 2
AS8ND	0,000499	0,000775
BS8ND	0,000559	0,000889
CS8ND	0,000570	0,000912
AS12ND	0,000499	0,000775
BS12ND	0,000559	0,000889
CS12ND	0,000571	0,000911

Tempo de Execução em Minutos

Problema	Publicados	Obtidos
	CDC-6600	IBM-370/155
AS8ND	1,64	15,95
BS8ND	6,41	59,50
CS8ND	14,05	135,40
AS12ND	3,13	29,38
BS12ND	13,02	117,34
CS12ND	28,36	263,24

Diferença entre os Resultados (obtidos - publicados)

Problema	Grupo 1	Grupo 2
AS8ND	-0,000001	-0,000025
BS8ND	-0,000005	-0,000012
CS8ND	-0,000004	-0,000009
AS12ND	0,000003	0,000001
BS12ND	0,000012	0,000017
CS12ND	0,000014	0,000002

Este problema de fonte fixa, meio absorvedor, foi designado para proporcionar rigorosos testes aos códigos de transporte de neutrons (em dois grupos de energia) bidimensional. E, como tal, verifica-se pelos resultados obtidos a confiabilidade do código DOT-II, operado nas instalações do IPEN. Quanto às diferenças nos tempos de execução, ulteriores considerações serão feitas na seção de conclusão e sugestões.

6.A.4 Situação Fonte Padrão IC.13

Identificação : 13

Data Submetida : novembro de 1975 Por: B.A. Zolotar (EPRI)

Data Aceita : junho de 1977 Por: H.L. Dodds, Jr. (U. de Tenn)
W.A. Wittkopf (E & W)

Título Descritivo : Transporte de Neutron num "Bundle" de Barras
Combustíveis de um DWR em uma montagem 7 x 7.

Funções Sugeridas : Análise de montagem bidimensional, Testes de
Métodos para Poucos Grupos.

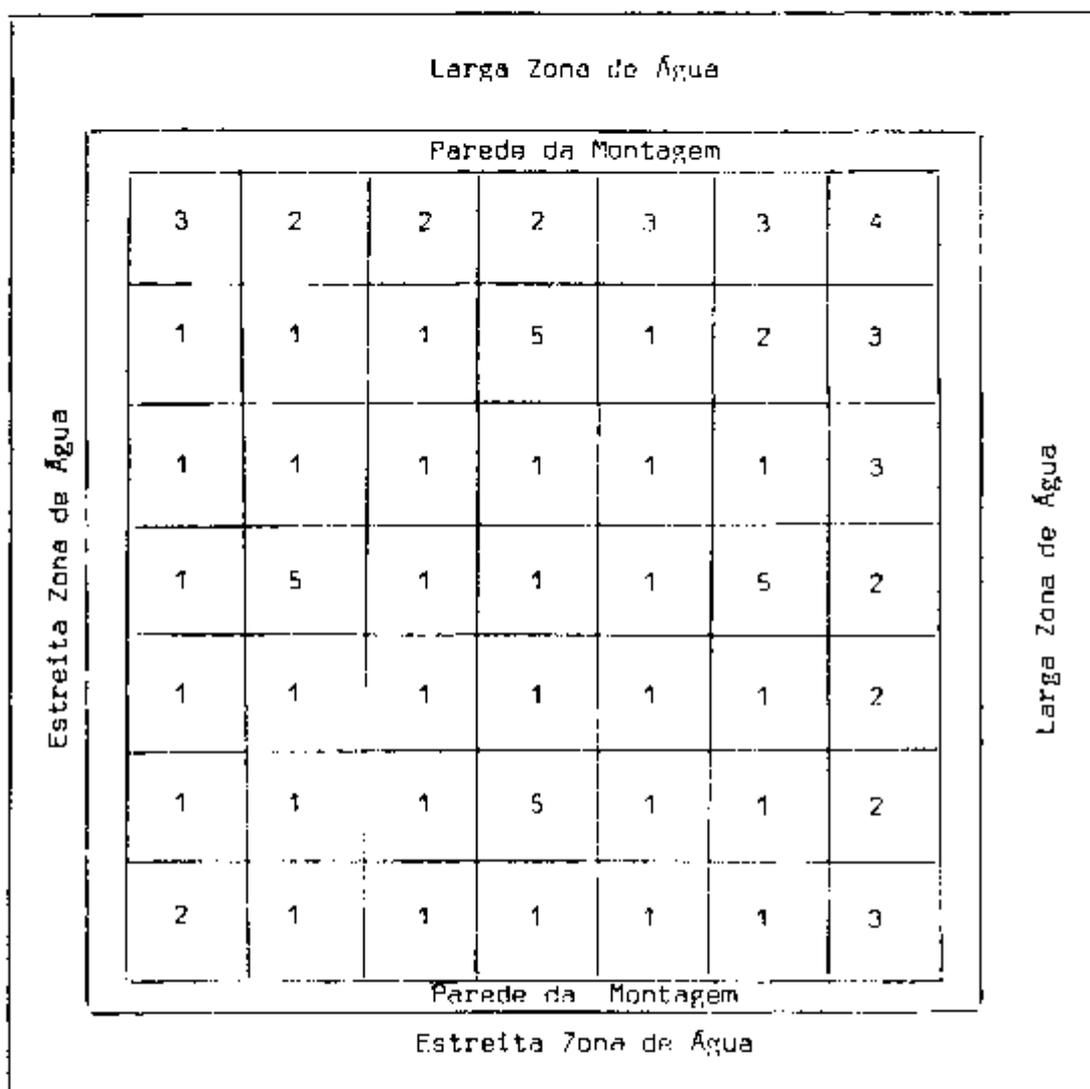


Figura 12 - Diagrama do "Dundee". Materiais de 1-4 representam o combustível, material 5 contém combustível com veneno e a parede da montagem é de aço inoxidável.

