

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

**APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NA SOLUÇÃO
DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO**

SHIZUCA ONO

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

Orientador: Dr. José Rubens Maiorino

São Paulo
1982

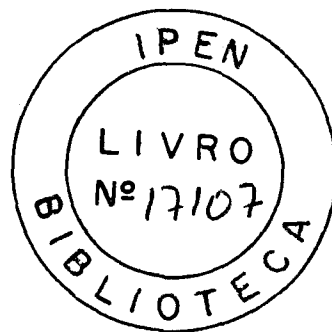
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NA SOLUÇÃO
DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO**

Shizuca Ono

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

orientador: Dr. José Rubens Maiorino



SÃO PAULO
1982

Aos meus pais e irmãos.

Ao Jamil.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. José Rubens Maiorino pela orientação e grande apoio prestado na realização deste trabalho.

Ao José Luiz Batista e Mitsuo Yamaguchi pelo auxílio e colaboração na execução deste trabalho.

Ao Gelson Toshio Otani pela ajuda na parte computacional.

À Gaiânê Sabundjian pelo incentivo e cooperação.

À PRONUCLEAR pela contribuição financeira.

A todos os colegas do Centro de Engenharia Nuclear que de algum modo colaboraram na execução deste trabalho.

À Neusa pelo trabalho de datilografia.

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO

SHIZUCA ONO

RESUMO

A solução da equação de difusão de nêutrons em estado estacionário é obtida através do método dos elementos finitos. Especificamente, usa-se a técnica variacional para problemas em uma dimensão e o método dos resíduos ponderados (Galerkin) para problemas em uma ou duas dimensões. Elementos retangulares são utilizados para a divisão do domínio espacial e o fluxo de nêutrons é aproximado por função linear (caso unidimensional) e função bilinear (caso bidimensional).

Resultados numéricos são obtidos por meio de um programa de computador em linguagem FORTRAN IV, e comparados com os fornecidos pelo código CITATION de diferenças finitas. Os resultados mostram que funções lineares ou bilineares (2D) não descrevem satisfatoriamente os parâmetros diferenciais para núcleo de reatores com grande heterogeneidades, mas apresentam bons resultados para os parâmetros integrais como o fator de multiplicação.

ON THE APPLICATION OF FINITE ELEMENT METHOD IN THE SOLUTION
OF STEADY STATE DIFFUSION EQUATION

SHIZUCA ONO

ABSTRACT

The solution of the steady state neutron diffusion equation is obtained by using the finite element method. Specifically the variational approach is used for one dimensional problems and the weighted residual method (Galerkin) for one and two dimensional problems. The spatial domain is divided into rectangular elements and the neutron flux is approximated by linear (one dimensional case), and bilinear (two-dimensional case) functions.

Numerical results are obtained with a FORTRAN IV computer program and compared with those obtained by the finite difference CITATION code. The results show that linear or bilinear functions, do not satisfactorily describe the differential parameters in highly heterogeneous reactor cases, but provide good results for integral parameters such as multiplication factor.

I N D I C E

	Pág.
CAPÍTULO I	1
1.1 - Introdução	1
1.2 - Histórico	2
1.3 - Campo de aplicação do MEF	4
1.4 - Aplicação em física de reatores	4
1.5 - Outras técnicas de solução da equação de difusão	6
1.5.1 - Método das diferenças finitas	6
1.5.2 - Método de síntese	8
1.5.3 - Métodos nodais	8
1.5.4 - Método de Monte Carlo	9
1.6 - Objetivo do trabalho	10
CAPÍTULO II	11
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DO MEF EM FÍSICA DE REA- TORES	11
CAPÍTULO III	19
O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS (GERAL)	19
3.1 - Técnica variacional	21
3.2 - Técnica dos Resíduos Ponderados	22
CAPÍTULO IV	
APLICAÇÃO DO MEF EM PROBLEMA DE FÍSICA DE REA- TORES	24
4.1 - A Equação de difusão	26

4.2 - Técnica variacional	28
4.3 - Técnica dos resíduos ponderados	32

CAPÍTULO V

RESULTADOS NUMÉRICOS	40
5.1 - Problema 1	41
5.2 - Problema 2	43
5.3 - Problema 3	49
5.4 - Problema 4	55
5.5 - Problema 5	61

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	69
-------------------------------	----

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70
----------------------------	----

APÊNDICE A

PRINCÍPIOS VARIACIONAIS E A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO	76
--	----

APÊNDICE B

ALGORÍTMO PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO MULTIGRUPO	78
--	----

INDICE DAS FIGURAS

	Pág.
Fig.1.5.1 - Ilustração da discretização espacial utilizada pelo método de diferenças finitas.	7
Fig.3.1 - Ilustração do domínio do problema (Ω) e seu contorno ($\partial\Omega$), domínio do elemento (Ω^e) e seu contorno ($\partial\Omega^e$) em duas dimensões (X-Y).	20
Fig.4.1 - Ilustração da estrutura de multigrupo de energia.	25
Fig.4.2.1 - Ilustração da geometria unidimensional com os elementos.	30
Fig.4.3.1 - Discretização bidimensional (X-Y).	35
Fig.4.3.2 - Estrutura das matrizes.	28
Fig.5.1.1 - Geometria e constantes nucleares para o problema celular.	41
Fig.5.2.1 - Geometria esquemática do reator do problema 2.	44
Fig.5.2.2 - Fluxo térmico normalizado do problema 2.	47
Fig.5.3.1 - Geometria, dimensões e condições de contorno para o problema 3.	49
Fig.5.3.2 - Disposição da malha (8x8) do reator do problema 3.	50
Fig.5.3.3 - Distribuição de potência normalizada do problema 3.	51

	Pág.
Fig.5.3.4 - Fluxo rápido normalizado do problema 3 na posição $y = 15$ cm.	52
Fig.5.3.5 - Fluxo térmico normalizado do problema 3 na posição $y = 15$ cm.	53
Fig.5.4.1 - Geometria do ZION-1.	55
Fig.5.4.2 - Arranjo das malhas do ZION-1 para entrada no programa.	57
Fig.5.4.3 - Distribuição de potência normalizada do ZION-1 (problema 4).	58
Fig.5.4.4 - Fluxo rápido normalizado do problema 4 na posição $y = 78,485$ cm.	59
Fig.5.4.5 - Fluxo térmico normalizado do problema 4 na posição $y = 78,485$ cm.	60
Fig.5.5.1 - Geometria do reator 2D-IAEA.	62
Fig.5.5.2 - Disposição da malha do 2D-IAEA para entrada no programa.	64
Fig.5.5.3 - Distribuição da potência normalizada do problema 5.	65
Fig.5.5.4 - Fluxo rápido normalizado do problema 5 na posição $y = 100,0$ cm	66
Fig.5.5.5 - Fluxo térmico normalizado do problema 5 na posição $y = 100,0$ cm.	67
Fig.B.2.1 - Ilustração dos pontos para integração dupla numérica.	81

Fig. B.3.1 - Estrutura do programa	82
Fig. B.3.2 - Fluxograma do programa	84

ÍNDICE DAS TABELAS

	Pág.
Tab.5.1.1 - Fator de desvantagem térmica (ξ) do problema 1.	42
Tab.5.2.1 - Constantes nucleares do problema 2.	44
Tab.5.2.2 - Valores do K_{ef} do problema 2.	45
Tab.5.2.3 - Erro do K_{ef} desse trabalho em relação ao do CITATION (problema 2)	45
Tab.5.2.4 - Valores do $\phi(x)/\phi(0)$ do problema 2.	46
Tab.5.3.1 - Valores do fator de multiplicação do problema 3.	50
Tab.5.4.1 - Constantes nucleares do ZION-1.	56
Tab.5.5.1 - Constantes nucleares do 2D-IAEA.	63
Tab.5.7 - Valores do fator de multiplicação dos problemas 4 e 5	68

CAPÍTULO I

1.1. INTRODUÇÃO

A análise de muitos fenômenos na natureza conduz a modelos matemáticos complexos que resultam em equações diferenciais ou íntegro-diferenciais, que procuram descrever o comportamento do fenômeno. São frequentes as situações onde soluções analíticas rigorosas para estes modelos não são facilmente encontradas ou mesmo são inexistentes. Uma alternativa seria simplificar o modelo matemático que descreve o fenômeno físico em estudo para se obter uma equação diferencial possível de ser analiticamente solucionável. Entretanto, a vantagem em obter-se soluções analíticas, e portanto "exatas", é diminuída pelo fato de ter-se modelado o sistema físico de uma maneira não realística, e portanto, essas equações, assim obtidas, não descreveriam rigorosamente o fenômeno em análise. Uma outra maneira de se contornar as dificuldades de cálculo, é usar técnicas numéricas que levam às soluções também aproximadas devido a discretização das variáveis envolvidas. Com o advento dos modernos computadores é possível obter-se discretizações tão pequenas quanto se queira, embora restrita pelas limitações do computador. Assim as técnicas numéricas ganharam maiores perspectivas e estão sendo cada vez mais empregadas nas soluções das equações diferenciais, permitindo então modelos finais mais realísticos, embora não fornecendo resultados "exatos".

Com o aumento da capacidade dos computadores digitais, surgiu na comunidade científica um "consenso" de que qualquer problema pode ser solucionado numericamente por meio do computador. Entretanto, mesmo sabendo-se do enorme potencial dos métodos numéricos e da capacidade da máquina, inúmeros problemas são ainda impossíveis, e alguns casos impraticáveis, de serem solucionados mesmo numericamente. Tais limitações ocorrem por várias razões; uma delas é a limitação devido a impossibilidade de certos problemas serem modelados com-

pletamente, e outra é a necessidade de um tempo de computador proibitivo para o cálculo numérico. A solução para tais impasses envolveria um maior desenvolvimento tecnológico para se obter maior eficiência da máquina e desenvolvimento de técnicas numéricas mais poderosas. Desta forma é crescente a pesquisa em técnicas numéricas, visando atingir estes objetivos.

Dentre as várias técnicas, o método dos elementos finitos (MEF), objeto de estudo deste trabalho, é considerado como uma das mais promissoras, devido a certas vantagens sobre outras técnicas, como: utilização de malhas relativamente grandes, emprego de funções de alta ordem, versatilidade na modelagem de geometrias irregulares, etc.

1.2. HISTÓRICO

O MEF /6,18,24,44/, como um instrumento de análise, foi inicialmente usado em problemas de mecânica estrutural na engenharia civil, mas logo seu campo de aplicação foi ampliado a outras áreas da engenharia.

É difícil estabelecer a sua origem e o momento de sua concepção. O conceito de análise estrutural surgiu por volta de 1900 com Maxwell, Castigliano e Mohr entre outros /18/. Esse conceito representou o princípio da metodologia de análise matricial de estrutura, que é a base da análise por elementos finitos da mecânica estrutural.

No início, o desenvolvimento do MEF foi lento, devido a limitações práticas na solução numérica das equações algébricas, e pelo fato desse método exigir cálculos repetitivos e muitas vezes iterativos de conjunto de equações simultâneas. A solução manual, como era feita, tornava-se trabalhosa e inviável, limitando-se a aplicação do MEF na solução de problemas simples. Com o desenvolvimento da eletrônica apareceram os computadores digitais na década de 1950, e foi possível

vel então substituir os cálculos manuais árduos e demorados pelo cálculo por máquina, obtendo-se assim soluções com maior rapidez e precisão, e como consequência, o MEF teve um rápido desenvolvimento.

Antes de 1950 pode-se citar Hrenikoff /24/ que mostrou que solução numérica do problema estrutural para um sólido regular poderia ser obtido substituindo-o por um conjunto simples de barras. Courant /24/, em 1943, solucionou o problema de torção de St.Venant, aproximando a função de deformação em cada um dos elementos triangulares e formulando a solução do problema através do princípio da energia potencial mínima.

Em 1959, Greenstadt /24/ esboçou uma aproximação por discretização envolvendo "células", isto é, imaginou o domínio do problema dividido em um conjunto de subdomínios adjacentes. Nesta teoria, descreveu um procedimento para representar a função incógnita por uma série de funções bases cada qual associada a uma "célula", e analisando o princípio variacional apropriado em cada "célula". A teoria de Greenstadt permite usar malhas de forma irregular, e contém muitas das idéias essenciais e fundamentais que servem de base matemática para o MEF, como este é conhecido atualmente.

A popularidade do MEF aumentou na área da engenharia no início da década de 1960, com trabalhos significativos de White - Friedrichs e Turner e seus colaboradores /24/. White e Friedrichs usaram elementos triangulares para solucionar equações diferenciais, a partir do princípio variacional. Turner e seus colaboradores em 1967 introduziram o método direto da matriz de rigidez, como é conhecido hoje, sendo que esses estudos permitiram a solução de problemas complexos da teoria da elasticidade. Com o tratamento dos problemas de elasticidade no plano, por Clough /58/, em 1960, a eficácia do MEF foi estabelecida.

As bases matemáticas do método foram solidificadas com Bresseling e outros pesquisadores / 24/ os quais reconhe-

ceram que o MEF era uma forma variante do método de Ritz.

A partir de 1965 esta técnica teve uma interpretação mais ampla com Zienkiewicz e Cheung /58/, os quais verificaram a sua aplicabilidade a toda classe de problemas que podem ser moldados na forma variacional.

1.3. CAMPO DE APLICAÇÃO DO MEF

Os trabalhos práticos iniciais, aplicando esta técnica, foram realizados no campo da mecânica dos sólidos, mais precisamente na área de cálculo estrutural, onde alcançou o seu mais alto grau de desenvolvimento.

A faixa de aplicações possíveis do MEF estende-se a quase todos os ramos da engenharia, onde o comportamento do sistema pode ser descrito por equações diferenciais. Como exemplos, em transferência de calor, hidrodinâmica, engenharia hidráulica, engenharia aeroespacial, engenharia mecânica, etc. /18,24/. Programas computacionais elaborados usando como ferramenta o MEF são disponíveis para análise da estrutura de aeronaves, na arquitetura naval, na análise do vaso de pressão de concreto protendido de reatores nucleares e outros problemas básicos da engenharia civil estrutural /24/. A razão do amplo uso do MEF na mecânica dos sólidos e fluidos é devido às vantagens da técnica, tais como: o tratamento com relativa facilidade e exatidão de geometrias regulares e irregulares, tratamento de heterogeneidades e quaisquer combinações das condições de contorno.

1.4. APLICAÇÃO EM FÍSICA DE REATORES

O cálculo do núcleo* de um reator nuclear é a pri-

* NÚCLEO do reator é o local onde são induzidas e mantidas as reações de fissão e onde se produz energia /11/.

meira etapa do projeto do reator. Os cálculos são realizados para se determinar um conjunto de parâmetros do núcleo que tornará a operação do reator segura, confiável e economicamente viável no nível de potência de projeto durante toda a sua vida útil. A maneira pela qual é realizada essa tarefa é pela formulação de modelos teóricos que procuram descrever o comportamento da população de nêutrons dentro do núcleo e a solução numérica das equações que descrevem esse modelo através dos códigos nucleares*. Um destes modelos é a conhecida teoria de difusão, a qual permite um tratamento do comportamento espacial e energético (multigrupo) dos nêutrons e fornece resultados com precisão suficiente para a maioria dos problemas de interesse da física de reatores.

Vários procedimentos numéricos tem sido desenvolvidos objetivando a solução de problemas estáticos, bem como dependentes do tempo de reatores nucleares, tanto para a equação de difusão como para a equação de transporte. Os estudos destas técnicas visam um ganho em termos de tempo de processamento nos computadores, bem como a melhoria da precisão numérica. Dentre as várias técnicas numéricas, o método das diferenças finitas é uma das mais conhecidas e de desenvolvimento teórico relativamente simples, e por isso uma das mais empregadas na solução da equação de difusão em códigos nucleares. O método das diferenças finitas consiste basicamente em transformar uma equação diferencial em equação de diferenças finitas através da partição do domínio da variável independente para se obter valores discretos sobre intervalos finitos das variáveis dependentes.

Para se obter uma precisão numérica aceitável o método das diferenças finitas requer uma partição da variável espacial em malhas relativamente pequenas (da ordem do comprimento de difusão do material), e portanto o número de incôgniti-

* CÓDICO nuclear é um programa de computação que utiliza métodos numéricos para solucionar problemas de interesse da Engenharia Nuclear, com intuito de fornecer resultados usados nos projetos de reatores, análise de segurança de centrais nucleares ou na administração do combustível nuclear /55/.

tas a ser calculado torna-se proibitivo, porque envolve o uso de uma quantidade considerável de memória e tempo computacional. Estas dificuldades aumentam ainda mais no caso de modelamento do núcleo de um reator nuclear, onde se requer a análise em geometria multidimensional e de composição heterogênea, tornando-se extremamente dispendioso tal procedimento.

O sucesso alcançado na aplicação do MEF em grande variedades de problemas em outras áreas da engenharia tem resultado em um crescente interesse em utilizar-se desta técnica na solução de problemas de física de reatores, principalmente pelo fato das várias dificuldades existentes na aplicação do método das diferenças finitas poderem ser superadas.

1.5. OUTRAS TÉCNICAS DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

1.5.1 - Método das diferenças finitas

É o método convencional utilizado pela maioria dos códigos nucleares que resolvem problemas de física de reatores, com o modelo de difusão, como o CITATION, PDQ, etc.

Primeiro, obtêm-se uma malha espacial pela discretização do domínio da variável espacial. A equação diferencial é então escrita na forma de equação de diferenças nesta malha. Vários esquemas são disponíveis, para gerar uma representação da equação diferencial em equação de diferenças finitas. Uma delas é a expansão em série de Taylor para a variável dependente para se obter uma aproximação para o termo que contém o operador diferencial /11/. Assim, como exemplo, seja resolver a equação:

$$- D \frac{d^2 \phi}{dx^2} (x) + \Sigma_a \phi(x) = S(x), \quad x \in D \quad (1.5.1.1)$$

com as condições de contorno $\phi(0) = \phi(a) = 0$ para um problema de geometria tipo placa de espessura a discretizada como ilustrado na figura 1.5.1.

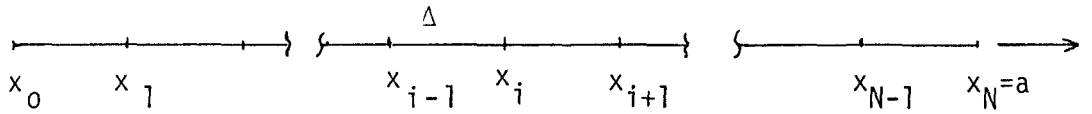


Fig.1.5.1. Ilustração da discretização espacial utilizada pelo método de diferenças finitas.

Expandindo ϕ em série de Taylor nos pontos x_{i-1} e x_{i+1} , em termos de seu valor no ponto x_i tem-se:

$$\phi_{i+1} = \phi(x_{i+1}) \cong \phi_i + \Delta \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i + \frac{\Delta^2}{2} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i + \dots \quad (1.5.1.2)$$

$$\phi_{i-1} = \phi(x_{i-1}) \cong \phi_i - \Delta \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i + \frac{\Delta^2}{2} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i - \dots \quad (1.5.1.3)$$

Somando as equações 1.5.1.2 e 1.5.1.3 segue

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i \cong \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta^2} . \quad (1.5.1.4)$$

Então a equação 1.5.1.1 escrita como equação de diferenças finitas é da forma:

$$a_i \phi_{i-1} + b_i \phi_i + c_i \phi_{i+1} = S_i , \quad (1.5.1.5)$$

$$i = 1, 2, \dots, N-1.$$

Estas equações juntamente com as condições de contorno formam o sistema de equações algébricas para $N+1$ incógnitas que podem ser solucionadas por um algoritmo adequado.

Um outro esquema de se obter as equações de diferenças finitas consiste em integrar a equação diferencial origi-

nal sobre um intervalo arbitrário da malha e aproximar convenientemente estas integrais usando valores médios simples ou fórmulas de diferenças para se obter um conjunto de equações similares à equação (1.5.1.5) /11,41/.

Com o objetivo de contornar as limitações do método das diferenças finitas, outras técnicas têm sido investigadas a fim de se obter maior eficiência. Pode-se citar dentre outros o método de síntese, os vários tipos e combinações do método nodal de malhas largas e o método de Monte Carlo.

1.5.2. Método de síntese/22/

Como citado anteriormente, os cálculos numéricos de equações diferenciais multidimensionais requerem grande quantidade de memória e também dispendem tempo computacional elevado. Com a finalidade de minimizar esses parâmetros, o método variacional e o método dos resíduos ponderados podem ser empregados com uma técnica que soluciona problemas multidimensionais, expressando a solução em problemas de menores dimensões. Para um problema tridimensional, por exemplo, a variável independente é formulada como uma combinação de resultados de problemas de uma e duas dimensões. Isto é basicamente o método de síntese. No esquema de síntese as funções de aproximação são fortemente dependentes do problema, sendo um dado conjunto de função usualmente empregadas numa classe restrita de problemas. Portanto para problemas complexos, o sucesso desse método depende principalmente da seleção adequada das funções de aproximação, requerendo assim alguma experiência.

1.5.3. Métodos nodais /11,20,22/

São métodos computacionais de malhas largas, onde o reator é particionado em zonas relativamente grandes, chamadas nodos. A idéia fundamental dos métodos nodais consiste em relacionar a corrente de nêutrons através das interfaces en-

tre dois nodos aos fluxos médios nesses nodos, por meio dos chamados coeficientes de acoplamento. Esses coeficientes são interpretados como probabilidade de um nêutron nascer em uma célula nodal e se difundir em outras células. Portanto a chave do método está em determinar esses coeficientes de acoplamentos nodais, que são usualmente efetuados de maneira aproximada assumindo-se geralmente fonte plana e composição uniforme em cada nodo. Alguns dos métodos nodais não dependem explicitamente da teoria de difusão de neutrons, entretanto, quando a determinação dos coeficientes de acoplamento é feita com base na teoria de difusão, esta deverá ser válida na superfície de separação dos nodos.

Se o tamanho dos nodos e os coeficientes de acoplamento nodais são apropriadamente escolhidos, então o método nodal pode ser extremamente útil em gerar distribuição de fluxos e potência em geometrias multidimensionais, com precisão razoável e grande economia de tempo e memória computacional, quando comparado ao método de diferenças finitas.

1.5.4. Método de Monte Carlo /41/

Monte Carlo é um método numérico baseado na teoria estatística usando números aleatórios. A aplicabilidade da técnica de Monte Carlo em física de reatores está ligada ao fato do comportamento das partículas serem probabilísticas sendo governadas por distribuição de probabilidade, e as seções de choque serem interpretadas como uma probabilidade de interação. Nesse método um conjunto de "histórias" são geradas, "seguindo-se" individualmente o nêutron através de sucessivas colisões, sendo o local, direção e energia do nêutron emergente determinados através de técnicas de amostragem.

O método de Monte Carlo não é restrito pela complexidade da geometria ou número de variáveis independentes. O obstáculo, entretanto, é o tempo computacional necessário para se obter resultados com significância estatística.

Um código nuclear que utiliza esse método é o KENO /46/, sendo um programa para análise de criticalidade em multigrupo. Sistemas tri-dimensionais podem ser facilmente descritos, sendo possível o tratamento de geometrias complexas.

1.6. OBJETIVO DO TRABALHO

O objetivo deste trabalho foi o estudo da aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de difusão de nêutrons. Para tal, desenvolveu-se programas de computação que possibilitaram a solução de problemas em geometria uni e bi-dimensional, os quais foram aplicados em vários problemas amostras, sendo seus resultados comparados com os obtidos com o CITATION / 13/. Salienta-se que neste trabalho, não se procurou introduzir nenhum novo conceito numérico no MEF, nem se procurou desenvolver um programa de computador eficiente que pudesse ser competitivo com os códigos já existentes, que utilizam a técnica dos elementos finitos. Entretanto, este trabalho fornece uma descrição sobre o "estado da arte" da aplicação do MEF em Física de Reatores, bem como um programa que, apesar de não otimizado e restrito quanto a precisão, permite o cálculo da distribuição de nêutrons, do fator de multiplicação, em geometria X-Y, simulando o núcleo de reatores nucleares.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DO MEF EM FÍSICA DE REATORES

Neste capítulo são apresentados de modo sumário os principais trabalhos da aplicação do MEF na solução da equação de difusão e na solução da equação de transporte (separadamente).

Cronologicamente o início dos estudos de aplicação do MEF na teoria de difusão e transporte são, quase que, simultâneas. A justificativa para tal comportamento reside no fato de que em física de reatores, tanto a teoria de difusão como a teoria de transporte são áreas já bem estabelecidas. Por outro lado, o MEF já possui estudos exaustivos e aplicações práticas reais em projetos de outros campos da engenharia, com base matemática bem definida, permitindo assim aos pesquisadores em física de reatores uma aplicação mais direta desta técnica.

A revisão bibliográfica aqui apresentada é um panorama em ordem cronológica, sem levar em consideração o processo evolutivo da aplicação do MEF em problemas de interesse da física de reatores. As principais publicações relacionadas tanto à teoria de difusão como à teoria de transporte, aparecem no princípio da década de 1970.

Dentre os primeiros trabalhos em difusão de nêutrons destacam-se os de Semenza, Lewis e Rossow /52/ em 1972, os quais tratam da solução da equação de difusão de nêutrons em multigrupo pela técnica variacional usando polinômios lineares de Lagrange para funções interpolantes em elementos triangulares, e polinômios bilineares para elementos retangulares. Do mesmo período podem-se citar: Kaper et al. /28/ (1972), Nakamura e Ohnishi (1972) /42/ e Kang e Hansen /26,27/, (1973). Os primeiros utilizaram uma aproximação de alta ordem, usando

o princípio variacional para solucionar a equação de difusão multigrupo em duas dimensões e comparam os resultados com o método das diferenças finitas de baixa ordem. Nakamura e Ohnishi apresentaram uma solução iterativa para a equação matricial de elementos finitos com ênfase no esquema de aceleração. Adotaram a técnica iterativa SOR (successive-over-relaxation), sendo o trabalho restrito a elemento triangular e geometria bidimensional X-Y.

Em 1974, novamente Hansen juntamente com Deppe /9, 10/ publicaram um trabalho onde solucionam a equação de difusão em multigrupo, bidimensional, em estado estacionário, pela expansão do fluxo incôgnita em polinômios bicúbicos de Hermite. A formulação matricial é obtida aplicando a técnica de Galerkin e o conjunto das equações é solucionada pelo método iterativo e fatorização de Cholesky e apresentam resultados numéricos obtidos por meio do programa CHD, por eles desenvolvidos. A principal conclusão deste trabalho é a viabilidade de se estender o domínio das funções de expansão sobre regiões heterogêneas e portanto descrevendo realisticamente a dependência espacial das seções de choque.

Dois anos mais tarde, Biswas et al. /8/ publicaram um artigo introduzindo um método simples de gerar equações matriciais, para solução da equação de difusão multigrupo, usando um "sistema de coordenadas naturais". Neste trabalho é feito um estudo comparativo de elementos triangulares com modelo linear e quadrático e elementos retangulares com modelo bilinear, para mostrar a eficiência relativa do método proposto. A interpolação quadrática mostra ser computacionalmente superior a modelos lineares e bilineares, fornecendo um erro relativamente menor para o fator de multiplicação. Mostraram ainda a flexibilidade do tratamento por elementos finitos no cálculo da reatividade.

Com Franke /14,15,16/, em 1976, tem-se a solução da equação de difusão em estado estacionário por elementos finitos em três dimensões espaciais. O autor desenvolveu um progra

ma onde usa elementos de forma tetraédrica. O fluxo de nêutrons é interpolado por polinômios de Lagrange, e são aceitas condições de contorno homogêneas. A partir deste, foram publicados vários trabalhos em três dimensões, destacando-se ainda nessa mesma época, Kavenoky e Lautard /30/, Misfeldt /38,39/, em 1977. Kavenoky e Lautard fizeram o cálculo de depleção com seção de choque dependente do espaço em duas e três dimensões. Posteriormente, Lautard /32/ apresentou um novo método de elementos finitos com integração numérica Gaussiana que permite o uso de malhas grandes com maior precisão e rapidez, em problemas de duas e três dimensões espaciais. Misfeldt aplicou a técnica para solucionar a equação de difusão em três dimensões e em multigrupo.

Um estudo do comportamento das singularidades e a influência na ordem de convergência foi realizado por Hennart e Mund /21/ em problemas de difusão a duas dimensões. Neste trabalho a escolha dos elementos é descrita para uma dada configuração do reator.

Em 1978, Ise, Yamazaki, Nakahara /25/ desenvolveram um programa de computador (FEM-BABEL) em três dimensões espaciais onde utilizam uma combinação de elementos prismas triangulares e retangulares para simular a geometria do reator. Desenvolveram um algoritmo baseado no método de Galerkin e adotaram um método de aceleração para resolver o sistema de equações de uma maneira otimizada. DIFGEN é um outro programa desenvolvido por Schmidt /50,51/ que resolve problemas em duas e três dimensões com a equação de difusão em estado estacionário e transiente. São possíveis o uso de elementos triangulares, quadriláteros e de contornos curvos, permitindo espalhamento para cima e sendo disponíveis todas as condições de contorno usuais.

Uma nova técnica de solução da equação de difusão por elementos finitos foi desenvolvida por Azekura /4,5/ em 1980. Nesse novo método a precisão do cálculo é melhorada acrescentando-se pontos nodais imaginários e subdividindo-se cada elemento triangular em três subelementos quadriláteros. No

processo de solução das equações algébricas as variáveis adicionais incógnitas são eliminadas de tal modo que o número de incógnitas permaneça a mesma do MEF usual.

Mais recentemente, Nakata /43/ desenvolveu um novo método de cálculo de reatores, onde acopla o MEF com a técnica da matriz resposta, para solucionar a equação de difusão não homogênea, na forma fraca. Usando o formalismo usual da técnica da matriz resposta, o núcleo do reator é dividido em malhas largas, e a solução global é obtida relacionando malhas adjacentes por meio das correntes parciais nos respectivos contornos. O MEF é aplicado nos cálculos para cada malha grossa, com o objetivo de solucionar a equação de difusão, com correntes parciais incidentes no contorno. Os resultados obtidos na solução de problemas padrões como 2D-IAEA e BIBLIS provam a capacidade do método para solução de problemas práticos.

Do último seminário sobre aplicação do MEF em cálculos de blindagens /57/ valem citar os trabalhos de Shuttleworth, Grenfell e Armishaw. O primeiro desenvolveu um programa de computador (FENDER), o qual soluciona a equação de difusão usando o MEF com até 1000 elementos, e com uma variedade de alternativas nas condições de contorno. Um outro programa de computador usando o MEF e visando aplicação em blindagem de radiação foi desenvolvido por Grenfell. Soluciona a equação de difusão em estado estacionário em três dimensões com dependência energética. Armishaw e seus colaboradores desenvolveram um programa (FEDTRAN) que utiliza o MEF em conjunção com a técnica de Monte Carlo.

Paralelamente a aplicação do MEF na solução da equação de difusão, surgiram trabalhos aplicando o MEF na solução da equação de transporte. Deste então, uma grande variedade de técnicas tem sido estudadas tanto para a forma tradicional da equação integro-diferencial de transporte de primeira ordem, a qual não é auto adjunta, como na forma da equação de transporte de segunda ordem para os fluxos de paridade par e ímpar, a qual é auto-adjunta e que portanto possui um funcional associado que minimizado fornece a solução.

Dos primeiros trabalhos, pode-se citar o de Pitkäranta e Silvennoisen /47/, de 1972, calculando a espessura crítica de um reator tipo placa por meio da discretização da equação de transporte em um grupo. Neste trabalho citam que para uma dada ordem de aproximação é possível aumentar a precisão usando tamanho de elementos variáveis. Os mesmos pesquisadores, posteriormente, /48/, trataram de problemas em multigrupo com o esquema de aproximação baseado no princípio variacional da equação de transporte monoenergético na forma auto adjunta.

Miller, Lewis e Rossow /36/, usaram polinômios lineares contínuos, para aproximação do fluxo angular em uma dimensão. Tratam de geometrias cilíndrica, esférica e plana, com espalhamento isotrópico. Posteriormente /37/ suas pesquisas foram estendidas a duas dimensões em geometria plana (X-Y) com modelo monoenergético. Neste trabalho utilizaram funções bilineares para a variável angular, e linear ou bilinear para a variável espacial, sendo possível a utilização de elementos triangulares ou retangulares na variável espacial com orientação arbitrária. Ainda em duas dimensões e geometria cilíndrica, Horikami e um grupo de pesquisadores /23/, em 1974, desenvolveram um algoritmo em multigrupo onde o MEF é aplicado à variável espacial com elemento retangular, e sendo a variável angular aproximada pela técnica das ordenadas discretas. A técnica utilizada no MEF é a de Galerkin com polinômios de interpolação bilinear, cúbico e bi-quadrático de Lagrange.

Kaper, Leaf e Lindeman /29/ usaram como função de interpolação polinômios de Lagrange para obter a solução numérica da equação de transporte, em estado estacionário, no modelo de multigrupo, em duas dimensões espaciais. O procedimento é baseado na formulação variacional da equação de transporte de 2ª ordem de um grupo, sendo limitado a elementos triangulares e espalhamento isotrópico.

Em 1975, Yuan e outros pesquisadores /56/, analisaram resultados obtidos pela aplicação de três métodos iterati

vos à equação de transporte monoenergética, discretizada através do MEF: "point SOR", "block SOR" e "accelerated block SOR". Dois esquemas de alocação de memória são usados; o primeiro permitindo a triangulação arbitrária do domínio espacial enquanto o segundo é restrito a malha retangular. Ainda, desse período valem citar os trabalhos de Lewis /33/ e Martim /34/. Lewis inclui no cálculo do transporte de nêutrons em células bidimensionais em geometria X-Y, a representação de regiões com interfaces curvas. Martim faz análise das taxas de convergência para a solução em geometria unidimensional. Um outro trabalho com aplicação de elementos de contornos curvos é o de Mordand /40/ onde desenvolveu um programa de computação (ZEPHYR) com capacidade para solução de problemas em duas dimensões, multigrupo, em geometria X-Y ou R-Z. O MEF é aplicado à variável espacial com malha triangular ou retangular.

Em 1977, Martim e Duderstadt /35/ publicaram um trabalho onde aplicam o MEF a ambas as variáveis, espacial e angular da equação de transporte de nêutrons de primeira ordem. Resultados numéricos são apresentados para geometria plana unidimensional e comparados com os obtidos por meio do código ANISN de ordenadas discretas.

Fujimura e outros pesquisadores /17/ solucionaram a equação de transporte em geometria cilíndrica, bidimensional, sendo a equação de transporte discretizada usando elementos retangulares regulares com funções quadráticas ou bilineares de Lagrange. O método é incorporado no código de computador FEMRZ.

Tomlinson e Robinson /54/ desenvolveram um método de obter a solução da equação de transporte de nêutrons sobre malhas triangulares irregulares, com contornos não ortogonais e espalhamento anisotrópico. Um funcional é desenvolvido a partir da forma canônica da equação de transporte de multigrupo. A variável angular é removida expandindo-se o funcional em harmônicos esféricos e limitando o espalhamento a ser isotrópico. O MEF é aplicado usando polinômios interpolantes de Lagrange para a expansão da variável espacial.

A conjunção de harmônicos esféricos com MEF foi feita por Ackroyd /2,3/ para problemas em multigrupo. Mais tarde Ackroyd, juntamente com Goddard adaptam a formulação para tratar de problemas de blindagem em multigrupo. Os resultados de problemas de blindagem unidimensional mostram que o método é rápido e preciso e constatam que as soluções são livres do "efeito de raio" frequentemente encontradas no método das ordenadas discretas.

Splawski, Ziver e Galliara /53/ aproximaram a equação de transporte de segunda ordem pelo MEF com o método variacional para a discretização da variável espacial e usam uma função ortogonal para aproximação angular.

Novamente Martim e Duderstadt /57/ com outros pesquisadores apresentam a solução da equação de transporte de primeira ordem em uma e duas dimensões constatando que o "efeito de raio" é diminuída com a aplicação do MEF. Neste trabalho, é discutido a solução de problema com dependência temporal, combinando o MEF com outros métodos.

Ziver e Goddard /57/ apresentam um método que usa elemento triangular e retangular para dependência espacial do fluxo angular e expansão em harmônicos esféricos para dependência angular. A solução para equação de transporte multigrupo é baseado na solução da equação de transporte de 2^a ordem de um grupo de um trabalho anterior. Para solução com malhas grandes, emprega um esquema de eliminação direta e para malhas finas um esquema iterativo. Faz estudos de problemas de "efeito de raio", "streaming", problema celular de um reator tipo PWR e problemas de blindagens. Os trabalhos mais recentes da aplicação do MEF em física de reatores são voltadas para o cálculo de blindagens. Além dos citados neste capítulo, vários trabalhos foram apresentados no seminário sobre a aplicação do MEF em física da radiação /57/, em 1981.

Nesta revisão bibliográfica não constam todos os trabalhos publicados sobre a aplicação do MEF. Apenas os princi-

país até o ano de 1981, para se ter uma idéia do estágio das pesquisas do MEF em física de reatores. Salienta-se que existem vários trabalhos, nos quais se tem o estudo e aplicação do MEF em conjunção com outras técnicas, como, por exemplo, o método de síntese.

CAPÍTULO III

O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS (GERAL)

O MEF é uma técnica numérica que permite a obtenção de soluções aproximadas de problemas de valor no contorno descritos pela equação do tipo

$$L_{op} U(\underline{r}) = f(\underline{r}) \quad , \quad \underline{r} \in \Omega \quad , \quad (3.1)$$

onde L_{op} é um operador diferencial, U a variável dependente (uma função definida sobre um domínio Ω) das variáveis independentes definidas pelo vetor $\underline{r} \in \Omega$ e $f(\underline{r})$ uma função conhecida. A equação (3.1) válida em um domínio Ω , ilustrado na fig. 3.1, (que pode ser volume, área etc) junto com as condições de contorno do tipo:

$$\alpha(\underline{n} \cdot \nabla U(\underline{r})) + \beta U(\underline{r}) = g(\underline{r}), \quad \underline{r} \in \partial\Omega \quad , \quad (3.2)$$

onde $\partial\Omega$ representa o contorno do domínio Ω , definem um problema de valor no contorno. Na equação (3.2) ∇ é o operador gradiente \underline{n} representa o vetor normal à superfície, $g(\underline{r})$ uma função especificada, α e β são parâmetros especificados cujos valores determinam o tipo da condição de contorno em cada caso. Assim para $\alpha = 0$ e $\beta = 1$ a equação (3.2) torna-se $U(\underline{r}) = g(\underline{r})$ em $\partial\Omega$, a qual é conhecida como condição de contorno de Dirichlet; e para $\beta = 0$ a equação (3.2) representa a condição de contorno de Neuman /41/.

Como exemplos de problemas que podem ser formulados pelas equações do tipo da (3.1) e (3.2) citam-se as da teoria de difusão de nêutrons representadas pela equação de difusão, e também a equação de transferência de calor, dentre outras.