6.8.5 O Problema Padrão IO.13-A1

Identificação: : 13-A1

Data Submetida : novembro de 1975 Por: S.A.Zolotar (EPRI)

Data Aceita : junho de 1977 Por: H.L. Dodds, Jr. (U.do Tenn)
W.A.Wittkops (B & W)

Título Descritivo - Ordenadas Discretas Bidimensional (x - y). Dois Grupos.

Modelo de Um "Bundle" de Combustíveis de um BWR, conforme mostrado na figura 13.

Condições de Contorno refletidas nas superfícies externas.

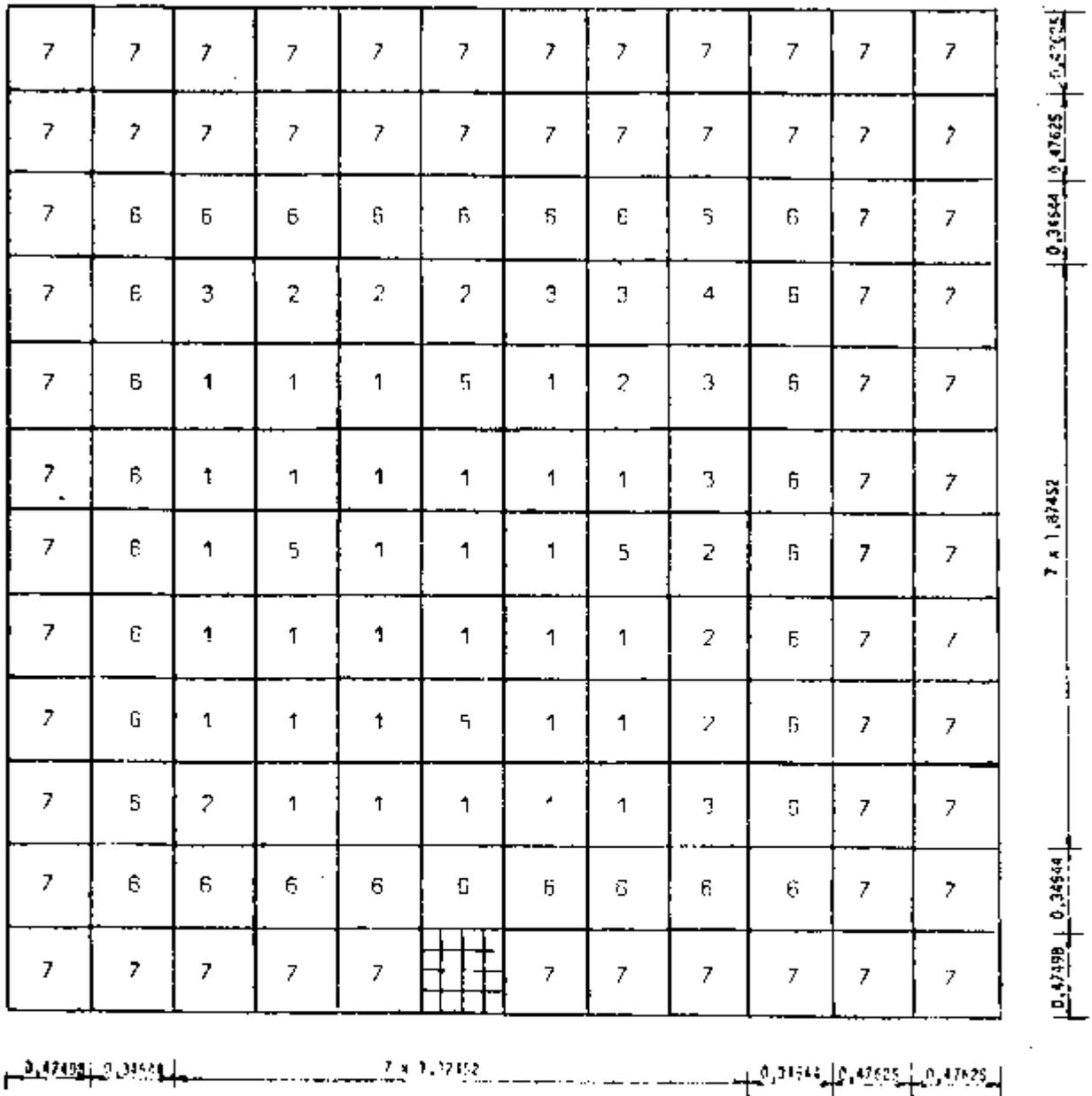
Constantes para os dois grupos de energia