Para a solução do problema, necessita-se do cálculo da função $U(\underline{r})$ que pode ser uma quantidade escalar ou pode repre-

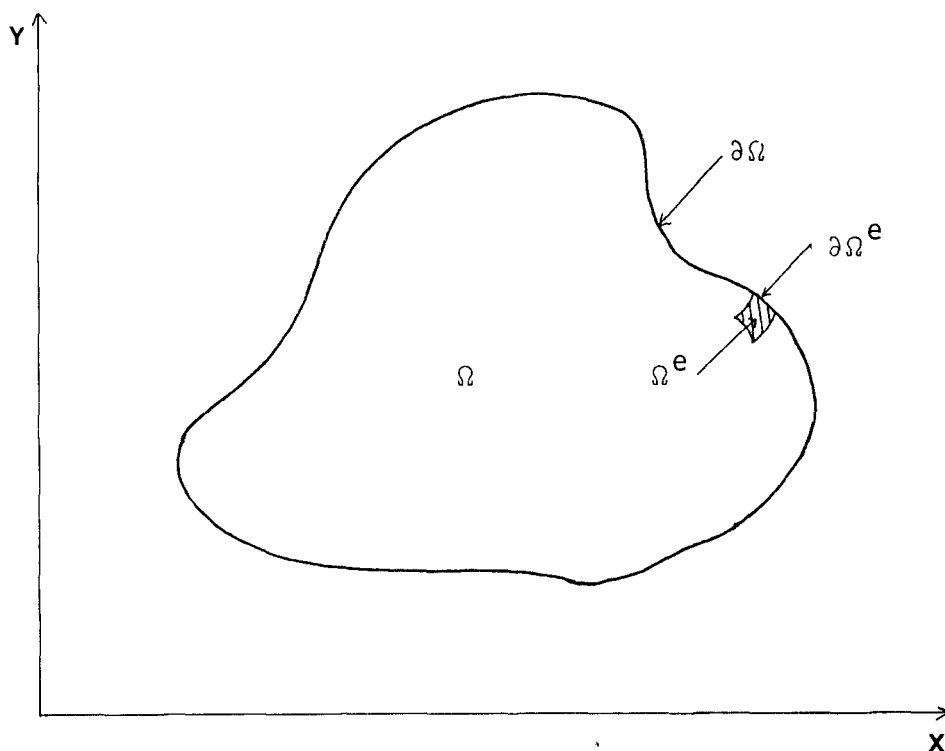


Fig.3.1 - Ilustração do domínio do problema (Ω) e seu contorno ($\partial\Omega$), domínio do elemento (Ω^e) e seu contorno ($\partial\Omega^e$), em duas dimensões (X-Y).

sentar um vetor de várias variáveis. No primeiro caso seria uma equação simples e no segundo caso um conjunto de equações.

O MEF consiste basicamente na divisão do domínio do problema (Ω) em subdomínios, chamados elementos (Ω^e) (fig.(3.1)) e da aproximação da solução por funções contínuas por partes. Assim, tem-se para $U(\underline{r}) \approx \bar{U}(\underline{r})$, onde $\bar{U}(\underline{r})$ é representado por

$$\bar{U}(\underline{r}) = \sum_{i=1}^n a_i \mu_i \quad , \quad (3.3)$$

onde μ_i são as funções base contínuas, em termos das variáveis independentes (por ex. r, x, y , etc.), definidas localmente no subdomínio (Ω^e), e a_i são os parâmetros incógnitas a serem determinados. Particularmente, para as funções base $\mu_i(r)$, onde $\mu_i = 1$ se \underline{r} é a variável independente correspondente ao nó i do elemento e $\mu_i = 0$ no caso contrário a_i é o valor nodal de U .

A aplicação do MEF, para a solução do problema, é feita tratando o problema original, que consiste de equações diferenciais, numa forma integral equivalente,

$$I = \int_{\Omega} F d\Omega + \int_{\partial\Omega} H d(\partial\Omega) = 0, \quad (3.4)$$

onde F e H são funções, combinação de funções ou operadores integráveis no domínio (Ω) do problema e no seu contorno ($\partial\Omega$) respectivamente. Essa forma integral permitirá a aproximação ser realizada elemento por elemento, e obtenção da solução para todo o sistema como a somatória sobre os elementos /58/, ou seja

$$\int_{\Omega} F d\Omega + \int_{\partial\Omega} H d(\partial\Omega) = \sum_e \left[\int_{\Omega^e} F d\Omega^e + \int_{\partial\Omega^e} H d(\partial\Omega^e) \right] \quad (3.5)$$

As duas técnicas principais para a obtenção da aproximação em tais formas integrais são a variacional e a técnica dos resíduos ponderados /12/.

3.1. Técnica Variacional

Nesta técnica a forma integral (eq. (3.4)) correspondente é denominada funcional. Nesta formulação necessita-se calcular a função (ou funções) incógnita (s) que extremize um funcional associado a equação diferencial. Tal procedimento é equivalente a solucionar a equação diferencial ou seja, a função que extremiza o funcional é a solução da equação diferencial (apêndice A).

Assim na eq. (3.4) F e H são funções da variável dependente $U(\underline{r})$, onde se aproxima $U(\underline{r}) \approx \bar{U}(\underline{r})$. Para um elemento (e) a forma integral pode ser expressa como

$$I^e = \int_{\Omega^e} F d\Omega^e + \int_{\partial\Omega^e} H d(\partial\Omega^e), \quad (3.6)$$

portanto

$$I = \sum_e I^e \quad . \quad (3.7)$$

A solução do problema é a função $\bar{U}(\underline{r})$, onde para um elemento (e)

$$\bar{U}^e(\underline{r}) = \sum_i a_i \mu_i \quad , \quad (3.8)$$

de tal modo que pelo princípio variacional deve-se ter

$$\delta I = 0 \quad . \quad (3.9)$$

A eq. (3.9) representa um conjunto de equações simultâneas das quais podem-se obter os parâmetros a_i .

3.2. Técnica dos Resíduos Ponderados

A técnica dos resíduos ponderados é um procedimento de derivação direta da equação diferencial a ser resolvida. Assumindo-se um comportamento o mais próximo possível do comportamento real para a variável dependente, isto é, $U(\underline{r}) \approx \bar{U}(\underline{r})$ conforme eq. (3.3), obtêm-se um erro de aproximação ou resíduo (R) ou seja

$$L_{op} \bar{U}(\underline{r}) - f(\underline{r}) = R \neq 0 \quad . \quad (3.2.1)$$

A técnica consiste em impor que esse resíduo se anule, em média, sobre todo o domínio da solução. Então deve-se ter

$$\int_{\Omega} \{ (w L_{op} \bar{U}(\underline{r}) - w f(\underline{r})) \} d\Omega + \int_{\partial\Omega} w \{ \alpha(\underline{n} \cdot \nabla \bar{U}(\underline{r}) + \beta \bar{U}(\underline{r}) - g(\underline{r})) \} d(\partial\Omega) = 0 \quad , \quad (3.2.2)$$

onde w é chamada função peso ou função ponderação.

Conforme a escolha da função ponderação (w) tem-se os vários tipos do método dos resíduos ponderados /58/. Particularmente, para a função ponderação igual à função de aproximação a técnica dos resíduos ponderados é chamada de técnica de Galerkin.

A eq. (3.2.2) é do tipo da equação integral (3.4) e é chamada forma fraca da equação (3.2.1).

Aplicando o MEF, o domínio Ω é subdividido em elementos com seus domínios Ω^e , sendo a eq. (3.2.2) expressa na forma

$$\sum_e \left\{ \int_{\Omega^e} \{w L_{op} \bar{U}(\underline{r}) - w f(\underline{r})\} d\Omega^e + \int_{\partial\Omega^e} w \{\alpha(\underline{n} \cdot \nabla \bar{U}(\underline{r}) + \beta \bar{U}(\underline{r}) - g(\underline{r}))\} d(\partial\Omega^e) \right\} = 0 \quad (3.2.3)$$

onde $\bar{U}(\underline{r})$ é definida sobre Ω^e , como em (3.8).

Escolhendo-se as funções ponderação, w , em número tal que estas sejam iguais as dos parâmetros incógnitas a_i , pode-se então derivar um sistema de equações algébricas lineares, para esses parâmetros, o qual pode então ser solucionado pelas técnicas numéricas usuais.

CAPÍTULO IV

APLICAÇÃO DO MEF EM PROBLEMAS DE FÍSICA DE
REACTORES

Neste capítulo é desenvolvido o método dos elementos finitos aplicado à equação de difusão de nêutrons em estado estacionário, utilizando para esse fim a técnica variacional e a técnica dos resíduos ponderados. Particularmente, utiliza-se a técnica variacional e a dos resíduos ponderados na solução da equação de difusão em geometria plana unidimensional, e a técnica dos resíduos ponderados para geometria plana bidimensional (X-Y). Neste último caso será tratada a equação de difusão dependente da energia, sendo essa variável aproximada pelo método de multigrupo /11 /.

Y

A equação fundamental para análise de criticalidade, cálculo de distribuição espacial do fluxo de nêutrons e demais parâmetros essenciais para o projeto de reatores nucleares, é a chamada equação de transporte /11/, ou equação de Boltzmann. Pela complexidade, a equação de transporte, pode ser resolvida com exatidão em um número restrito de casos, os quais usualmente são idealizados, e não retratam a realidade física. Portanto, para propósitos práticos, utilizam-se várias aproximações com o objetivo de se obter soluções numéricas por procedimentos computacionais. Uma das aproximações obtida pela simplificação da teoria de transporte é a teoria de difusão, representada por uma equação denominada equação de difusão, dependente da energia, a qual é amplamente usada na descrição da distribuição neutrônica em reatores nucleares.

A equação de difusão é essencialmente uma equação de balanço da população de nêutrons num elemento de volume diferencial, sendo que a aproximação usada, consiste em impor-se uma direção preferencial à corrente líquida de nêutrons, pela lei de Fick, expressa por $J = -D\nabla\phi$, ou seja, a corrente líquida tem a direção contrária a do gradiente do fluxo. A constan-

de proporcionalidade D é chamada coeficiente de difusão /31/.

Não é prático em cálculo de reatores tratar a energia do nêutron como uma variável contínua. Usualmente, faz-se a aproximação em multigrupo, onde a faixa de energia de interesse é dividida em um número finito de grupos de energia discretos*, como ilustrado na fig. (4.1) /7/.

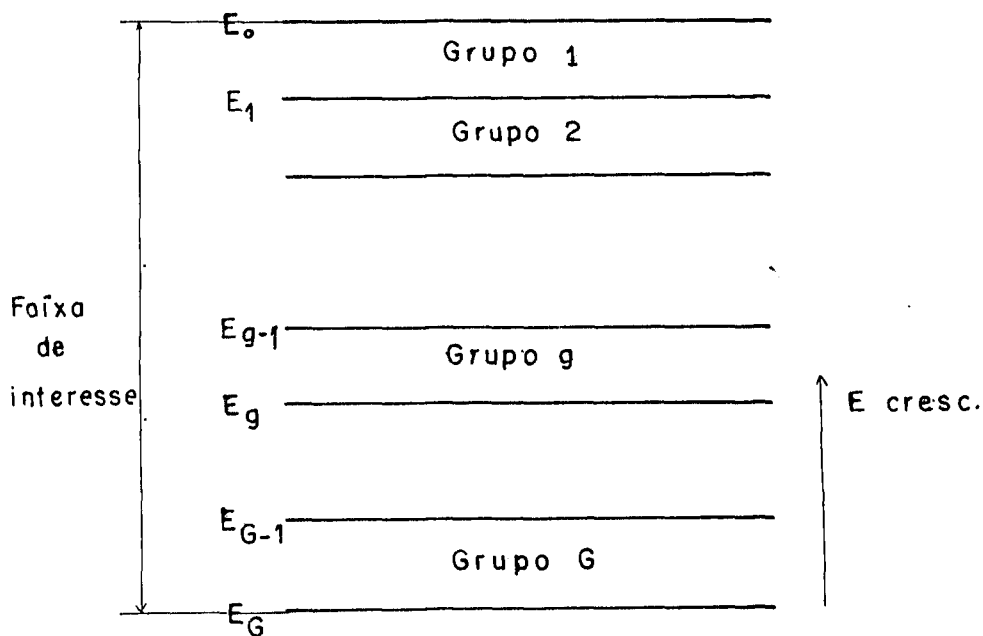


Fig. 4.1- Ilustração da estrutura de multigrupo de energia.

Neste tratamento, os grupos discretos de energia são definidos sobre um intervalo de interesse que tem E_0 como limite superior e E_G como limite inferior. Dentro desse intervalo define-se a estrutura de multigrupo, onde ao índice g associa-se a energia E_g como limite superior e E_{g-1} como limite inferior.

* Em cálculos de multigrupo é frequente o uso da variável letargia (μ) que é definido como $\mu = \ln \frac{E_0}{E}$ onde E_0 é a máxima energia do nêutron.

Assim a partir do fluxo dependente da posição e energia, $\phi(\underline{r}, E)$, do sistema obtêm-se um fluxo de grupo $\phi_g(\underline{r})$ definido por

$$\phi_g(\underline{r}) = \int_{E_{g-1}}^{E_g} \phi(\underline{r}, E) dE ,$$

que é o fluxo de neutrons do grupo g . As constantes nucleares de cada grupo (seções de choque, coeficiente de difusão, etc.) são consideradas como valores médios destas constantes, devidamente ponderadas no respectivo grupo de energia.

4.1. A Equação de Difusão

A equação de difusão em estado estacionário é o balanço de nêutrons num elemento de volume diferencial, ou seja

$$- \left[\begin{array}{l} \text{Fuga do} \\ \text{grupo } g \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{absorção do} \\ \text{grupo } g \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{espalha-} \\ \text{mento p/} \\ \text{fora de } g \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{espalha-} \\ \text{mento p/} \\ \text{dentro de } g \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{produção} \\ \text{no grupo} \\ g \end{array} \right] = 0,$$

(I) (II) (III) (IV) (V)

ou em termos das constantes de multigrupo, a equação de balanço acima pode ser expressa como:

$$- \nabla \cdot \left[D_g(\underline{r}) \nabla \phi_g(\underline{r}) \right] - \Sigma_g^T(\underline{r}) \phi_g(\underline{r}) + \sum_{h=1}^G \Sigma_{h \rightarrow g}^S(\underline{r}) \phi_h(\underline{r}) + S_g(\underline{r}) = 0 ,$$

(I) (II+III) (IV) (4.1.1)

(V)

onde o termo (I) representa o termo de fuga, e sendo $D_g(\underline{r})$ o coeficiente de difusão do grupo g , $\phi_g(\underline{r})$ o fluxo de nêutrons do grupo g e ∇ operador gradiente. O termo (II+III) representa a taxa total de interação de nêutrons com $\Sigma_g^T = \Sigma_g^a + \Sigma_g^S$ sendo a seção de choque total de nêutrons do grupo g . O termo (IV) é o termo de espalhamento de nêutrons de outros grupos h para dentro do grupo g , com $\Sigma_{h \rightarrow g}^S$ a seção de choque de espalhamento de nêutrons de qualquer grupo h para o grupo g , inclusive, os que são espalhados e permanecem no mesmo grupo ou $h=g$. O termo (V) descreve a taxa com que os nêutrons são produzidos no grupo g , isto é, a taxa com que nêutrons com energia no grupo g são gerados como resultado das fissões induzidas por nêutrons de todas as energias, e das possíveis fontes externas. Mais explicitamente,

$$S_g(\underline{r}) = \frac{\chi_g}{K} \sum_{h=1}^G \nu_h \Sigma_h^f(\underline{r}) \phi_h(\underline{r}) + S_g^{ext}(\underline{r}) \quad (4.1.2)$$

onde:

- χ_g indica a probabilidade de um nêutron de fissão ser emitido no grupo g ,
- K é o fator de multiplicação efetivo, expressando a taxa do número de nêutrons de fissão em duas gerações sucessivas,
- ν_h é o número médio de nêutrons de fissão produzidos por fissão causada por nêutrons de energia h ,
- Σ_h^f é a seção de choque de fissão do grupo h , e
- S_g^{ext} a fonte externa de nêutrons no grupo g .

4.2. Técnica Variacional

Conforme discutido no capítulo III, a técnica variacional pode ser usada para a derivação da forma integral equivalente de uma dada equação diferencial (apêndice A). Desta forma partindo da equação de difusão*

$$-\nabla \cdot D(\underline{r}) \nabla \phi(\underline{r}) + \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) = S(\underline{r}) \quad , \quad \underline{r} \in \Omega \quad , \quad (4.2.1)$$

com as condições de contorno**

$$\phi(\underline{r}) = 0 \quad , \quad \underline{r} \in \partial\Omega \quad (4.2.1a)$$

e/ou

$$\frac{\partial}{\partial n} \phi(\underline{r}) = 0 \quad , \quad \underline{r} \in \partial\Omega \quad (4.2.1b)$$

onde todos os símbolos foram definidos anteriormente e eliminou-se o subscrito g , referente ao grupo de energia. Com essas considerações o funcional equivalente será dada por / 8 /

$$I(r, \phi, \phi') = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{ -D(\underline{r}) [\nabla \phi(\underline{r})]^2 - \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r})^2 + 2S(\underline{r}) \phi(\underline{r}) \} d\Omega \quad , \quad (4.2.3)$$

onde ϕ' representa o gradiente de ϕ .

* Neste capítulo discute-se apenas a equação a um grupo de energia, o que é justificável, na medida em que as soluções das equações multi-grupo podem ser interpretadas como uma sucessão de problemas a um grupo (apêndice B).

** Adota-se nesse trabalho as condições de contorno mais usuais $\phi(\underline{r}) = 0$, $\underline{r} \in \partial\Omega$ onde \underline{r} inclui a distância extrapolada e $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$, proveniente da condição de simetria do reator.

Solucionar a equação de difusão na forma diferencial, equação (4.2.1), é equivalente a extremizar o funcional dado pela equação (4.2.3). Para tal, o domínio Ω é dividido em subdomínio (elementos), Ω^e , e escrevendo o funcional para um elemento (e) tem-se,

$$I = \sum_e I^{(e)} \quad , \quad (4.2.4)$$

onde $I^{(e)}$ significa que a integral deve ser efetuada apenas no subdomínio (elemento) Ω^e . O MEF consiste então, em aproximar o fluxo $\phi(\underline{r})$ por

$$\phi(\underline{r}) = \sum_i \phi_i \mu_i(\underline{r}) \quad , \quad (4.2.5)$$

onde $\mu_i(\underline{r})$ são as funções base, sendo definidas usualmente de tal maneira que

$$\mu_i(\underline{r}_j) = \begin{cases} 1 & , i = j \\ 0 & , i \neq j \end{cases} \quad (4.2.6)$$

ou seja a função base é unitária quando a variável \underline{r} coincide com os pontos nodais (pontos pertencentes às fronteiras dos elementos), e desta forma ϕ_i é o valor de $\phi(\underline{r})$ nesses pontos nodais. Desta forma, com esta aproximação, o funcional I fica sendo função dos valores nodais ϕ_i , e portanto para extremizá-lo, deve-se ter

$$\frac{\partial I}{\partial \phi_i} = 0 \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (4.2.7)$$

obtendo-se então um conjunto de equações lineares, para os valores ϕ_i .

Com o objetivo de exemplificar o MEF com a técnica

variacional; seja o desenvolvimento acima discutido, aplicado ao caso de geometria unidimensional (Fig. (4.2.1)). Nesta caso, I^e é dado por

$$I^e(x, \phi, \phi') = \frac{1}{2} \int_{x_i}^{x_j} \left\{ -D(x) \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \sum_a(x) [\phi(x)]^2 + 2S(x)\phi(x) \right\} dx, \quad (4.2.8)$$

onde x_i e x_j são pontos adjacentes ao elemento (e).

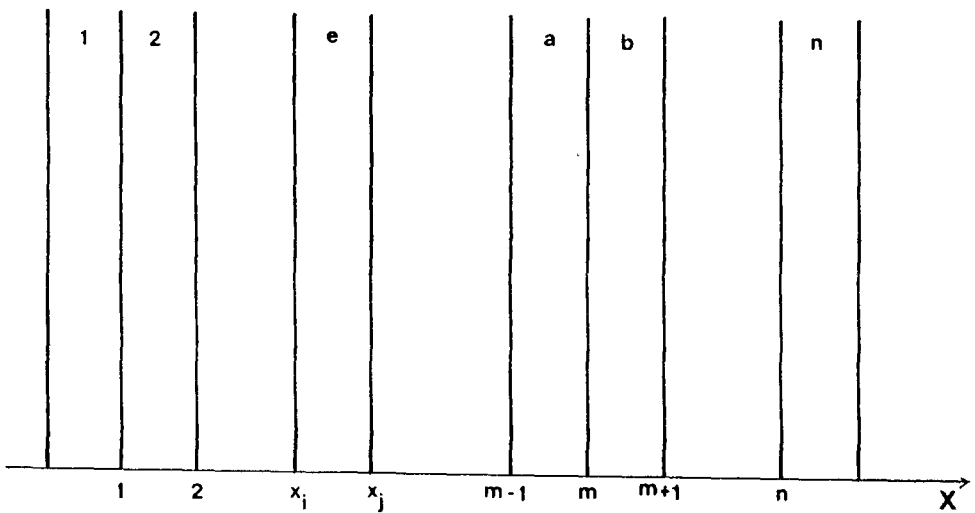


Fig. 4.2.1 - Ilustração da geometria unidimensional com os elementos.

Particularmente, seja a função base μ_i uma função linear e desta forma o fluxo para um elemento será expresso por

$$\phi^{(e)}(x) = \frac{\phi_i x_j - \phi_j x_i}{x_j - x_i} + \frac{\phi_j - \phi_i}{x_j - x_i} x, \quad x_i < x < x_j \quad (4.2.9)$$

e conforme já discutido, $\phi_i = \phi(x_i)$ e $\phi_j = \phi(x_j)$, os valores do fluxo nos n̄s adjacentes ao elemento. Desta forma pelo princípio variacional

$$\frac{\partial I}{\partial \phi_m} = 0 \quad , \quad m = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (4.2.10)$$

ou

$$\frac{\partial I}{\partial \phi_m} = \sum_e \frac{\partial I^e}{\partial \phi_m} = 0 + 0 + \dots + \frac{\partial I^{(a)}}{\partial \phi_m} + \frac{\partial I^{(b)}}{\partial \phi_m} + 0 + \dots = 0 \quad , \quad (4.2.11)$$

onde \underline{a} e \underline{b} referem-se a elementos \bar{a} esquerda e direita, respectivamente, do n̄ \underline{m} (Fig. 4.2.1). Portanto pela eq. (4.2.8) e (4.2.9) obtêm-se:

$$\frac{\partial I^{(a)}}{\partial \phi_m} = - \frac{D^{(a)} (\phi_m - \phi_{m-1})}{\Delta x} - \frac{\Sigma_a^{(a)} \Delta x}{6} (\phi_{m-1} + 2\phi_m) + \frac{S^{(a)} \Delta x}{2} \quad , \quad (4.2.12a)$$

e

$$\frac{\partial I^{(b)}}{\partial \phi_m} = \frac{D^{(b)} (\phi_{m+1} - \phi_m)}{\Delta x} - \frac{\Sigma_a^{(b)} \Delta x}{6} (2\phi_m + \phi_{m+1}) + \frac{S^{(b)} \Delta x}{2} \quad , \quad (4.2.12b)$$

onde Δx é a largura do elemento, considerada constante.

Da equação (4.2.11) resulta

$$\begin{aligned}
& \phi_{m-1} \left\{ \frac{D(a)}{\Delta x} - \frac{\Sigma_a^{(a)} \Delta x}{6} \right\} + \\
& \phi_m \left\{ \frac{-D(a) - D(b)}{\Delta x} + \frac{-\Sigma_a^{(a)} - \Sigma_a^{(b)}}{3} \Delta x \right\} + \\
& \phi_{m+1} \left\{ \frac{D(b)}{\Delta x} - \frac{\Sigma_a^{(b)} \Delta x}{6} \right\} + \frac{\Delta x}{2} (S^{(a)} + S^{(b)}) = 0
\end{aligned} \tag{4.2.13}$$

que representa o sistema de equações algébricas simultâneas, que resolvidas por um método apropriado fornece os valores das variáveis incógnitas ϕ_m , $m = 1, 2, \dots, n$ e portanto a solução do problema.

4.3. Técnica dos Resíduos Ponderados (aproximação de Galerkin)

Para a derivação da forma integral equivalente à equação de difusão, a técnica dos resíduos ponderados multiplica a equação (4.2.1) por uma função ponderação $w(\underline{r})$ e integra no domínio Ω para obter-se a forma fraca da equação de difusão, ou seja

$$- \int_{\Omega} w(\underline{r}) D(\underline{r}) \nabla^2 \phi(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} w(\underline{r}) \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) d\Omega = \int_{\Omega} w(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega . \tag{4.3.1}$$

ou usando a identidade de Green para o primeiro termo,

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} D(\underline{r}) \nabla \phi(\underline{r}) \nabla w(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} w(\underline{r}) \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) d\Omega = \\
& \int_{\Omega} w(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega - \int_{\partial\Omega} w(\underline{r}) D(\underline{r}) \frac{\partial \phi}{\partial n} d(\partial\Omega),
\end{aligned} \tag{4.3.2}$$

onde a integral no contorno $\partial\Omega$ se anula, na medida em que, neste trabalho, restringiu-se a condição ϕ ou $\frac{\partial\phi}{\partial n}$ nulos no contorno. Com essas considerações a forma fraca pode ser escrita como

$$\int_{\Omega} D(\underline{r}) \nabla \phi(\underline{r}) \nabla w(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} w(\underline{r}) \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) d\Omega = \int_{\Omega} w(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega . \quad (4.3.3)$$

Aproximando o fluxo de nêutrons por

$$\phi(\underline{r}) = \sum_i a_i \mu_i(\underline{r}) , \quad (4.3.4)$$

onde a_i são os parâmetros a determinar e $\mu_i(\underline{r})$ são as funções bases, tem-se

$$\sum_i a_i \left\{ \int_{\Omega} D(\underline{r}) \nabla \mu_i(\underline{r}) \nabla w(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} \Sigma_a(\underline{r}) w(\underline{r}) \mu_i(\underline{r}) d\Omega \right\} = \int_{\Omega} w(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega . \quad (4.3.5)$$

Pelo MEF, dividindo o domínio Ω em subdomínios ou elementos (Ω^e , $e = 1, 2, \dots, n$), e definindo o fluxo para cada elemento como

$$\phi^{(e)}(\underline{r}) = \sum_i a_i \mu_i(\underline{r}) , \quad (4.3.6)$$

sendo os coeficientes a_i os valores nodais de $\phi^{(e)}(\underline{r})$, isto é, $a_i = \phi_i$ (valores do fluxo quando \underline{r} é a coordenada dos vértices do elemento (e)), a equação (4.3.4) pode ser interpretada como a somatória dos fluxos em cada elemento.

Para determinar os coeficientes a_i , a técnica dos resíduos ponderados com a aproximação de Galerkin toma as funções ponderação como sendo iguais às funções bases ou $w(\underline{r}) = \mu_j(\underline{r})$.

Assim a eq. (4.3.5) torna-se:

$$\sum_i \phi_i \left\{ \int_{\Omega^e} D(\underline{r}) \nabla \mu_i(\underline{r}) \nabla \mu_j(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega^e} \Sigma_a(\underline{r}) \mu_i(\underline{r}) \mu_j(\underline{r}) d\Omega \right\} \\ = \int_{\Omega^e} \mu_j(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega \quad , \quad j = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (4.3.7)$$

que constituem um conjunto de equações algébricas lineares para os valores nodais ϕ_i . Desta forma, usando-se uma técnica numérica conveniente esses coeficientes podem ser determinados.

Como ilustração do formalismo desenvolvido, seja o caso particular de geometria bidimensional (X-Y) com a equação de difusão multigrupo na forma

$$-\nabla \cdot [D_g(x,y) \nabla \phi_g(x,y)] + \Sigma_g^R(x,y) \phi_g(x,y) = \\ \sum_{h=1}^{g-1} \Sigma_{h \rightarrow g}^S(x,y) \phi_h(x,y) + \frac{\chi_g}{K} \sum_{h=1}^G \nu_h \Sigma_h^f(x,y) \phi_h(x,y) + S_g^{\text{ext}}(x,y) \\ g = 1, 2, \dots, G \quad (4.3.8)$$

onde Σ_g^R é a seção de choque de remoção do grupo g , isto é, $\Sigma_g^R = \Sigma_g^T - \Sigma_{g \rightarrow g}^S$, e os demais termos tem a interpretação discutidas no início desse capítulo e sendo as condições de contorno as mesmas da seção 4.2. Particularmente, considerando-se $S_g^{\text{ext}}(x,y) = 0$ e usando o formalismo apresentado anteriormente, pode-se obter a forma fraca da eq. (4.3.8) ou

$$\begin{aligned}
 & \int_0^a \int_0^b D_g(x,y) \nabla \phi_g(x,y) \nabla w(x,y) dy dx + \\
 & \int_0^a \int_0^b \Sigma_g^R(x,y) \phi_g(x,y) w(x,y) dy dx \\
 & = \frac{\chi_g}{K} \sum_{h=1}^G v_h \int_0^a \int_0^b \Sigma_h^f(x,y) \phi_h(x,y) w(x,y) dy dx + \\
 & \sum_{h=1}^{g-1} \int_0^a \int_0^b \Sigma_{h \rightarrow g}^s(x,y) \phi_g(x,y) w(x,y) dy dx \\
 & \qquad \qquad \qquad g = 1, 2, \dots, G
 \end{aligned}
 \tag{4.3.9}$$

onde $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}$ e \underline{a} e \underline{b} ilustrados na Fig. 4.3.1.

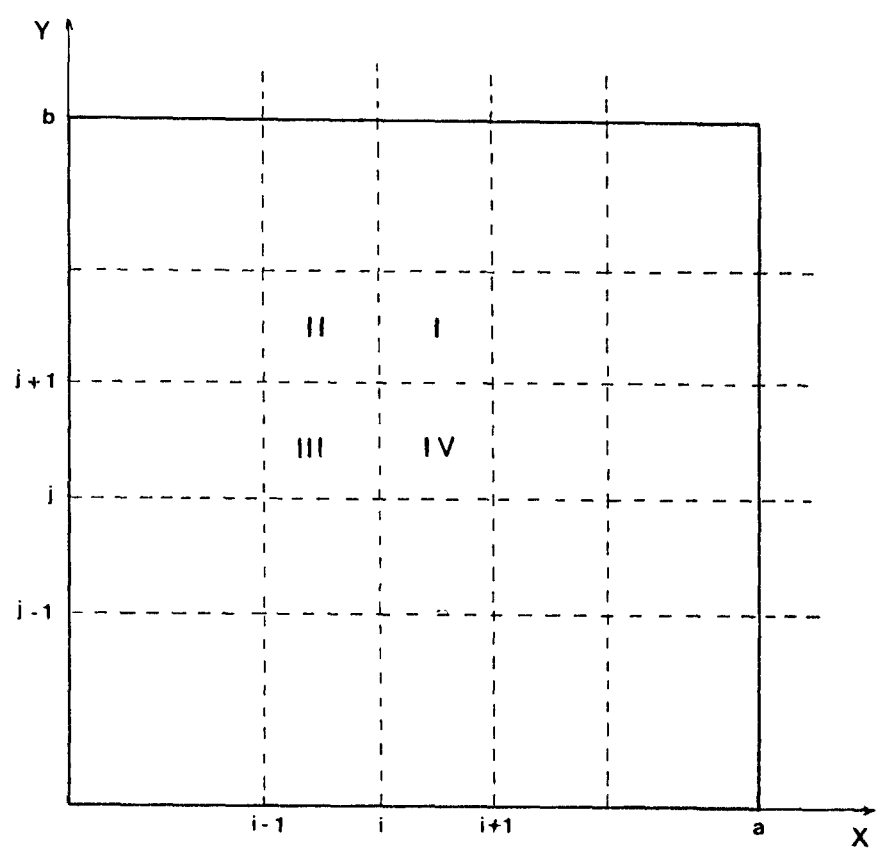


Fig. 4.3.1 - Discretização bidimensional (X-Y)

Dividindo o domínio $0 < x < a$, $0 < y < b$ em elementos e aproximando o fluxo por:

$$\phi_g(x,y) = \sum_i \sum_j \phi_{i,j} \mu_{i,j}(x,y) ,$$

ou

$$\phi_g(x,y) = \sum_i \sum_j \phi_{i,j} \mu_i(x) \mu_j(y) , \quad (4.3.10)$$

onde $\mu_{i,j}(x,y) = \mu_i(x) \mu_j(y)$ são as funções bases, sendo que neste trabalho restringiu-se a funções bilineares /26/ ou seja,

$$\mu_i(x) = \begin{cases} \mu_i^-(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} , & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \mu_i^+(x) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} , & x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (4.3.11a)$$

e

$$\mu_j(y) = \begin{cases} \mu_j^-(y) = \frac{y - y_{j-1}}{y_j - y_{j-1}} , & y_{j-1} \leq y \leq y_j \\ \mu_j^+(y) = \frac{y_{j+1} - y}{y_{j+1} - y_j} , & y_j \leq y \leq y_{j+1} \end{cases} \quad (4.3.11b)$$

ou

$$\mu_{i,j}(x,y) = \begin{cases} \mu_i^+(x) \mu_j^+(y) , & \text{em I} \\ \mu_i^-(x) \mu_j^+(y) , & \text{em II} \\ \mu_i^-(x) \mu_j^-(y) , & \text{em III} \\ \mu_i^+(x) \mu_j^-(y) , & \text{em IV} \end{cases} \quad (4.3.12)$$

onde fora da região especificada, indicada na figura 4.3.1, a função $\mu_{i,j}(x,y)$ se anula.

Escolhendo-se as funções $w(x,y)$ iguais às funções bases, pode-se derivar um conjunto acoplado de sistemas lineares ou

$$\underline{F}_g \underline{\phi}_g + \underline{R}_g \underline{\phi}_g = \frac{1}{K} \chi_g \underline{S} + \sum_{h=1}^{g-1} \underline{E}_{h \rightarrow g} \underline{\phi}_h, \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (4.3.13)$$

onde \underline{F} é a matriz $N \times N$ ($N = n\phi$ de elementos) correspondente ao termo de fuga, podendo ser calculada por

$$F_{k,\ell}^g = \sum_i \sum_j \int_{\Omega^e} D_g^{(e)} \nabla \mu_{ij} \nabla \mu_{k,\ell} d\Omega^e. \quad (4.3.14)$$

\underline{R} , \underline{S} e \underline{E} podem ser obtidas respectivamente por

$$R_{k,\ell}^g = \sum_i \sum_j \int_{\Omega^e} \Sigma_g^{R(e)} \mu_{ij} \mu_{k,\ell} d\Omega^e, \quad (4.3.15)$$

$$S_{k,\ell} = \sum_i \sum_j \int_{\Omega^e} \sum_{h=1}^G v_h \Sigma_h^{f(e)} \phi_h(i,j) \mu_{i,j} \mu_{k,\ell} d\Omega^e, \quad (4.3.16)$$

$$E_{k,\ell}^g = \sum_i \sum_j \int_{\Omega^e} \Sigma_{h \rightarrow g}^{s(e)} \mu_{ij} \mu_{k,\ell} d\Omega^e \quad (4.3.17)$$

onde $k = 1, 2, \dots, n$
 $\ell = 1, 2, \dots, n$

e o significado de cada termo é apresentado no apêndice B.

As matrizes \underline{F} , \underline{R} , \underline{S} e \underline{E} , para geometria plana em duas dimensões, com elementos de forma retangular são do tipo esparsas, com blocos de submatrizes tridiagonais como pode-se observar na figura 4.3.2 para o caso em que se tenha rede 4x4, isto é, 16 elementos.

$\underline{\phi}$ é o vetor incôgnita (1xN) onde N é o número de elementos, sendo dado pela eq.(4.3.13)

X X 0 0	X X 0 0		
X X X 0	X X X 0	0	0
0 X X X	0 X X X		
0 0 X X	0 0 X X		
X X 0 0	X X 0 0	X X 0 0	
X X X 0	X X X 0	X X X 0	0
0 X X X	0 X X X	0 X X X	
0 0 X X	0 0 X X	0 0 X X	
0	X X 0 0	X X 0 0	X X 0 0
	X X X 0	X X X 0	X X X 0
	0 X X X	0 X X X	0 X X X
	0 0 X X	0 0 X X	0 0 X X
0	0	X X 0 0	X X 0 0
		X X X 0	X X X 0
		0 X X X	0 X X X
		0 0 X X	0 0 X X

X - elemento não nulo

0 - elementos nulos

Fig.4.3.2 - Estrutura das matrizes

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi(1,1) \\ \phi(1,2) \\ \vdots \\ \phi(1,J) \\ \phi(2,1) \\ \phi(2,2) \\ \vdots \\ \phi(2,J) \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi(I,1) \\ \phi(I,2) \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi(I,J) \end{pmatrix} \quad (4.3.18)$$

CAPÍTULO V

RESULTADOS NUMÉRICOS

Como mencionado anteriormente um dos objetivos para a execução desse trabalho foi aprender a técnica utilizada para resolver problemas com o MEF. Para esse propósito, além dos problemas em duas dimensões espaciais e multigrupo, foram equacionados e solucionados problemas de uma dimensão em dois grupos de energia com a técnica variacional e a técnica de Galerkin e um problema celular utilizando a técnica variacional.

A seguir serão apresentados os resultados obtidos pelo presente trabalho e os obtidos pelo código CITATION, além dos resultados analíticos para alguns casos, e a diferença relativa entre esses resultados.

V.1. PROBLEMA 1

Título: Cálculo do fator de desvantagem térmica.

Descrição: Este problema consistiu em calcular o fator de desvantagem térmica para uma célula plana (combustível + moderador), o qual é definido por

$$\xi = \frac{a}{\Delta} \frac{\int_a^b \phi_m(x) dx}{\int_0^a \phi_c(x) dx}, \quad (5.1)$$

onde a é a espessura do combustível (c) e $\Delta = b-a$, a espessura do moderador (m), e ϕ_m e ϕ_c são os fluxos nas regiões do moderador e combustível respectivamente. A geometria, bem como as constantes nucleares, são ilustradas na figura 5.1.1

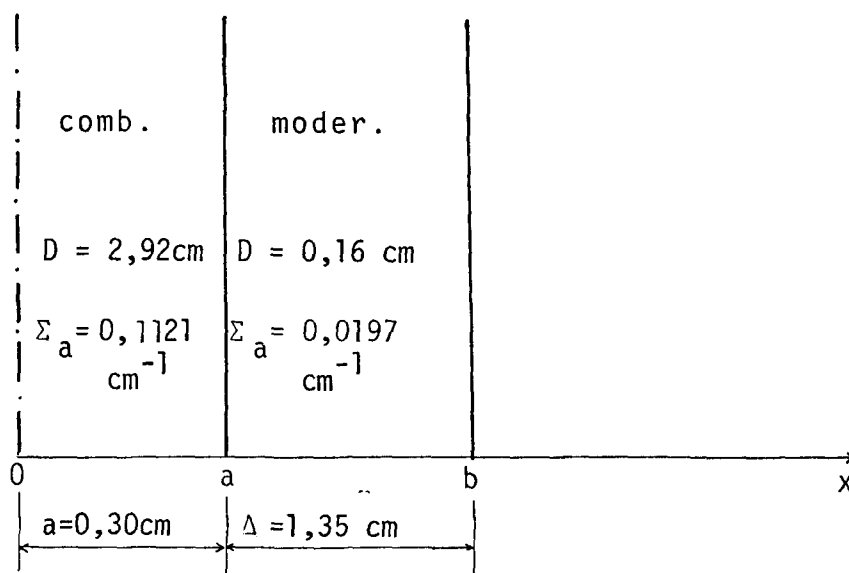


Fig.5.1.1 - Geometria e constantes nucleares para o problema celular.

Resultados : Para a obtenção de ξ eq. (5.1), desenvolveu-se um programa utilizando-se o método dos elementos finitos com a técnica variacional, conforme discutido na seção 4.2, obtendo-se os resultados mostrados na tabela 5.1.1, a qual reporta este parâmetro para diferentes números de elementos. Esses resultados são comparados com o resultado referência obtido pela solução analítica / 31 /

nº de elementos	MEF (ξ)	dif.relat.* %
34	1,0986	0.76
40	1,0994	0.69
60	1,1039	0.28

* O resultado referência foi obtido analiticamente (Ref.analitico = 1.1070)

Tab.5.1.1 - Fator de desvantagem térmica(ξ) do problema 1.