Composição	Grupo	σ_a (cm ⁻¹)	$\nu\sigma_f$ (cm ⁻¹)	σ_t (cm ⁻¹)	σ_{1+1} (cm ⁻¹)	σ_{1+2} (cm ⁻¹)
1	1	8,983-3	5,925-3	2,531-1	2,3343-1	1,069-2
	2	5,892-2	9,817-2	5,732-1	5,1428-1	0,0
2	1	8,726-3	5,242-3	2,536-1	2,3392-1	1,095-2
	2	5,174-2	8,228-2	5,767-1	5,2496-1	0,0
3	1	8,587-3	4,820-3	2,535-1	2,3378-1	1,112-2
	2	4,717-2	7,200-2	5,797-1	5,3253-1	0,0
4	1	8,480-3	4,337-3	2,533-1	2,3369-1	1,113-2
	2	4,140-2	5,900-2	5,837-1	5,423-1	0,0
5	1	9,593-3	5,605-3	2,506-1	2,3085-1	1,016-2
	2	1,626-1	2,424-2	5,853-1	4,227-1	0,0
6	1	1,043-3	0,0	2,172-1	2,0707-1	9,095-3
	2	4,394-3	0,0	4,748-1	4,7041-1	0,0
7	1	1,983-4	0,0	2,476-1	2,1058-1	3,582-2
	2	7,796-3	0,0	1,123	1,1152	0,0

Nota: Material 6 representa o aço inoxidável.
Material 7 representa a água.

Resultados Principais Esperados: 1. distribuição do fluxo
2. k_{ef}

Soluções: Soluções pelo OOT-III (13-A1-1) e TWOTRAN-II (13-A1-2)



Nota: Todas as dimensões em centímetros

Figura 13 - Configuração do "Bundle" e Especificação dos Materiais

6.8.6 Solução do Problema Padrão

Solução 13-A1-1

Identificação : 13-A1-1

Data Submetida: junho de 1976

Por: B.A. Zolotar (EPRI)
F.J.Rahn (EPRI)

Data Aceita : junho de 1977

Por: H.L.Dodds, Jr. (U. de Tenn.)
W.A.Wittkopf (B&W)

Computador : IBM-360, modelo 195

Data da Resolução : maio de 1976 no EPRI

Código : DDT-III³⁴Solução 13-A1-2

Identificação : 13-A1-2

Data Submetida: julho de 1976

Por: A.N.Mallen (SRL)

Data Aceita : junho de 1977

Por: H.L.Dodds, Jr. (U. de Tenn.)
W.A.Wittkopf (B&W)

Título Descritivo: Solução da Ordenada Discreta

Computador : IBM-360, modelo 195

Código : TWO TRAN-II²³

Data Resolvida: junho de 1976 no SRL

Resultados:

Convergência de k_{ef} com relação aos intervalos de Malhas, S_8 fixo

Intervalo	DOT-III	TWOTRAN-II	DOT-II	Tempo de Execução	
				TWOTRAN-II	DOT-II
1	1,08441	1,08427	1,08443	21 seg.	-18 min.
2	1,08709	1,08712	1,08718	1 min.17 seg.	-25 min.
4	1,08714	1,08727	1,08719	4 min.35 seg.	140 min.22 seg.

← Padrão

Convergência de k_{ef} com relação às constantes de quadratura, intervalo 2x2 fixo

Quadratura	DOT-III	TWOTRAN-II	DOT-II	Tempo de Execução	
				TWOTRAN-II	DOT-II
2	1,09195	1,09214	1,09200	21 seg.	5 min.34,95seg.
3	1,08724	1,08709	1,08767	40 seg.	12 min.22 seg.
4	1,08709	1,08712	1,08718	1 min.17 seg.	-25 min.