V.2. PROBLEMA 2

Título: Reator tipo placa, duas regiões, dois grupos.

Descrição: Este problema consistiu em calcular a distribuição de fluxos rápido e térmico e o fator de multiplicação (K), para um reator tipo placa com duas regiões: o caroço e o refletor. A geometria, dimensões e as condições de contorno para este problema são ilustrados na fig. 5.2.1 sendo as constantes nucleares para as duas regiões e para dois grupos de energia mostradas na tabela 5.2.1.

Resultados: Para a obtenção da distribuição de fluxo para os dois grupos de energia, e o fator de multiplicação (K), usou-se o método dos elementos finitos com as duas técnicas (variacional e Galerkin) apresentadas no capítulo IV. Na tabela 5.2.2 apresenta-se o fator de multiplicação obtido pela aplicação das duas técnicas, para várias larguras de elementos (L/6, L/12, L/24, L/48) e estes são comparados com os resultados obtidos pelo código CITATION, sendo que o resultado referência adotado é para $\Delta x=L/60$. Os erros relativos são apresentados na tabela 5.2.3. O critério de convergência utilizado para esse problema foi com relação ao auto valor, i.e.,

$$\left| \frac{K^{(n)} - K^{(n-1)}}{K^{(n)}} \right| < \epsilon_1$$

onde ϵ_1 é um valor especificado (10^{-8}) e n indica o número de iteração.

Ainda, em relação ao problema 2, ilustra-se na tabela 5.2.4, para vários pontos do reator, o fluxo térmico normalizado obtido pelo presente trabalho e pelo código CITATION. Para o caso do MEF usou-se 24 elementos e para o CITATION dividiu-se o reator em 60 partes. Na fig. 5.2.2 ilustra-se graficamente o fluxo térmico normalizado para $\Delta x = L/24$, $\Delta x=L/48$

(MEF) e $\Delta x = L/60$ (CITATION). Pelo valor do erro relativo para fator de multiplicação ($< 1\%$) e para o fluxo (da ordem de 1%) os resultados podem ser considerados satisfatórios.

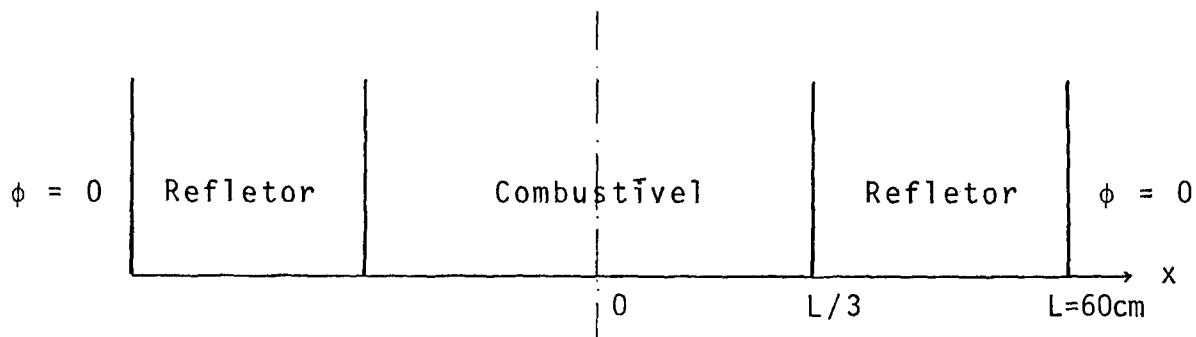


Fig.5.2.1 - Geometria esquemática do reator do problema 2.

	Caroço	Refletor
GRUPO RÁPIDO		
D_1 (cm)	1.5	1.2
Σ_{T1} (cm^{-1})	0.0623	0.101
$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$ (cm^{-1})	0.06	0.1
$\nu \Sigma_{f1}$ (cm^{-1})	0.0	0.0
v_1 (cm/seg)	$1,0 \times 10^8$	
χ_1	1,0	
GRUPO TÉRMICO		
D_2 (cm)	0.4	0.15
Σ_{T2} (cm^{-1})	0.2	0.02
$\nu \Sigma_{f2}$ (cm^{-1})	0.218	0.0
v_2 (cm/seg)	$2,2 \times 10^5$	
χ_2	0.0	

Tab.5.2.1 - Constantes nucleares do problema 2.

Δx	GALERKIN	VARIACIONAL	CITATION
L/6	1.0226	1.0149	-
L/12	1.0215	1.0188	1.02064
L/24	1.0211	1.0198	1.02060
L/48	1.0209	1.0212	-
L/60			1.02083

Tab.5.2.2 - Valores do K_{ef} do problema 2

Δx	GALERKIN	VARIACIONAL
L/6	0.173 %	0.581 %
L/12	0.066 %	0.199 %
L/24	0.026 %	0.101 %
L/48	0.009 %	0.04 %

Tab. 5.2.3 - Erro do K_{ef} deste trabalho em relação ao do CITATION ($K_{ef} = 1,02083$).

x(cm)	MEF	CITATION	Erro relativo (%)
0	1.00	1.00	-
2.5	0.99663	0.99675	0.012
7.5	0.96978	0.97009	0.032
12.5	0.91680	0.91678	-0.002
17.5	0.83912	0.83875	-0.044
22.5	0.73883	0.73797	-0.117
27.5	0.61866	0.61743	-0.199
32.5	0.48282	0.48134	-0.307
37.5	0.37960	0.38036	0.200
42.5	1.0901	1.0728	-1.613
47.5	0.53754	0.52737	-1.928
52.5	0.16733	0.16612	-0.728
57.5	0.03475	0.03486	0.316

Tab. 5.2.4 - Valores de $\phi(x)/\phi(0)$ do problema 2.

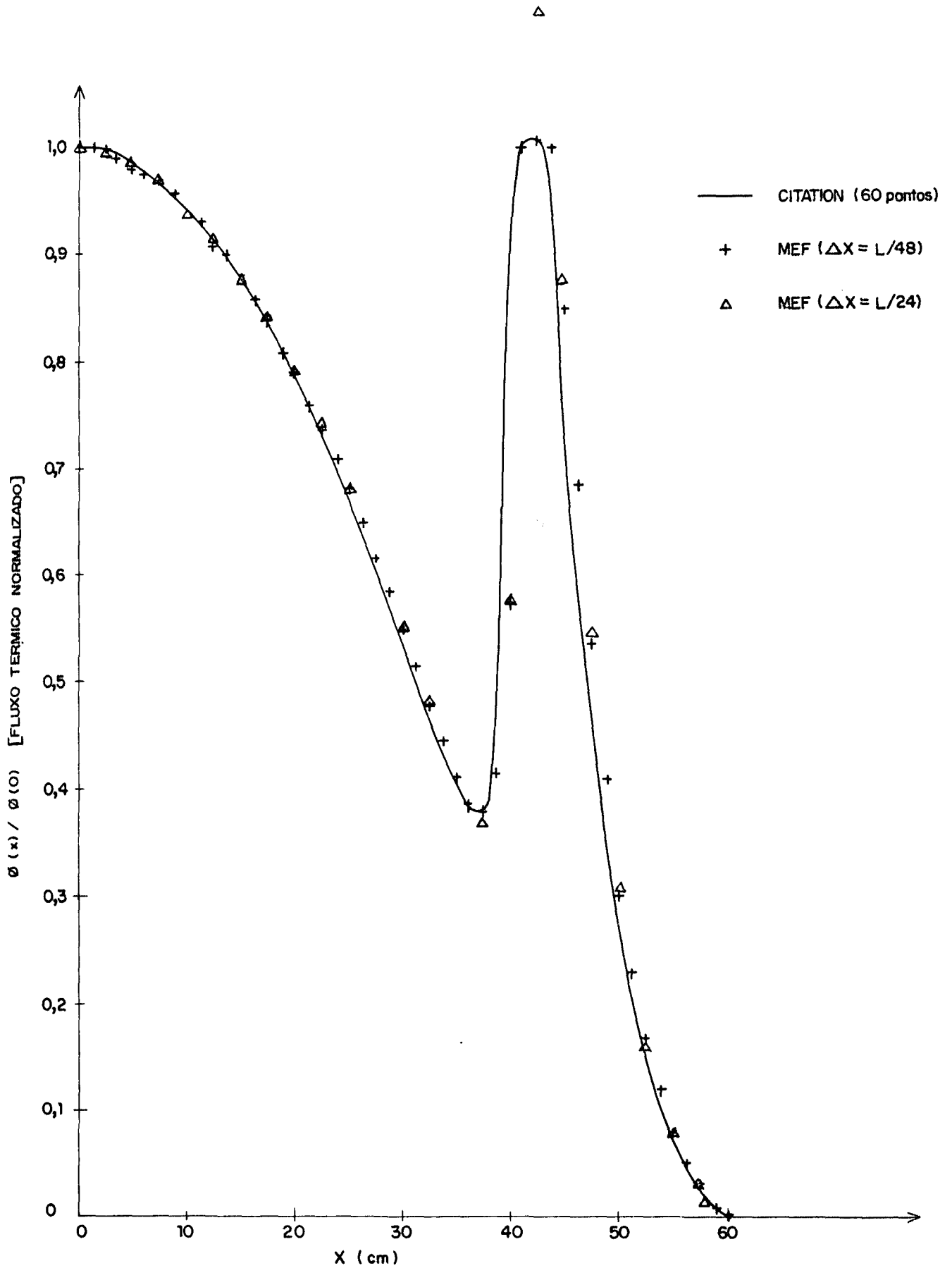


Fig.5.2.2 - Fluxo t̄rmico normalizado do problema 2.

V.3. PROBLEMA 3

Título: Reator com duas regiões (combustível e refletor) em duas dimensões, 2 grupos de energia.

Descrição: Este problema consistiu em calcular as distribuições de fluxos térmicos e rápidos para um reator com duas regiões, em geometria X-Y, com simetria em $x=0$ e $y=0$, conforme ilustrado na figura 5.3.1. As constantes nucleares necessárias são as mesmas do problema 2 (tabela 5.2.1).

Resultados: Para a obtenção dos resultados para a distribuição de fluxo, bem como do fator de multiplicação, usou-se o formalismo discutido na seção 4.3 para a confecção do programa de computador (apêndice B). O reator foi discretizado em (I,J) elementos, sendo que na fig. 5.3.2, exemplifica-se um caso de discretização (8x8). Os valores do fator de multiplicação para diferentes discretizações são apresentadas na tabela 5.3.1 e comparados com o resultado referência obtido pelo CITATION para uma discretização (40x40). A distribuição de potência normalizada é ilustrada na fig. 5.3.3 e comparado com a obtida pelo código CITATION. Além disso os fluxos rápido e térmico na posição $y=15$ cm são ilustrados nas figuras 5.3.4 e 5.3.5 respectivamente.

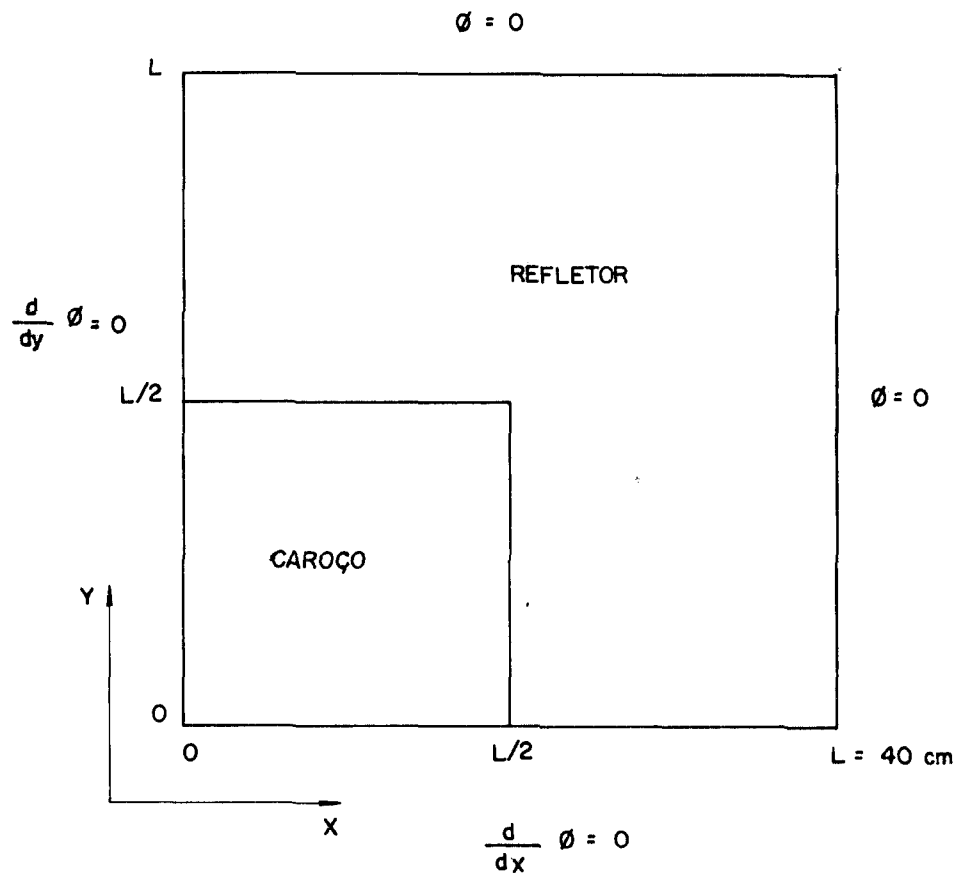


Fig.5.3.1 - Geometria, Dimensões e Condições de Contorno para o problema 3.

2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	2	2	2	2
1	1	1	1	2	2	2	2
1	1	1	1	2	2	2	2
1	1	1	1	2	2	2	2
1	1	1	1	2	2	2	2

Fig. 5.3.2 - Disposição da malha (8x8) do reator do problema 3.

MALHA	MEF	CITATION	ERRO RELATIVO*
4 x 4	0,90488	0,90991	- 0,902%
6 x 6	0,89860	0,89823	- 0,202%
8 x 8	0,89560	-	0,133%
40 x 40	-	0,89679	-

* relativo ao CITATION (40x40)

Tab.5.3.1 - Valores do fator de multiplicação do problema 3.

L/2

			0,44431 0,34646 22,20%
		0,59074 0,71625 -21,25	0,52303 0,50583 3,29
	0,84597 0,91902 -8,63	0,70726 0,81367 -15,04	0,62821 0,57728 8,11
1,0 1,0	0,91985 0,95889 -4,24	0,76928 0,80038 -4,04	0,68880 0,60258 11,88

0

L/2

CITATION MEF Dif.Rel(%)

Fig.5.3.3 - Distribuição de potência normalizada do problema 3.

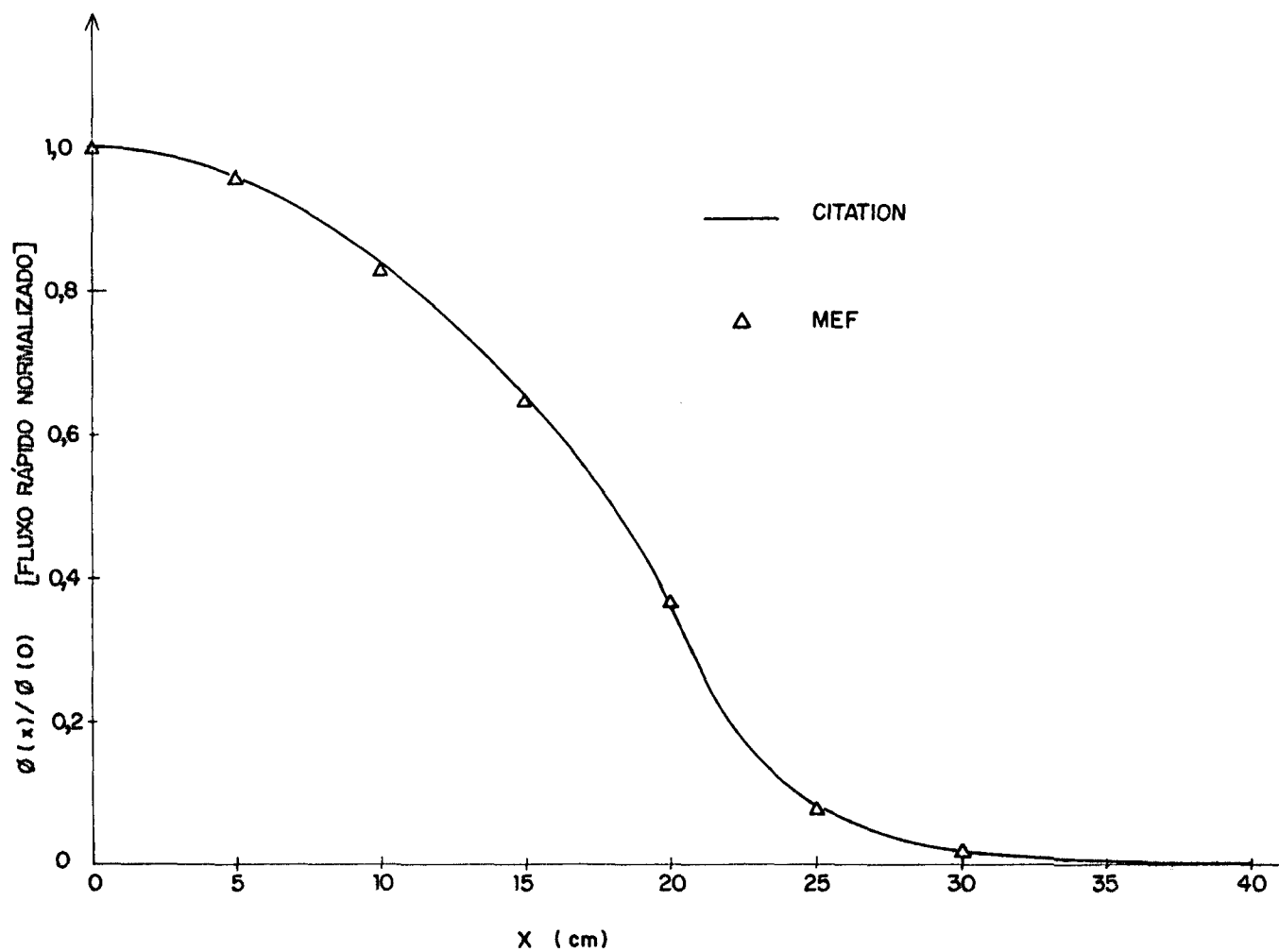


Fig.5.3.4 - Fluxo rápido normalizado do problema 3 na posição $y = 15$ cm.

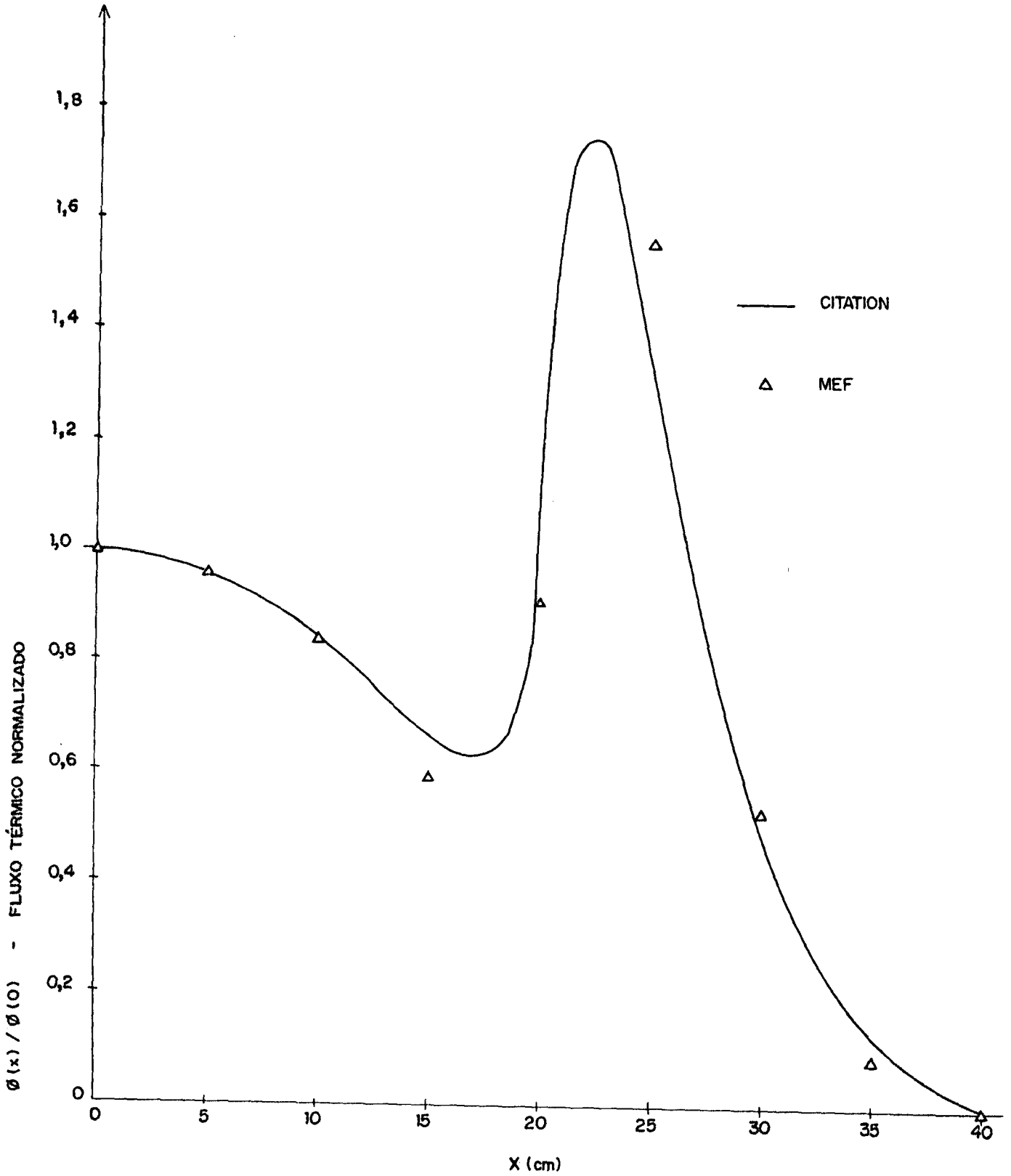


Fig. 5.3. 5 - Fluxo térmico normalizado do problema 3 na posição $y = 15$ cm.

V.4 PROBLEMA 4

Título: Reator ZION-1 em dois grupos de energia e 5 zonas

Descrição: Este problema consistiu em calcular a distribuição de fluxo e fator de multiplicação para o caroço do reator ZION-1, o qual é um reator de potência / 9/, e tem sido usado como "problema padrão" (benchmark) para teste de métodos de cálculo, em dois grupos de energia (têrmico-rápido). O caroço deste reator consiste de 5 zonas, devido as diferenças de enriquecimento dos elementos combustíveis, "baffle," refletor etc. Na figura 5.4.1, ilustram-se as várias zonas deste caroço, e na tabela 5.4.1, as secções de choque homogeneizadas por zona.

Resultados: O mesmo programa usado no problema 3 foi utilizado para se encontrar resultados numéricos para o ZION-1, sendo que na figura 5.4.2, ilustra-se o arranjo ou malhas utilizadas para a entrada no programa. Os valores para o fator de multiplicação são os mostrados na tabela 5.7, junto com os resultados do problema 5 e os obtidos pelo código CITATION. A distribuição de potência normalizada é ilustrada na figura 5.4.3, junto com os resultados do CITATION, e na figura 5.4.4 e 5.4.5, os fluxos rápido e têrmico, ambos na posição $y=78,485$ cm.

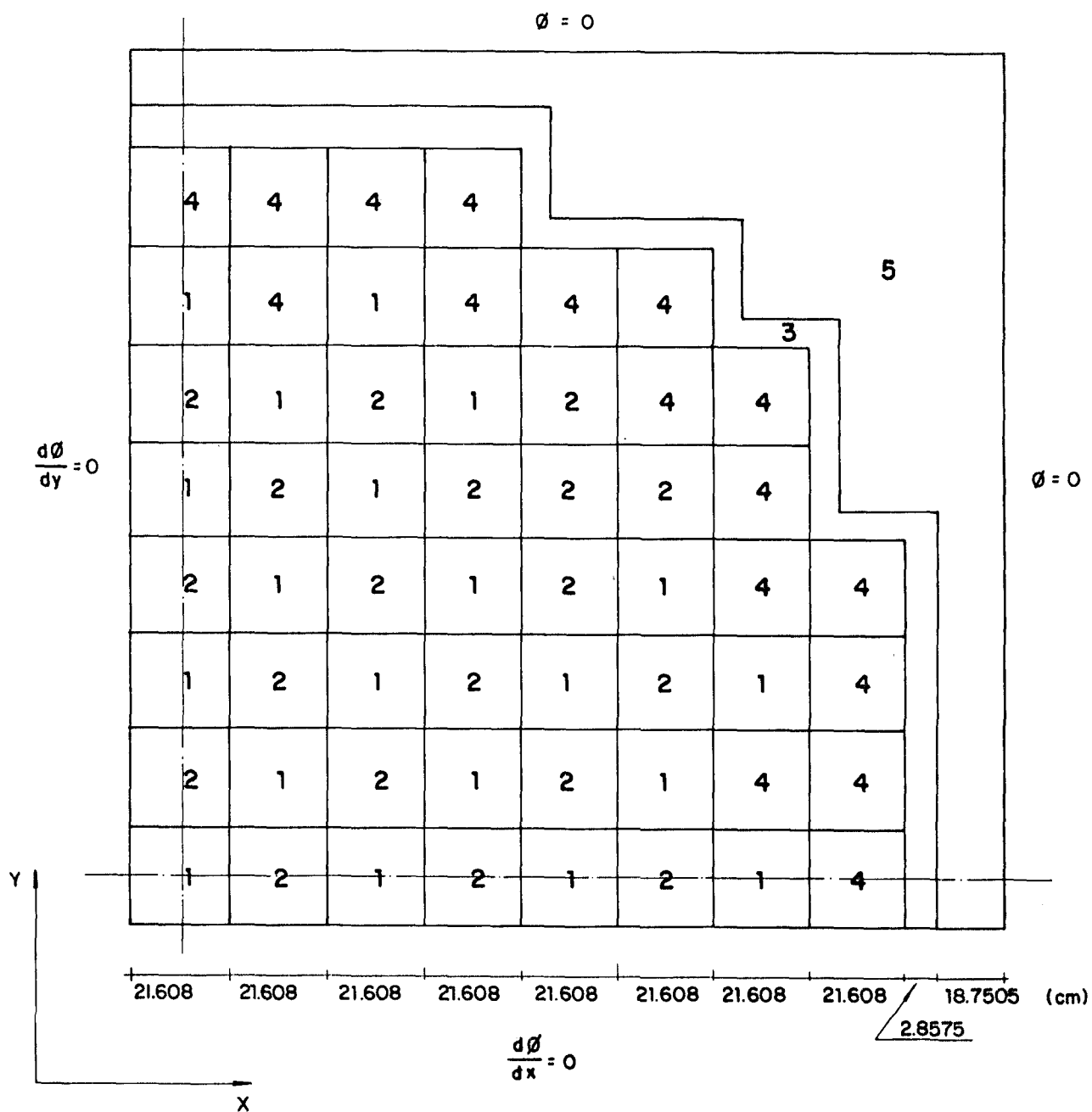


Fig.5.4.1 - Geometria do ZION-1

REGIÃO	GRUPO DE ENERGIA	D (cm)	Σ_R (cm^{-1})	$\nu \Sigma_f$ (cm^{-1})	$\Sigma_{k \rightarrow k+1}^S$ (cm^{-1})	COMPOSIÇÃO
1	1	1.41760	0.02597	0.00536	0.01742	Combustível 2.25%
	2	0.37335	0.06669	0.10433		
2	1	1.41970	0.02576	0.00601	0.01694	Combustível 2.8%
	2	0.37370	0.07606	0.12472		
3	1	1.02130	0.00322	0.0	0.0	"baffle"
	2	0.33548	0.14596	0.0		
4	1	1.38377	0.025164	0.0	0.024241	16.5% aço inox + 83.5% água
	2	0.29745	0.032006	0.0		
5	1	1.45540	0.02950	0.0	0.02903	água
	2	0.28994	0.00949	0.0		

$$X_1 = 1.0 \quad X_2 = 0.0$$

Tab.5.4.1 - Constantes nucleares do ZION-1.

5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	18,7505
3	3	3	3	3	5	5	5	5	5	5	5	5	2,8575
4	4	4	4	3	5	5	5	5	5	5	5	5	18,7505
4	4	4	4	3	3	3	3	5	5	5	5	5	2,8575
1	4	1	4	4	4	4	3	5	5	5	5	5	18,7505
1	4	1	4	4	4	4	3	3	3	5	5	5	2,8575
2	1	2	1	2	2	4	4	4	3	5	5	5	21,608
1	2	1	2	2	2	2	4	4	3	5	5	5	18,7505
1	2	1	2	2	2	2	4	4	3	3	3	5	2,8575
2	1	2	1	2	2	1	4	4	4	4	3	5	21,608
1	2	1	2	1	1	2	1	1	4	4	3	5	21,608
2	1	2	1	2	2	1	4	4	4	4	3	5	21,608
1	2	1	2	1	1	2	1	1	4	4	3	5	10,804
10,804	21,608	21,608	21,608	2,8575	18,7505	21,608	2,8575	18,7505	2,8575	18,7505	2,8575	18,7505	

NOTA: As dimensões são em centímetros

Fig.5.4.2 - Arranjo das malhas do ZION-1 para entrada no programa.

					0,5634 0,5191 7,86	0,3612 0,3165 12,38	
				0,7314 0,6417 12,26	0,6412 0,5612 12,48	0,4567 0,4062 11,06	
			0,8696 0,7214 17,04	0,7747 0,7649 1,27	0,6813 0,5493 19,37	0,5179 0,5333 - 2,97	0,3335 0,2996 10,16
		0,9752 0,8174 16,18	0,9193 0,9012 1,97	0,8156 0,6759 17,13	0,7212 0,6890 4,46	0,5696 0,4368 23,31	0,3900 0,3365 13,72
	1,0318 0,8929 13,46	1,0025 0,9878 1,47	0,9442 0,7801 17,38	0,8357 0,7821 6,41	0,7343 0,6091 17,05	0,5919 0,5639 4,73	0,4130 0,3590 13,08
1,00 1,00	1,0331 0,9680 6,3	1,0067 0,8504 15,53	0,9471 0,9515 -0,46	0,8056 0,7650 5,04	0,7446 0,7090 4,78	0,5550 0,5169 6,86	0,4149 0,3683 12,44

CITATION
MEF
Dif.(%)

Fig. 5.4.3 - Distribuição de potência normalizada do ZION-1 (Problema 4)

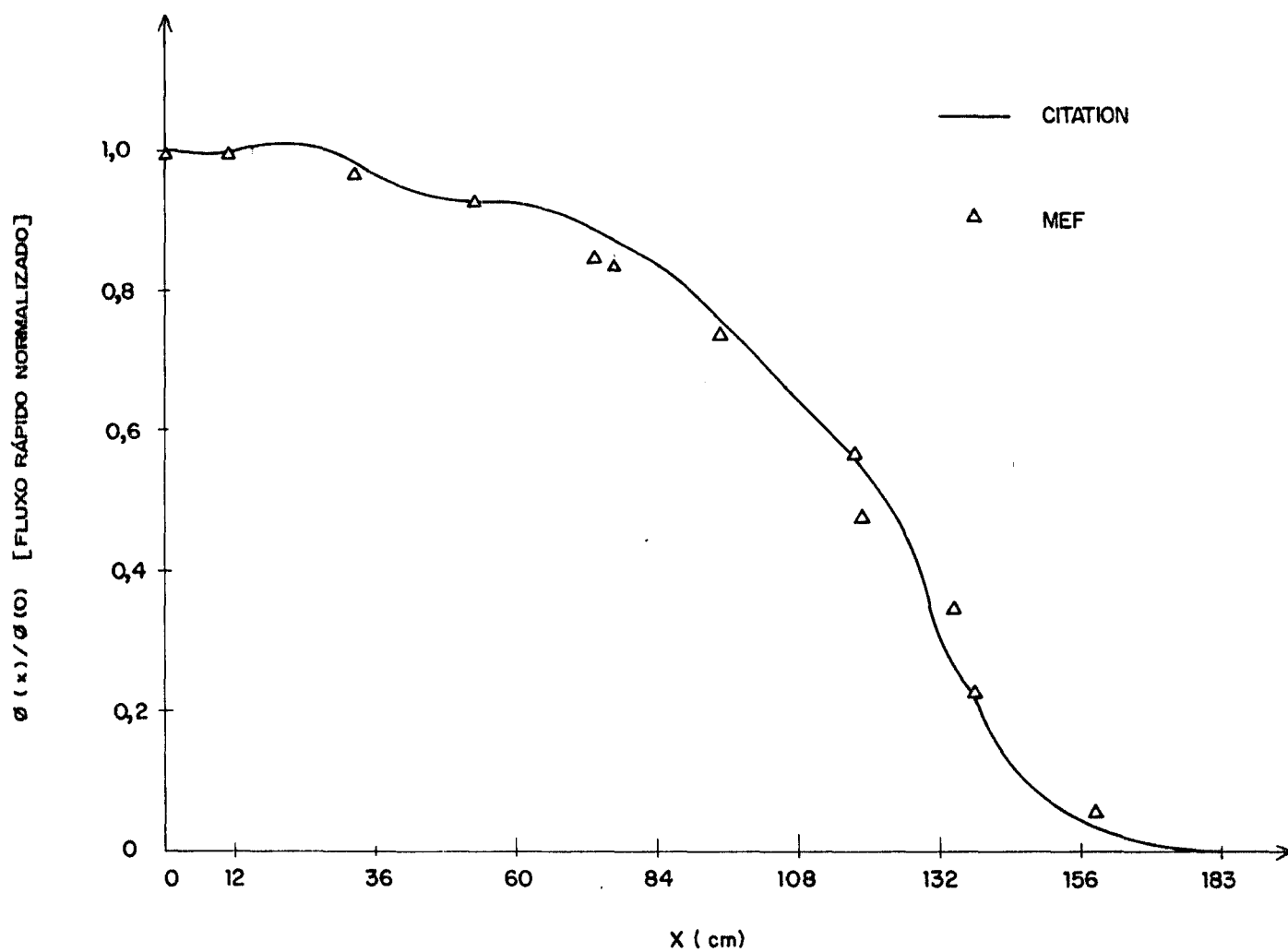


Fig. 5.4.4.- Fluxo rápido normalizado do problema 4
na posição $y=78,485$ cm

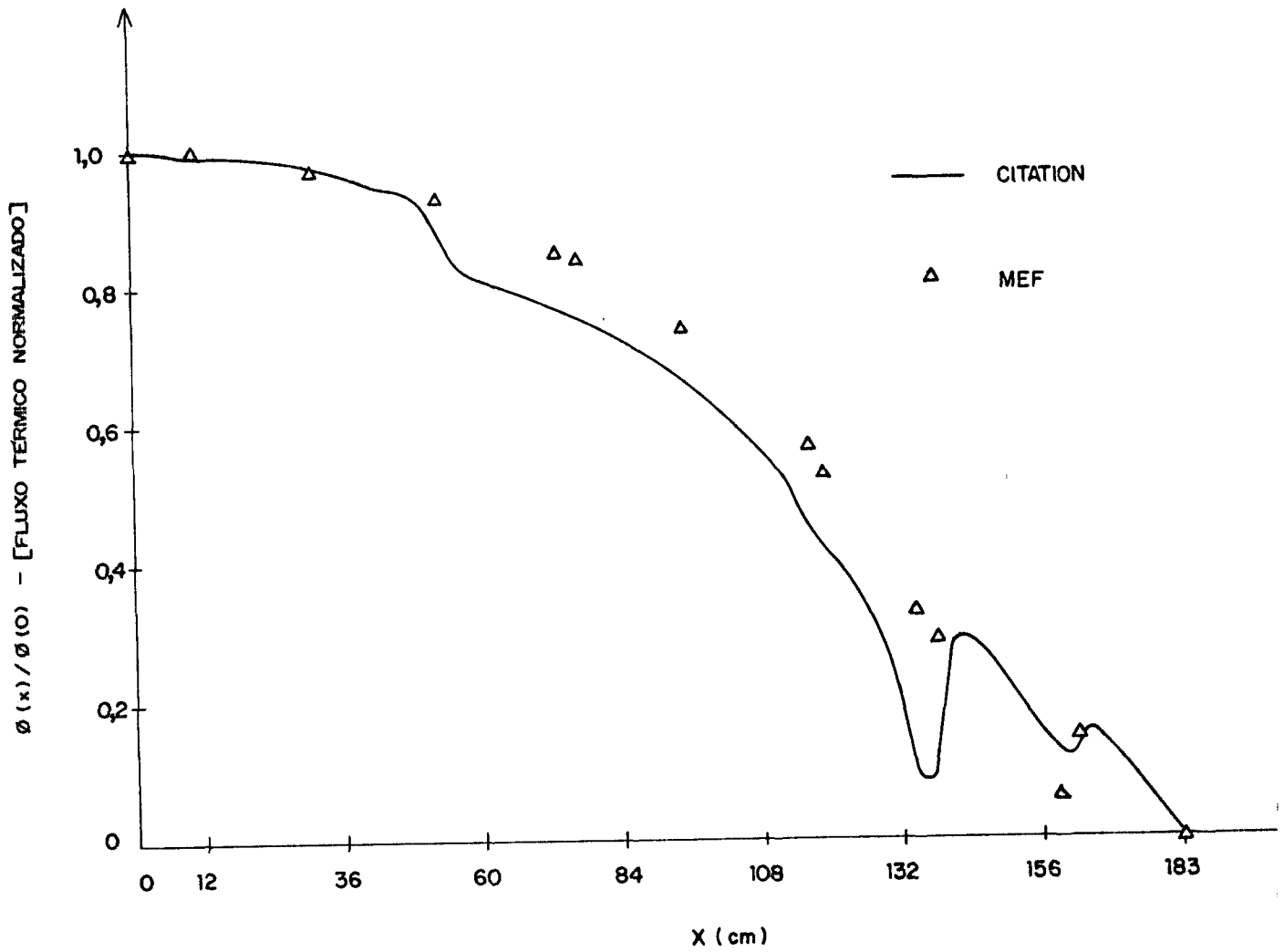


Fig. 5.4.5 - Fluxo térmico normalizado do problema 4
na posição $y = -78,485$ cm

V.5 PROBLEMA 5

Título: Reator 2D-IAEA ("benchmark) em dois grupos de energia e 4 zonas.

Descrição: Este problema consistiu em calcular a distribuição de fluxo e fator de multiplicação para o reator 2D-IAEA em 2 grupos de energia e 4 zonas diferentes. Na fig. 5.5.1 é apresentada a geometria esquemática, mostrando as diferentes zonas e as condições de contorno. Na tabela 5.5.1 constam as constantes nucleares homogeneizadas para cada zona.

Resultados: Através do programa obteve-se a distribuição de potência (fig.5.5.3) que é comparada com o código CITATION. A divisão do núcleo do reator em elementos para entrada no programa é mostrada na fig.5.5.2. Nas figs. 5.5.4 e 5.5.5 são ilustradas as distribuições de fluxo rápido e térmico, respectivamente para a posição $y = 100$.cm. O fator de multiplicação é apresentado na tab. 5.7.