0,1767 0,1765 0,1744	0,1757 0,1755 0,1738	0,1764 0,1762 0,1752	0,1793 0,1791 0,1783	0,1792 0,1791 0,1781	0,1781 0,1780 0,1769	0,1755 0,1755 0,1747	0,1771 0,1720 0,1715	0,1660 0,1659 0,1652	0,1629 0,1627 0,1614	0,1629 0,1626 0,1611	0,1625 0,1629 0,1603
0,1779 0,1777 0,1761	0,1774 0,1772 0,1758	0,1766 0,1766 0,1779	0,1810 0,1817 0,1811	0,1820 0,1819 0,1812	0,1808 0,1808 0,1801	0,1793 0,1793 0,1777	0,1747 0,1746 0,1742	0,1680 0,1679 0,1675	0,1642 0,1641 0,1631	0,1638 0,1637 0,1623	
0,1788 0,1786 0,1775	0,1797 0,1786 0,1797	0,1827 0,1825 0,1822	0,1863 0,1861 0,1860	0,1862 0,1862 0,1860	0,1854 0,1854 0,1848	0,1824 0,1824 0,1823	0,1788 0,1788 0,1789	0,1718 0,1716 0,1715	0,1663 0,1662 0,1656		
0,1840 0,1839 0,1834	0,1864 0,1862 0,1860	0,1924 0,1924 0,1926	0,1970 0,1971 0,1976	0,1964 0,1964 0,1969	0,1944 0,1948 0,1950	0,1922 0,1923 0,1929	0,1891 0,1892 0,1899	0,1805 0,1806 0,1811			
0,1920 0,1919 0,1914	0,1949 0,1948 0,1946	0,2028 0,2023 0,2029	0,2064 0,2066 0,2071	0,2048 0,2050 0,2055	0,1999 0,1999 0,2004	0,2015 0,2027 0,2021	0,1994 0,1988 0,1994				
0,1954 0,1953 0,1948	0,1980 0,1979 0,1976	0,2048 0,2048 0,2052	0,2080 0,2081 0,2086	0,2092 0,2083 0,2086	0,2071 0,2073 0,2076	0,2055 0,2057 0,2062					
0,1972 0,1970 0,1961	0,1995 0,1995 0,1989	0,2054 0,2055 0,2058	0,2060 0,2059 0,2062	0,2098 0,2097 0,2099	0,2098 0,2099 0,2099						
0,1976 0,1975 0,1968	0,2000 0,2000 0,1996	0,2066 0,2066 0,2069	0,2100 0,2100 0,2103	0,2103 0,2104 0,2107							
0,1989 0,1987 0,1961	0,1997 0,1995 0,1982	0,2067 0,2067 0,2070	0,2111 0,2112 0,2115								
0,1929 0,1926 0,1919	0,1951 0,1949 0,1945	0,2014 0,2015 0,2016									
0,1908 0,1903 0,1890	0,1916 0,1915 0,1904										
0,1910 0,1908 0,1891											

Solução Padrão

S_g - 4 x 4 Intervalos

DOT-III - publicado

DOT-II - obtido

TWOTRAN-II - publicado

k_{ef} = 1,08714 - publicado

k_{ef} = 1,08719 - obtido

k_{ef} = 1,08727 - publicado

Fluxos (neutrons cm^2 seg) para o Grupo 1

0,1115 0,1118 0,1119	0,1108 0,1108 0,1110	0,1064 0,1068 0,1066	0,0998 0,0998 0,0999	0,0957 0,0958 0,0960	0,0951 0,0955 0,0956	0,0931 0,0933 0,0935	0,1069 0,1072 0,1073	0,1183 0,1187 0,1188	0,1260 0,1265 0,1267	0,1283 0,1289 0,1292	0,1303 0,1309 0,1312
0,1081 0,1082 0,1086	0,1068 0,1067 0,1068	0,1015 0,1018 0,1016	0,0944 0,0945 0,0948	0,0903 0,0905 0,0907	0,0900 0,0901 0,0903	0,0939 0,0941 0,0943	0,1038 0,1021 0,1023	0,1137 0,1140 0,1142	0,1222 0,1227 0,1229	0,1256 0,1261 0,1264	
0,1088 0,1043 0,1045	0,1011 0,1012 0,1012	0,0950 0,0950 0,0950	0,0876 0,0876 0,0876	0,0834 0,0835 0,0836	0,0831 0,0832 0,0832	0,0871 0,0873 0,0875	0,0952 0,0954 0,0955	0,1076 0,1078 0,1079	0,1171 0,1175 0,1175		
0,0945 0,0945 0,0948	0,0902 0,0908 0,0908	0,0827 0,0827 0,0825	0,0748 0,0747 0,0747	0,0703 0,0704 0,0703	0,0690 0,0690 0,0690	0,0741 0,0742 0,0742	0,0828 0,0829 0,0828	0,0980 0,0981 0,0981			
0,0813 0,0813 0,0815	0,0773 0,0778 0,0774	0,0687 0,0687 0,0686	0,0607 0,0607 0,0606	0,0554 0,0554 0,0554	0,0487 0,0496 0,0488	0,0567 0,0588 0,0588	0,0687 0,0688 0,0687				
0,0733 0,0734 0,0736	0,0693 0,0693 0,0695	0,0606 0,0606 0,0605	0,0520 0,0519 0,0520	0,0490 0,0490 0,0491	0,0483 0,0483 0,0483	0,0518 0,0518 0,0518					
0,0688 0,0700 0,0701	0,0658 0,0659 0,0660	0,0585 0,0585 0,0584	0,0447 0,0440 0,0440	0,0459 0,0459 0,0459	0,0471 0,0470 0,0468						
0,0706 0,0707 0,0710	0,0667 0,0667 0,0668	0,0580 0,0580 0,0580	0,0495 0,0494 0,0494	0,0466 0,0465 0,0466							
0,0750 0,0750 0,0752	0,0710 0,0710 0,0711	0,0628 0,0628 0,0624	0,0546 0,0548 0,0545								
0,0834 0,0828 0,0829	0,0790 0,0789 0,0789	0,0708 0,0708 0,0706									
0,0884 0,0885 0,0887	0,0853 0,0853 0,0854										
0,0903 0,0901 0,0906											

Solução Padrão

S_8 - 4 x 4 Intervalos

DOT-III - publicado

$k_{ef} = 1,08714$ publicado

DOT-II - obtido

$k_{ef} = 1,08718$ obtido

TWOTRAN II - publicado

$k_{ef} = 1,08727$ publicado

Fluxos (neutrons/cm² seg) para o Grupo 2

Diferenças entre os fatores de multiplicação das soluções do problema padrão (publicado³):

$$\Delta k_{ef} = k_{ef}(\text{DOT-III}) - k_{ef}(\text{TWOTRAN-II})$$

Ordem de Quadratura S_8 : Convergência com relação às malhas

$$(1 \times 1) \quad \Delta k_{ef} = +0,00014$$

$$(2 \times 2) \quad \Delta k_{ef} = -0,00003$$

$$(4 \times 4) \quad \Delta k_{ef} = -0,00013$$

Malhas 2×2 : Convergência com relação à ordem de quadratura angular

$$S_2 : \Delta k_{ef} = -0,00019$$

$$S_4 : \Delta k_{ef} = +0,00016$$

$$S_8 : \Delta k_{ef} = -0,00003$$

Diferença entre os fatores de multiplicação conseguidos com o DOT-III (publicado) e com o DOT-II (obtido no IPEN)

$$\Delta k_{ef} = k_{ef}(\text{DOT-III}) - k_{ef}(\text{DOT-II})$$

Ordem de Quadratura S_9 : Convergência com relação às malhas

$$(1 \times 1) \quad \Delta k_{ef} = -0,00002$$

$$(2 \times 2) \quad \Delta k_{ef} = -0,00009$$

$$(4 \times 4) \quad \Delta k_{ef} = -0,00005$$

Malhas 2 x 2 : Convergência com relação à ordem de quadratura angular

$$S_2 : \Delta k_{ef} = 0,00005$$

$$S_4 : \Delta k_{ef} = -0,00043$$

$$S_8 : \Delta k_{ef} = -0,00009$$

Diferença entre os fatores de multiplicação conseguidos com o TWOTRAN-II (publicado) e com o DOT-II (optido no IPEN)

$$\frac{\Delta k_{ef}(\text{TWOTRAN-II}) - k_{ef}(\text{DOT-II})}{\text{---}}$$

Ordem de Quadratura S_8 : Convergência com relação às malhas

$$(1 \times 1) \quad \Delta k_{ef} = -0,00010$$

$$(2 \times 2) \quad \Delta k_{ef} = -0,00006$$

$$(4 \times 4) \quad \Delta k_{ef} = 0,00008$$

malhas 2 x 2 : Convergência com relação à ordem de quadratura angular

$$S_2 : \Delta k_{ef} = 0,00014$$

$$S_4 : \Delta k_{ef} = -0,00059$$

$$S_8 : \Delta k_{ef} = -0,00006$$

Comentário: Variações nas quadraturas angulares e malhas foram investigadas com o objetivo de mostrar a adequacidade e a confiabilidade das soluções obtidas pelo DOT-II e, conforme os dados apresentados acima, foi obtido excelente concordância com os resultados publicados.

7. CONCLUSÃO, DISCUSSÃO E SUGESTÕES

Com relação ao problema ID.1 (Lady Godiva), resolvido com a consideração de espalhamento isotrópico, concluímos que é necessário resolver este mesmo problema considerando dois, três ou mais termos a mais na expansão de Legendre da secção de choque diferencial de espalhamento, a fim de constatar as afirmações da referência (2).

Se esta constatação for verificada, o procedimento poderá então, realmente, servir de teste para os dados de uma particular biblioteca de secções de choque, para o cálculo de k de sistemas críticos experimentais.

Com referência ao problema ID.5 (fonte fixa num meio absorvedor), sugerimos sua solução, como parte integral de um trabalho futuro, com a consideração de espalhamento linearmente anisotrópico e na geometria $r - z$ com espalhamento isotrópico.

O problema ID.13, representa um estágio em muitas análises típicas de montagens do BWR e, portanto, serve para testar os métodos padrões de análises do BWR. Estas montagens são relativamente pequenas e apropriadas para a resolução com códigos de transporte. Sugerimos que se tente resolver este problema utilizando o código MORSE (método de Monte Carlo) recém implantado no CPD do IPEN.

Os tempos de execução dos problemas (do ANTSN) apresentaram-se de tal maneira que, para problemas menores, o tempo de processamento do computador IBM-370/155 do IPEN é bem menor do que os IBM-360/75 e IBM-7090 e, para problemas maiores, o computador do IPEN requer um tempo consideravelmente maior. Para os cálculos com o DDT-II a diferença entre os tempos é maior ainda. As referências (3 e 4) nada esclarecem sobre as estimativas prévias dos fluxos para o início dos cálculos. Em nosso caso não fizemos nenhuma avaliação prévia dos fluxos de entrada, no sentido de diminuir o número de iterações e, conseqüentemente, o tempo. Face à grande diferença entre os tempos de execução, acreditamos que a consideração acima se-

ja uma das razões, além dos diferentes tipos de compiladores dos e equipamentos utilizados.

Como sugestão final, para trabalhos futuros, fica a resolução dos problemas padrões de blindagem pelo fato de permitirem um domínio ainda maior dos códigos de transporte.