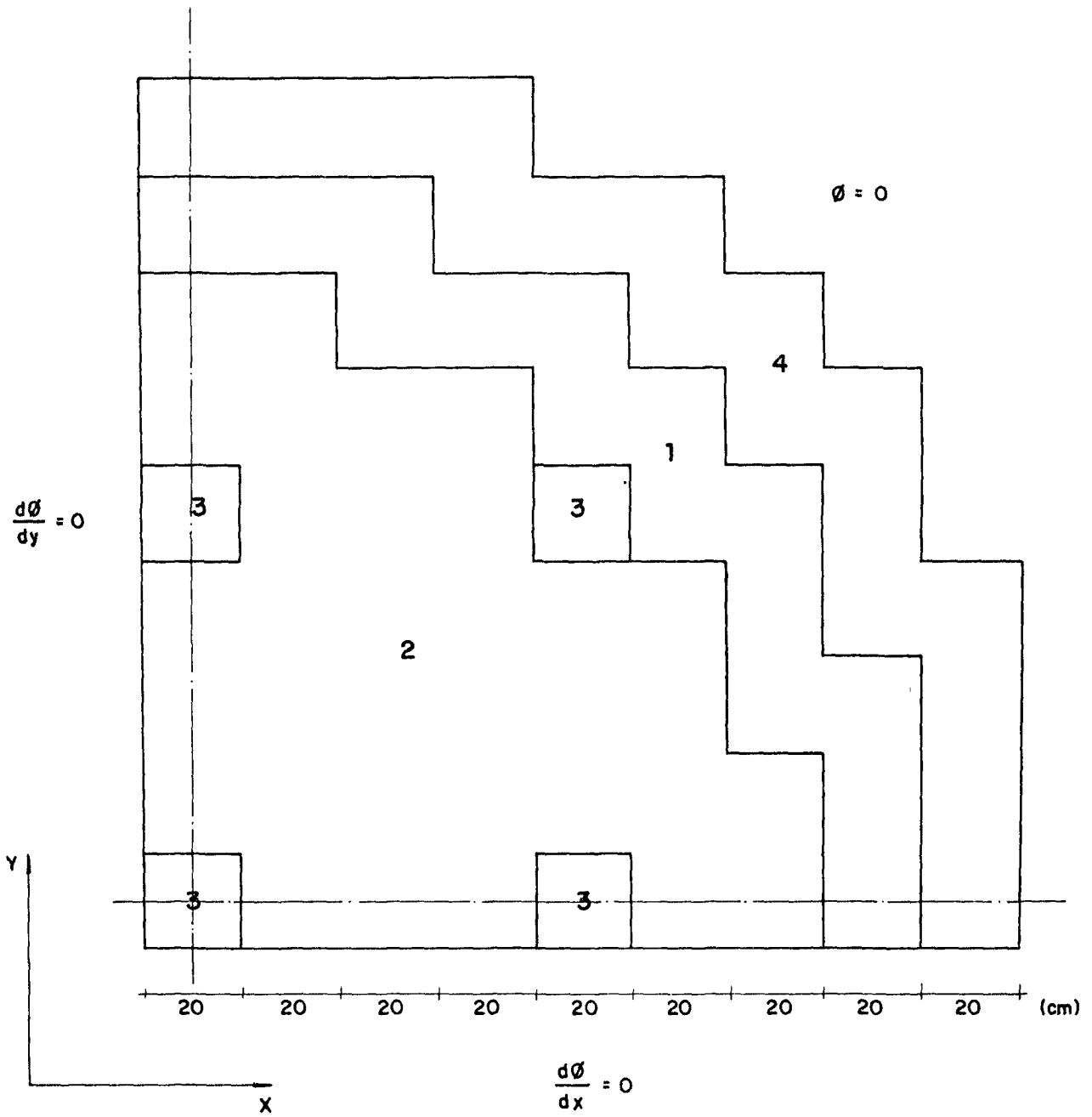


Fig. 5.5.1 - Geometria do reator 2D-IAEA.

REGIÃO	GRUPO DE ENERGIA	D (cm)	Σ_R (cm^{-1})	$\nu \Sigma_f$ (cm^{-1})	$\Sigma_{k \rightarrow k+1}^S$ (cm^{-1})	COMPOSIÇÃO
1	1	1,5	0,03	0,0	0,02	comb. 1
	2	0,4	0,08	0,135		
2	1	1,5	0,03	0,0	0,02	comb. 2
	2	0,4	0,085	0,135		
3	1	1,5	0,03	0,0	0,02	comb. + barra de con- trole
	2	0,4	0,13	0,135		
4	1	2,0	0,04	0,0	0,04	refletor
	2	0,3	0,01	0,0		

* $X_1 = 1.0$ $X_2 = 0.0$

Tab. 5.5.1 - Constantes nucleares do 2D-IAEA

4	4	4	4	4	4	4	4	4
1	1	1	4	4	4	4	4	4
2	2	1	1	1	4	4	4	4
2	2	2	2	1	1	4	4	4
3	2	2	2	3	1	1	4	4
2	2	2	2	2	2	1	4	4
2	2	2	2	2	2	1	1	4
2	2	2	2	2	2	2	1	4
3	2	2	2	3	2	2	1	4

Fig. 5.5.2 - Disposição da malha do 2D-IAEA para entrada no programa.

					0,7890 0,5579 29,29		
				0,6352 0,5020 20,97	0,9285 1,3634 -46,84	0,8073 0,6820 15,52	
			1,6105 1,9608 -21,75	1,3085 1,7027 -30,13	1,2267 1,5839 -29,12	1,1437 1,2136 -6,11	
		1,9782 2,3559 -19,09	1,8137 2,1938 -20,96	1,5932 1,9893 -24,86	1,4482 1,8683 -29,01	1,3194 1,8724 -41,91	0,9335 0,7648 -18,07
	1,9294 2,2559 -16,92	1,9906 2,3531 -18,21	1,7716 2,1138 -19,32	1,4457 1,8507 -28,01	1,4020 1,8031 -28,61	1,2858 1,7284 -34,42	0,9931 1,1925 -20,08
1,00 1,0	1,7618 2,1471 -21,87	1,9548 2,3155 -18,45	1,6316 2,0241 -24,06	0,8219 0,7545 8,20	1,2663 1,7096 -35,01	1,2644 1,7175 -35,84	1,0189 1,2189 -19,63

CITATION
MEF
Dif. Rel.
(%)

Fig.5.5.3 - Distribuição da potência normalizada do problema 5.

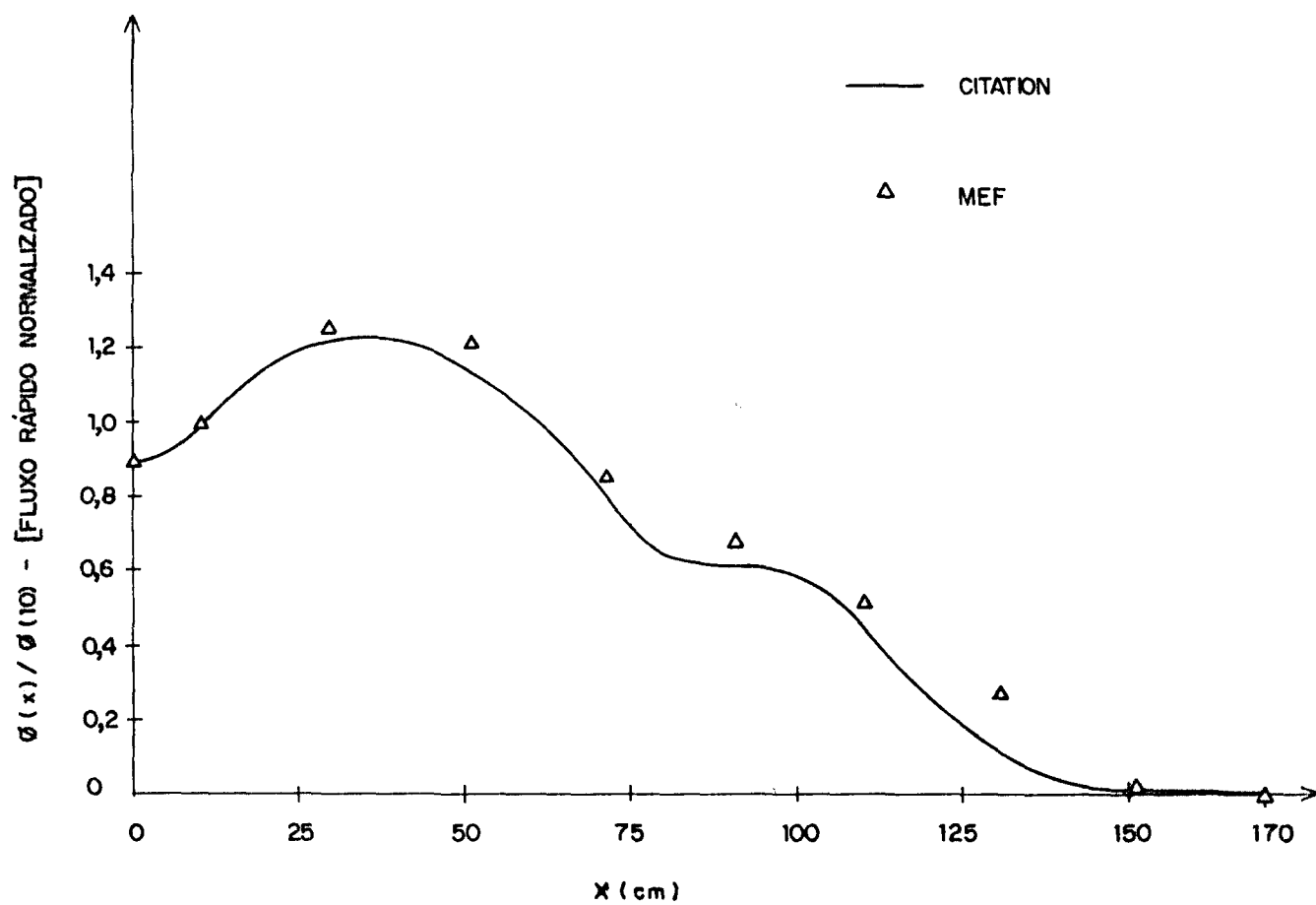


Fig. 5.5.4 - Fluxo rápido normalizado do problema 5
na posição $y = 100,0$ cm.

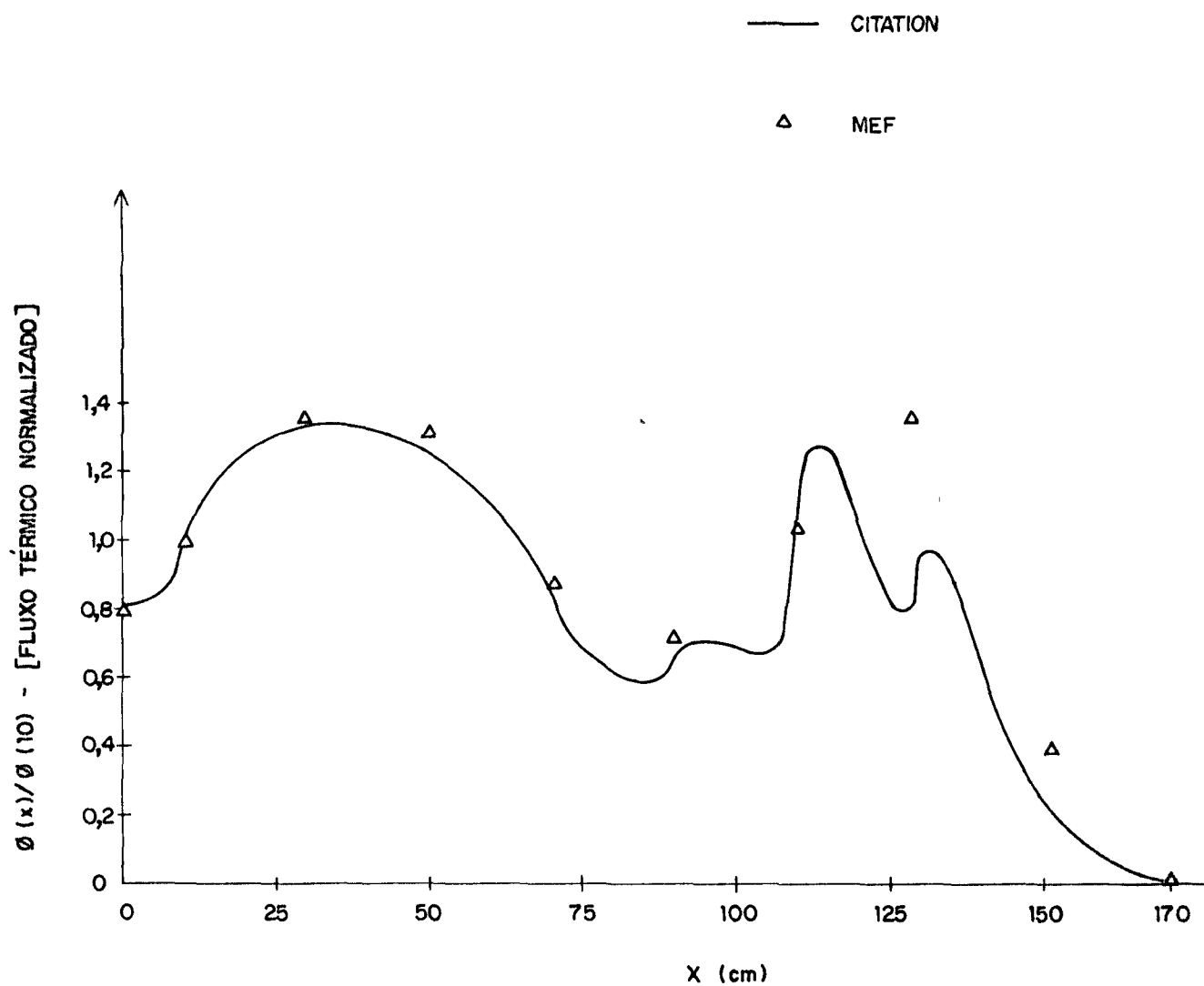


Fig. 5.5.5 - Fluxo térmico normalizado do problema 5
na posição $y=100,0$ cm .

	MALHA	MEF	CITATION	ERRO RELATIVO
ZION-1	13 x 13	1,27506	1,2751427 (80 x 80)	0,0065%
2D-IAEA	9 x 9	1,05009	1,033999 (170 x 170)	1,556%
	18 x 18	1,03506		0,1026%

Tab. 5.7 - Valores do fator de multiplicação dos problemas 4,
5.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Conforme resultados dos problemas apresentados no capítulo V, observa-se que o método dos elementos finitos, utilizando-se de função de aproximação linear com elementos retangulares, não apresenta bons resultados para o cálculo de parâmetros diferenciais, tais como distribuição de fluxo e distribuição de potência. Isto se torna mais acentuado em problemas que apresentam fortes heterogeneidades, como o 2D-IAEA, onde os resultados obtidos não descrevem satisfatoriamente a distribuição de fluxo nas regiões de picos. Entretanto no que se refere ao parâmetro integral (fator de multiplicação) obteve-se bons resultados com erros relativos inferiores a 1% comparado com o código CITATION. Apesar disso, a literatura mostra que o MEF é uma técnica promissora, pois pode conduzir a considerável redução na memória e tempo computacional, uma vez que esta permite o uso de malhas largas para se obter uma precisão comparável a métodos de malhas finas, como diferenças finitas.

Finalmente, salienta-se que tais imprecisões resultam, principalmente, do fato de ter-se usado funções bases bilineares, as quais não conseguem descrever as grandes variações na distribuição de fluxo em elementos adjacentes com fortes heterogeneidades. Desta forma, o programa aqui desenvolvido deve ser usado para o cálculo de parâmetros diferenciais apenas em núcleos cujos elementos não possuam grandes diferenças nas constantes nucleares. Além disso, cumpre notar que para se obter uma boa precisão no valor dos parâmetros integrais, o MEF necessita um número muito menor de elementos do que o método de diferenças finitas (CITATION)..

Para trabalhos futuros fica a sugestão da utilização e comparação de funções de aproximação de maior ordem, com outras opções de condições de contorno, e por fim, a solução de problemas de difusão em geometria tridimensional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ABRAMOWITZ, M. & STEGUN, I.A. Handbook of mathematical functions. National Bureau of Standards. Wash. D. C., 1964.
2. ACKROYD, R.T. A finite element method for neutron transport-I. Some theoretical considerations. Ann.Nucl.Energy; 5(2):75-94, 1978.
3. ACROYD, R.T.; ZIVER, A.K.; GODDARD, J.H. A finite element method for neutron transport. Part IV: A comparison of some finite element functions of two group Benchmark problems with conventional solutions. Ann. Nucl. Energy. 7(6): 335-49, 1980.
4. AZEKURA, K. Generalization of new finite element method using imaginary nodal points. J.Nucl.Sci.Tech., 17(2): 900-907, 1980.
5. AZEKURA, K. New finite element solution technique for neutron diffusion equations. J.Nucl.Sci.Tech., 17(2):89-97, 1980.
6. BATHE, K.J. & WILSON, E.L. Numerical methods in finite element analysis. New Jersey, Prentice-Hall, 1976.
7. BELL, G.I. & GLASSTONE, S. Nuclear reactor theory. 1970.
8. BISWAS, D.; RAM, K.S.; RAO, S.S. Applications of 'natural coordinate system' in the finite element solution of multigroup neutron diffusion equation. Ann. Nucl. Energy, 3:465-69, 1976.
9. DEPPE, L.O. & HANSEN, K.F. Application of the finite element method to two-dimensional diffusion problems. Nucl. Sci. Eng., 54:456-65, 1974.
10. DEPPE, L.O. & HANSEN, K.F. The finite element method applied to neutron diffusion problems. USAEC, Chicago Operations Office, 1974. (C00-2262-1).

11. DUDERSTADT, J.J. & HAMILTON, L.J. Nuclear reactor analysis. New York, John Wiley, 1976.
12. FINLAYSON, B.A. & SCRIVEN, L.E. The method of weighted residuals- A review. Appl.Mech.Rev., 19(9):735-48, 1966.
13. FOWLER, T.B.; VONDY, D.R.; CUNNINGHAM, G.W. Nuclear reactor core analysis code: CITATION. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Laboratory, 1971.(ORNL-TM-2496-Rev.2).
14. FRANKE, H.P. Studies on the numerical solution of three-dimensional stationary diffusion equations using the finite element method. Stuttgart Univ., Germany F.R., Inst. fuer Kernenergetik, 1976. (IKE-4-53).
15. FRANKE, H.P. Three-dimensional reactor physics calculations with the finite element method. Atomkernenergie, 30(2): 88-94, 1977.
16. FRANKE, H.P. Using the finite element methods to calculate three dimensional problems in reactor physics. Bonn Germany, F.R., Kerntechnische Gesellschaft in Deutschen Atomforum, 1977. (AED=CONF-77-007-000).
17. FUJIMURA, T. ; TSUTSUI, T.; HORIKAMI, K.; NAKAHARA, Y.; OHNISHI, T. Application of finite element method to two-dimensional multigroup neutron transport equations in cylindrical geometry. J.Nucl.Sci.Tech., 14(8):541-50, 1977.
18. GALLAGHER, R.H. Finite element analysis: fundamentals. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall, 1975.
19. GALLIARA, J. & WILLIAMS, M.M.R. A finite element method for neutron transport-II. Some practical considerations. Ann. Nucl. Energy, 6(4):205-23, 1979.
20. GRAVES, Jr., H.W. Nuclear fuel management. New York, John Wiley, 1979.
21. HENNART, J.P. & MUND, E.H. Singularities in the finite element approximation of two-dimensional diffusion problems. Nucl. Sci. Eng., 62:55-68, 1977.