Em síntese, os objetivos do trabalho foram atingidos proporcionando a necessária experiência em códigos nucleares de transporte de neutrons e/ou raios gama e também uma visão geral de projetos nucleares e problemas correlados.

APENDICE I

O código do computador DNR calcula os cossenos direcionais e pesos usando um generalizado método dos momentos. Neste método todos os conjuntos direcionais podem ser representados de modo que a quadratura em ordenadas discretas seja equivalente a um método de harmônicos esféricos com uma dada condição de contorno, como por exemplo, a de Marshak. Uma vez que os conjuntos de cossenos direcionais são apresentados, os pesos da quadratura são encontrados de tal forma que satisfaçam um conjunto geral de momentos.

Sistemas de coordenadas para geometrias retangular, cilíndrica e esférica são mostrados na figura 7. Em cada caso a variável direcional $\hat{\Omega}$ é definida com relação a um sistema de coordenadas retangulares ortonormais (μ, η, ξ) , o qual é localizado alinhadamente aos vetores unitários do sistema de coordenadas geométrico.

As possíveis orientações do vetor direcional angular $\hat{\Omega}$ define uma esfera unitária no espaço (μ, η, ξ) .

A descrição de um octante é o suficiente para descrever o arranjo dos pontos em uma esfera unitária. (Figura I-1)

Os pontos se localizam sobre uma esfera unitária, então:

$$\mu_i^2 + \mu_j^2 + \mu_k^2 = 1$$

Devido à simetria total, os índices i, j, k das coordenadas dos pontos na esfera, somam $n/2 + 2$.

Isto é em geral,

$$\mu_i^2 + \mu_j^2 + \mu_{n/2 + 2 - i - j}^2 = 1,0 \quad (I-1)$$

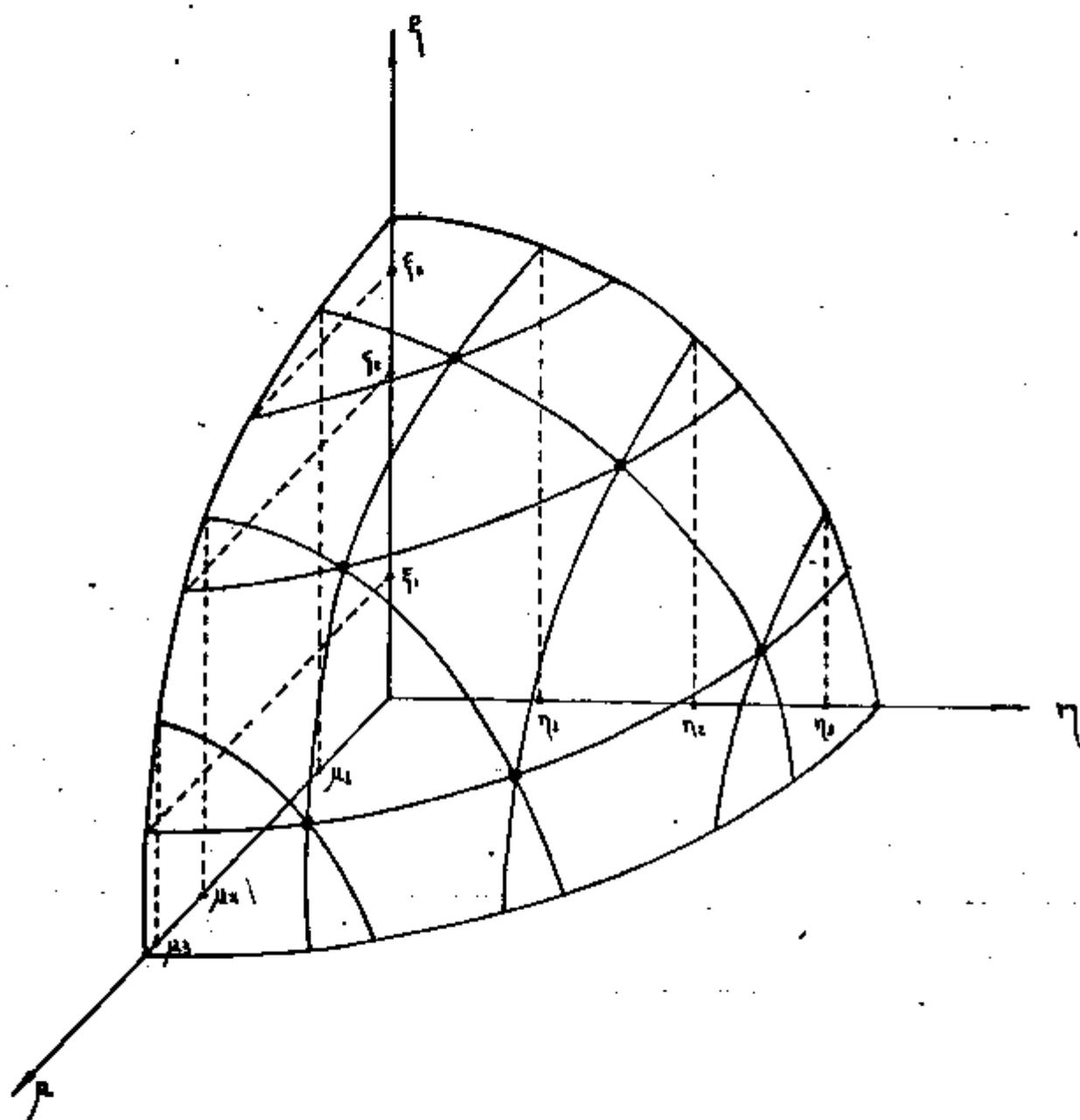


Figura I-1 - Arranjo de Pontos, $n = 6$. Simetria Total

onde

$$i = 1, 2, \dots, n/2 \quad e$$

$$j = 1, 2, \dots, n/2 - i + 1$$

A relação I-1 é resolvida por

$$u_1^2 = u_1^2 + (i - 1)\Delta \quad (I-2)$$

$$\text{para } i = 1, 2, \dots, n/2$$

onde

$$\Delta = 2(1 - 3u_1^2)/(n-2) \quad (I-3)$$

A exigência de simetria total fixa todos os u_i , exceto u_1 .

O código DDQ permite ao usuário especificar u_1 se desejado e usar (I-2) para determinar os conjuntos de cosenos dirgionais necessários.

Em geometria cilíndrica, um operador de momento geral pode ser definido como:

$$A_{1,m} = \frac{1}{\pi} \int_0^1 d\xi \int_0^\pi d\omega \xi^1 u^m \quad (I-4)$$

Em conjunção com a condição de contorno de Marshak, um necessário operador truncado pode ser definido como:

$$A_{1,m}^t = \frac{1}{\pi} \int_0^1 d\xi \int_0^{\pi/2} d\omega \xi^1 u^m \quad (I-5)$$

Se o operador (I-4) é aplicado à unidade, o resultado é um conjunto de quantidades, denotado por $\psi_{1,m}$ o qual não é zero para um m par e é dado por:

$$\psi_{1,m} = \sum P_k \mu_{1j}^{1,m} = \frac{\frac{1}{2} \Gamma(\frac{1+1}{2}) \Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\frac{1+m+3}{2})}$$

onde

(I-5)

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \quad \text{e} \quad \Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

P_k = peso do k-ésimo ponto

$\mu_{1j}^{1,m}$ = cosenos direcionais

$1,m = 2,2,4,\dots$

A equação (I-5) com a equação (I-4) é avaliada no código de computador DCD.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ANISN - ORNL: A one-dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering. Oak Ridge, Tenn., Radiation Shielding Information Center, Oct, 1977. (CCC-254).
2. BELL, G.J. & GLASSTONE, S. Nuclear reactor theory. New York, N.Y., Van Nostrand Reinhold, 1970.
3. BENCHMARK PROBLEM COMMITTEE. Argonne Code Center: Benchmark problem book. Argonne, Ill., Argonne National Lab., Dec. 1972. (ANL-7416,Supp.2).
4. BENCHMARK PROBLEM COMMITTEE. Argonne Code Center: Benchmark problem book, Numerical determination of the space, time, angle, or energy distribution of particles in an assembly. Argonne, Ill., Argonne National Lab., Dec. 1972. (ANL-7416,Suppl.1).
5. CARLSON, B.G. A method of moments for solving the neutron transport equation. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1960. (LA-3060).
6. CARLSON, B.G. Calculation of the transport equation by the S_n method. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1965. (LA-1891).
7. CARLSON, B.G. The numerical theory of neutron transport. Math. in Computational Phys., 1:1-42, 1963.
8. CARLSON, B.G. The S_n method and Sng Codes. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1959. (LAMS-2201).
9. CARLSON, B.G. & LEE, C.E. Mechanical quadrature and the transport equation. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1961. (LAMS-2573).

10. CARLSON, B.F.; LEE, C.E.; WORLTON, W.J. The BSN and TDC neutron transport codes. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., sem data. (LAMS-2346).
11. COLLIER, G. & GIBSON, G. Gambit Program. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Apr. 1968. (WANL-TME-1952).
12. COLLIER, G.; GIBSON, G.; SOLTESZ, R.G. Status report on the conversion (for a ADC 6600 computer) of the two dimensional transport program DOT. Pittsburgh, Pa. Westinghouse Electric Corp., Sept. 1967. (WANL-TME-1680).
13. DAVIDSON, B. & SYKES, J.B. Neutron Transport Theory. Oxford, Clarendon, 1957.
14. DISNEY, R.K. & ZEIGLER, S.L. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.6: Point kernel techniques. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Aug., 1970. (WANL-PR-(LL)-034(Vol.6)
15. DOODS, H.L. Computational benchmark problems - a review of recent work within the American Nuclear Society Mathematics and Computational Division. Nucl Sci. Engng., 64(1):54-73, Sep. 1977.
16. ENGLE, W.W. A user's manual for ANISM: a one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering. Oak Ridge, Tenn., Union Carbide Corp., Mar. 1967. (K-1093).
17. ENGLE, W.W.; BOLING, M.A.; COLSTON, B.W. OTF-II, a one-dimensional multigroup neutron transport program. Canoga Park, Calif., Atomic International, Mar. 1966. (NAA-SR-10951).
18. ENGLE, W.W. & MYNATT, F.R. A comparison of two methods of inner iteration in discrete ordinates codes. Trans. Am. Nucl. Soc., 11:293-4, 1968.

19. GLASSTONE, S. Ingenieria de reactores nucleares. Barcelona, Editorial Reverte, 1968.
20. GREENSPAN, H.; KFLBER, C.N.; OKRENT, D. Computing methods in reactor physics. New York, N.Y., Gordon & Breach, 1968.
21. HANSEN, G.E. & ROACH, W.H. Six and sixteen group cross sections for fast and intermediate critical assemblies. Los Alamos, N. Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1961. (LAMS-2543).
22. LATHROP, K.D. OTF-IV, a Fortran-IV program for solving the multigroup transport equation with anisotropic scattering. Argonne National Lab., Jul. 1965. (LA-3373).
23. LATHROP, K.D. & BRINKLEY, F.W. TWOTRAN-II, an interfaced, exportable version of the TWOTRAN code for two-dimensional transport. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., 1973. (LA-4848-MS).
24. LATHROP, K.D. & CARLSON, B.G. Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. Los Alamos, N.Mex., Los Alamos Scientific Lab., Feb. 1965. (LA-3186).
25. LEE, C.E. The discrete S_n approximation to transport theory. Los Alamos, Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1962. (LA-2595).
26. LEWIS, E.E. Progress in multidimensional neutron transport computation. Nucl. Sci. Engng., 84(2):279-93, Oct. 1977.
27. MALLIN, A.N. TWOTRAN2 a two-dimensional transport theory code for JOSHUA. Aiken, S.C., Savannah River Lab., 1975. (DPST-75203)
28. MURRAY, L.R. Engenharia nuclear. Rio de Janeiro, Livro Técnico, 1963.

29. MYNATT, F.R. A user's manual for DOT, a two-dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering. Oak Ridge, Tenn., Union Carbide Corp., ser data. (K-1694).
30. MYNATT, F.R. & ENGLE, W.W. Group averaging of cross section for multigroup adjoint discrete ordinates calculations. In: NEUTRON Physics Division annual progress report. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Lab., May 1967. p.78-80. (ORNL-4134).
31. MYNATT, F.R., MUCKENTHALER, F.J., STEVENS, P.N. Development of two-dimensional discrete ordinates transport theory for radiation shielding. Oak Ridge, Tenn., Union Carbide Corp., Aug. 1969. (CTC-INF-952).
32. PETERSON, R.E. & NEWBY, G.A. An unreflected U^{235} critical assembly. Nucl. Sci. Engng. 1(2):112, May 1956.
33. PUTNAM, G.E. Senior Reactor. Physicist, Phillips Petroleum Co., "Letter to Dr. A. Foderaro Consultant for radiation and shielding group", Number Put.6-654, April 26, 1955.
34. RHODES, W.A. & MYNATT, F.R. The DOT-III two dimensional discrete ordinates transport code. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Lab., 1973. (ORNL-TM-4280).
35. SESONSKE, A. Nuclear power plant design analysis. Oak Ridge, Tenn., United States Atomic Energy Commission, 1973. (TID-26141).
36. SOLTESZ, R.G. Revised WANL Anisn program user's manual. Pittsburg, Pa., Westinghouse Astronuclear Lab., Apr. 1963. (WANL-TMI-1967).
37. SOLTESZ, R.G. & DISNEY, R.K. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.4: One-dimensional, discrete ordinates transport technique. Pittsburg, Pa., Westinghouse Electric Corp. Aug. 1970. (WANL-PR-(LL)-034 (Vol.4)).

38. SOLTESZ, R.G.; DISNEY, R.K.; JEDRUCH, J.; ZEIGLER, S.L. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.5: Two-dimensional, discrete ordinates transport technique. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Aug. 1970. (WANL-PR-(LL)-034 (vol.5)).
39. SOLTESZ, R.G.; DISNEY, R.K.; KAISER, R.S.; JEDRUCH, J.; ZEIGLER, S.L. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.1: Synopsis of methods and results of analysis. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Aug. 1970. (WANL-PR-(LL)-034(vol.1)).
40. SOLTESZ, R.G.; DISNEY, R.K.; ZEIGLER, S.L. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.3: Cross section generation and data processing techniques. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Aug. 1970. (WANL-PR-(LL)-034(vol.3)).
41. SOLTESZ, R.G.; KAISER, R.S.; DISNEY, R.K. Nuclear rockets shielding methods, modification, updating, and input data preparation, v.2: Compilation of neutron and photon cross section data. Pittsburgh, Pa., Westinghouse Electric Corp., Aug. 1970. (WANL-PR-(LL)-034(vol.2)).
42. TRUBEY, D.K. & MASKEWITZ, B.F. Review of the discrete ordinates S_n method for radiation transport calculations. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Lab., Mar. 1968. (ORNL-RSIC-19).
43. ZOLOTAR, D.A.; RAHN, F.J.; NERO, A. BWR rod bundle benchmark problem. Trans. Am.nucl.Soc., 23:214, 1976.