22. HENRY, A.F. Nuclear reactor analysis. Massachusetts, Massachusetts Institute of Technology, 1975.
23. HORIKAMI, K.; NAKAHARA, Y.; FUJIMURA, T. Finite element method for solving neutron transport problems in two-dimensional cylindrical geometry. Yokyo, Japan Atomic Energy Research, Inst., 1974. (JAERI-M-5793).
24. HUEBNER, K.H. The finite element method for engineers. New York, Wiley - Interscience 1975.
25. ISE, T.; NAKAHARA, Y.; YAMAZAKI, T. FEMBABEL - a computer program for solving three-dimensional neutron diffusion equation by the finite element method. Tokyo, Japan Atomic Energy Research, Inst., 1978. (JAERI-1256).
26. KANG, C.M. & HANSEN, K.F. Finite element methods for reactor analysis. Nucl. Sci. Eng., 51:456-95, 1973.
27. KANG, C.M. & HANSEN, K.F. Finite element methods for space time reactor analysis. Cambridge, Massachusetts Institute of Technology, 1971. (MIT-3903-5).
28. KAPER, H.G.; LEAF, G.K.; LINDEMAN, A.J. Applications of finite element method in reactor mathematics. Numerical solution of the neutron diffusion equation. Ill., Argonne National Lab., 1972. (ANL-7925).
29. KAPER, H.G.; LEAF, G.K.; LINDEMAN, A.J. Applications of finite element method in reactor mathematics. Numerical solutions of the neutron transport equations. Ill., Argonne National Lab., 1974. (ANL-8126).
30. KAVENOKY, A. & LAUTARD, J.J. A finite element depletion diffusion calculation method with space-dependent cross-sections. Nucl. Sci. Eng., 64(2):563-75, 1977.
31. LAMARSH, J.R. Introduction to nuclear reactor theory. Mass., Addison-Wesley, 1966.
32. LAUTARD, J.J.J. New finite element representation for 3D reactor calculations. In: ADVANCES in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problem: proceedings of the international topical meeting on..., held in Munchen 27-29 april, 1981. (Separata)

33. LEWIS, E.E.; MILLER, W.F.; HENRY, T.P. A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations. Nucl. Sci. Eng., 58:203-12, 1975.
34. MARTIM, W.R. Convergence of the finite element method in neutron transport. Trans. Am. Nucl. Soc., 22:211, 1975.
35. MARTIM, W.R. & DUDERSTADT, J.J. Finite element solution of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities. Nucl. Sci. Eng., 62(3):371-90, 1977.
36. MILLER, W.F.; LEWIS, E.E.; ROSSOW, E.C. The application of phase-space finite elements to the one-dimensional neutron transport equations. Nucl. Sci. Eng., 51:148-56, 1973.
37. MILLER, W.F.; LEWIS, E.E.; ROSSOW, E.C. The application of phase-space finite elements to the two-dimensional neutron transport equation in X-Y geometry. Nucl. Sci. Eng., 52:12-22, (1973).
38. MISFELDT, I. Solution of the multigroup neutron diffusion equations by the finite element method. Riso, Danish Atomic Energy Commission, 1975 (RISO-M-1809).
39. MISFELDT, I. The program FEM 3D users manual, Riso, Danish Atomic Commission, 1975 (RISO-M-1969).
40. MORDAND, M. ZEPHYR: a new finite-element transport code for several two-dimensional geometries. Trans. Am. Nucl. Soc. 24:187, 1976.
41. NAKAMURA, S. Computational methods in engineering and science. John Wiley, New York, 1977.
42. NAKAMURA, S. & OHNISHI, T. The iterative solutions for the finite element method. In: INT... AT... EN... AG.. Numerical reactor calculations: proceedings of a seminar on..., held in Vienna 17-21 January, 1972. 1972 p.639-56.

43. NAKATA, H. The finite element response matrix method for coarse mesh reactor analysis. Michigan, 1981 (PhD. thesis, University of Michigan).
44. NORRIE, D.H. & VRIES, G. An introduction to finite element analysis. London, Academic 1978.
45. ODEN, J.T. & REDDY, J.N. An introduction to the mathematical theory of finite elements. New York, John Wiley, 1976.
46. PETRIE, I.M.; CROSS, N.F.- KENO IV, Oak Ridge, Tn. Oak Ridge National Lab., 1975. (ORNL-4938).
47. PITKÄRANTA, J. & SILVENNOINEN, P. Computational experimentation on the finite element method in bare slab criticality calculations. Nucl. Sci. Eng. 50:297-300, 1972.
48. PITKÄRANTA, J. & SILVENNOINEN, P. Finite element analysis of some critical fast assemblies. Nucl. Sci. Eng. 52:447-453, 1973.
49. RODRIGUES, A.F. Solução de sistemas esparsos de equações algébricas lineares por métodos diretos. São Paulo, 1979 (Dissertação de Mestrado, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo).
50. SCHMIDT, F.A.R. Finite element methods for the solution of multidimensional reactor physics problems. Stuttgart Univ., Germany, Inst. fuer Keinergetik 1979 (IKE-4-88).
51. SCHMIDT, F.A.R. Finite element application to global reactor analysis. In: ADVANCES in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems, proceedings of the International topical meeting on ... held in Munchen, 27-29 abril, 1981. (Separata).
52. SEMENZA, L.A.; LEWIS, E.E.; ROSSOW, E.C. The application of the finite element method to the multigroup neutron diffusion equation. Nucl. Sci. Eng. 47:302-310, 1972.

53. SPLAWSKI, B.A.; ZIVER, A.K.; GALLIARA, J. Using orthogonal function with a finite element method for approximating even-parity neutron flux in slab geometry. Nucl.Sci.Eng. 77:351-354, 1981.
54. TOMLINSON, E.T.; ROBINSON, J.C. Solution of the finite element diffusion and $P_{\text{sub}}(1)$ equations by iteration. Nucl.Sci. Eng. 63(2): 167-178, 1977.
55. YAMAGUCHI, M. Estudo e aplicação de códigos nucleares disponíveis no IPEN em problemas de física de reatores dependentes do tempo. São Paulo, 1980. (Dissertação de Mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).
56. YUAN, Y.C.; LEWIS, E.E.; MILLER, W.F. Iterative solutions methods for two dimensional finite element approximations in neutron transport. In: AMERICAN NUCLEAR SOCIETY. Computational methods in nuclear engineering: proceedings of the conference on..., held in Charleston, S.C. April 15-17, 1975. V.2, Sec. 33, p.85-100.
57. WILLIAMS, M.M.R. & GODDARD, J.H.A. eds. Finite element methods in radiation physics: proceedings of an international seminar held at Imperial College of Science and Technologi, London University 23-24 April 1981. In: Ann. Nucl. Energy, 8(11/12): 539-722, 1981.
58. ZIENKIEWICZ, O.C. The finite element method. London, McGraw-Hill, 1977.

APENDICE A

PRINCÍPIOS VARIACIONAIS E A SOLUÇÃO DA EQ. DE DIFUSÃO

Seja Ω um domínio de R^2 com contorno $\partial\Omega$ e seja $C^{(2)}(\Omega)$ o conjunto de todas as funções que possuem derivadas de 1ª e 2ª em Ω . Para uma função $\bar{\phi}$ em Ω define-se o conjunto.

$$U = \{\bar{\phi} \in C^{(2)}(\Omega) \mid \bar{\phi} \text{ especificado em } \partial\Omega\} .$$

O problema é achar uma função $\bar{\phi}$ tal que I tenha valores extremos onde I é dado por

$$I = \int_{\Omega} (F(r), \bar{\phi}(r), \bar{\phi}'(r)) d\Omega . \quad (A.1)$$

O conjunto de todas as funções que satisfazem (A.1) são dados por

$$\bar{\phi}(r, \epsilon) = \phi(r) + \epsilon \eta(r) \quad (A.2)$$

onde $\epsilon \eta(r)$ representa a variação de $\phi(r)$ e $\eta(r)$ é tal que $\eta=0$ para $r \in \partial\Omega$ e $\eta > 0$ para $r \in \Omega$. O valor de $\bar{\phi}$ que extremiza I também é a solução de um problema de valor no contorno. Assim para I dado pela expressão

$$I = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{-D[\nabla\bar{\phi}]^2 - \Sigma_a \bar{\phi}^2 + 2S\bar{\phi}\} d\Omega , \quad (A.3)$$

prova-se que a função que extremiza I é a solução da equação

$$D \nabla^2 \phi - \Sigma_a \phi + S = 0 . \quad (A.4)$$

Para isso substituindo (A.2) em (A.3) obtêm-se

$$I(\varepsilon) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{-D[\nabla(\phi+\varepsilon\eta)]^2 - \Sigma a(\phi+\varepsilon\eta)^2 + 2S(\phi+\varepsilon\eta)\} d\Omega \quad . \quad (A.5)$$

Aplicando o princípio variacional, isto é, fazendo $\left. \frac{\partial I}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 0$, a equação (A.5) torna-se

$$\int_{\Omega} \{-D[\nabla(\phi+\varepsilon\eta)\eta] - \Sigma a(\phi+\varepsilon\eta)\eta + S\eta\} \Big|_{\varepsilon=0} d\Omega = 0$$

ou

$$\int_{\Omega} \{-D \nabla[\phi\eta] - \Sigma a\phi\eta + S\eta\} d\Omega = 0 \quad (A.6)$$

$$\int_{\Omega} \{-D[(\nabla\phi)(\nabla\eta)] - \Sigma a\phi\eta + S\eta\} d\Omega = 0 \quad (A.7)$$

Integrando por partes o primeiro termo da equação (A.7) obtêm-se

$$- \int_{\partial\Omega} D \frac{d\phi}{dn} \eta d(\partial\Omega) + \int_{\Omega} \eta D\nabla^2\phi d\Omega + \int_{\Omega} \{-\Sigma a\phi\eta + S\eta\} d\Omega = 0 \quad (A.8)$$

a integral no contorno ($\partial\Omega$) se anula pois $\eta=0$ em $\partial\Omega$, e mais, ϕ é especificada em $\partial\Omega$. Portanto

$$\int_{\Omega} \eta \{D\nabla^2\phi - \Sigma a\phi + S\} d\Omega = 0 \quad (A.9)$$

e, desde que $\eta > 0$, para $\forall r \in \Omega$, então

$$D\nabla^2\phi - \Sigma a\phi + S = 0 \quad .$$

APÊNDICE B

B.1. ALGORÍTMO PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO MULTIGRUPO

As equações na forma matricial resultantes da aplicação do MEF, com a técnica dos resíduos ponderados, para cada grupo de energia, conforme apresentado na seção 4.3, são da forma

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_1 \phi_1 + \tilde{R}_1 \phi_1 &= \frac{1}{K} \chi_1 \tilde{S} \quad , \\
 \tilde{F}_2 \phi_2 + \tilde{R}_2 \phi_2 &= \frac{1}{K} \chi_2 \tilde{S} + \tilde{E}_{1 \rightarrow 2} \phi_1 \quad , \\
 \tilde{F}_3 \phi_3 + \tilde{R}_3 \phi_3 &= \frac{1}{K} \chi_3 \tilde{S} + \tilde{E}_{1 \rightarrow 3} \phi_1 + \tilde{E}_{2 \rightarrow 3} \phi_2 \quad , \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 \tilde{F}_g \phi_g + \tilde{R}_g \phi_g &= \frac{1}{K} \chi_g \tilde{S} + \sum_{h=1}^{g-1} \tilde{E}_{h \rightarrow g} \phi_h \quad , \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 \tilde{F}_G \phi_G + \tilde{R}_G \phi_G &= \frac{1}{K} \chi_G \tilde{S} + \sum_{h=1}^{G-1} \tilde{E}_{h \rightarrow G} \phi_h \quad , \quad (B.1.1)
 \end{aligned}$$

onde $g = 1, 2, 3 \dots G$ indica grupo de energia,
 \tilde{F} = matriz correspondente ao termo de fuga,
 \tilde{R} = matriz correspondente ao termo de remoção,
 \tilde{E} = matriz correspondente ao termo de espalhamento,
 K = fator de multiplicação efetivo,
 χ_g = espectro dos nêutrons de fissão,
 \tilde{S} = matriz correspondente ao termo fonte de fissão,
 ϕ = vetor fluxo de nêutrons.

A matriz correspondente ao termo fonte de fissão é obtida pela expressão,

$$\underline{S} = \sum_{h=1}^G \sum_{\underline{h}}^f \underline{\phi}_h \quad , \quad (\text{B.1.2})$$

onde $\sum_{\underline{h}}^f$ é a matriz cujos elementos representam o produto de v_h por \sum_h^f definidos anteriormente (Cap. IV).

No conjunto das equações (B.1.1) o lado direito da igualdade de cada equação, em princípio, não está definida, uma vez que a matriz \underline{S} não é conhecida pois seu valor depende dos parâmetros incôgnitas que formam o vetor $\underline{\phi}$. Assim, faz-se uma estimativa de \underline{S} , $\underline{S} \approx \underline{S}^{(0)}$ e $K \approx K^{(0)}$. Para o cálculo de $\underline{S}^{(0)}$ pela expressão (B.1.2) assume-se uma primeira aproximação para $\underline{\phi}_h \approx \underline{\phi}_h^{(0)}$, obtendo-se assim, de imediato, o termo $\underline{S}^{(0)}$. Com o valor de $\underline{S}^{(0)}$ pode-se resolver a equação de difusão discretizada para o primeiro grupo, na forma

$$F_1 \underline{\phi}_1^{(1)} + R_1 \underline{\phi}_1^{(1)} = \frac{1}{K^{(0)}} \chi_1 \underline{S}^{(0)*} \quad , \quad (\text{B.1.3})$$

obtendo-se como solução o valor $\underline{\phi}_1^{(1)}$. Com esse valor calculado, pode-se estimar uma nova fonte de fissão $\underline{S}^{(1)}$, notando que para o termo correspondente ao fluxo do grupo 1 este valor é atualizado com o calculado pela equação (B.1.3). Este processo se repete a medida que se calculam os valores $\underline{\phi}$ para cada grupo de energia, de tal modo que \underline{S} ao final da primeira iteração é o resultado que envolve os fluxos totais calculados na primeira iteração.

O auto valor K é considerado constante para cada iteração, sendo essa grandeza recalculada apenas no final de cada processo iterativo pela expressão,

*Os superscritos indicam o número da iteração.

$$K^{n+1} = \frac{\int_{\Omega} S^{(n+1)} d\Omega}{\frac{1}{K^{(n)}} \int_{\Omega} S^{(n)} d\Omega} \quad (\text{B.1.4})$$

O procedimento iterativo é finalizado quando os seguintes critérios de convergência são satisfeitos:

$$\left| \frac{K^{(n)} - K^{(n-1)}}{K^{(n)}} \right| < \epsilon_1 \quad (\text{B.1.5a})$$

e

$$\text{máx} \left| \frac{S^{(n)} - S^{(n-1)}}{S^{(n)}} \right| < \epsilon_2 \quad (\text{B.1.5b})$$

onde ϵ_1 e ϵ_2 são quantidades especificadas.

Esse esquema de solução sucessiva das equações na direção decrescente das energias é empregada pela hipótese de que não há espalhamento de nêutrons de um determinado grupo de energia para grupos de energia mais elevados.

B.2. ESTIMATIVA DA INTEGRAL DE S

Nesse trabalho, o cálculo de $\int_{\Omega} S d\Omega$ presente na expressão que calcula o valor de K, foi aproximada numericamente pela expressão /1/.

$$\frac{1}{4h^2} \iint_{\Omega} f(x,y) dx dy = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i, y_i) + R \quad (\text{B.2.1})$$

onde

(x_i, y_i)	w_i	
$(0,0)$	$4/9$	
$(\pm h, \pm h)$	$1/36$	$R = O(h^4)$
$(\pm h, 0)$	$1/9$	
$(0, \pm h)$	$1/9$	

e os pontos (x_i, y_i) mostrados na figura B.2.1

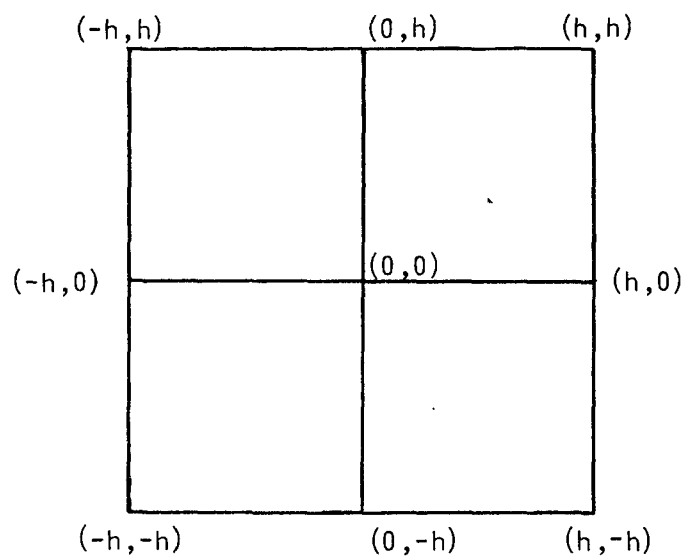


Fig. B.2.1 - Ilustração dos pontos para integração dupla numérica.

A determinação de S correspondente aos pontos médios dos lados do quadrilátero (que representa um elemento), foi feita pela fórmula de Taylor, ou seja

$$S_{i+1/2} = S_i + S'_i(2h/2) + S''_i \frac{(2h/2)^2}{2!}, \quad (\text{B.2.2})$$

onde

$$S'_i = \frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{4h}, \quad (\text{B.2.3})$$

e

$$S_i'' = \frac{S_{i+1} - 2S_i + S_{i-1}}{(2h)^2} .$$

B.3. FLUXOGRAMA DO PROGRAMA

As soluções numéricas dos problemas foram obtidas obtidas por meio de um programa de computador em linguagem FORTRAN IV, processado pelo sistema IBM 370/155 do IPEN.

O programa consta de um programa principal e seis subrotinas auxiliares conforme figura B.3.1

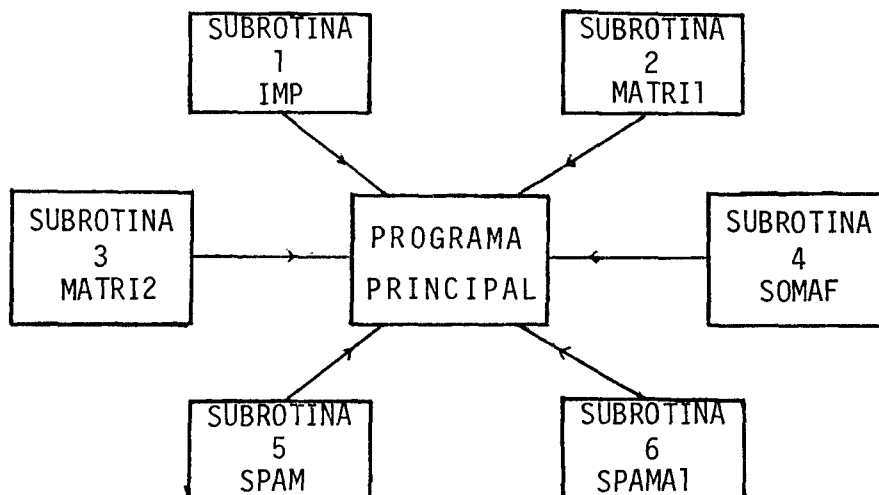


Fig. B.3.1 - Estrutura do programa.

A Subrotina 1 (IMP) consiste apenas de um programa para impressão dos resultados. Os elementos da matriz de fuga+remoção são calculados pela subrotina 2 (MATRI1), e os elementos da matriz correspondente ao termo de fonte são calculados pela subrotina 3 (MATRI2). Esta mesma calcula ainda o termo de espalhamento. A subrotina 4 (SOMAF), calcula numericamente a integral de superfície. As posições dos elementos não nulos da matriz de remoção+fuga necessárias no algoritmo

que soluciona o sistema de equação - subrotina 6 (SPAMA1)/49/-
são fornecidas pela subrotina 5 (SPAM).

Salienta-se que o programa em simples precisão não é otimizado, não usando nenhum processo de aceleração da convergência.

Na Figura B.3.2 é apresentada o fluxograma do programa, de maneira simplificada. A seguir, para exemplificação, é mostrada a saída do programa de um problema amostra, e ainda os cartões para a entrada de dados, tais como número de pontos da malha, número de grupos de energia, precisão, dados nucleares, etc..

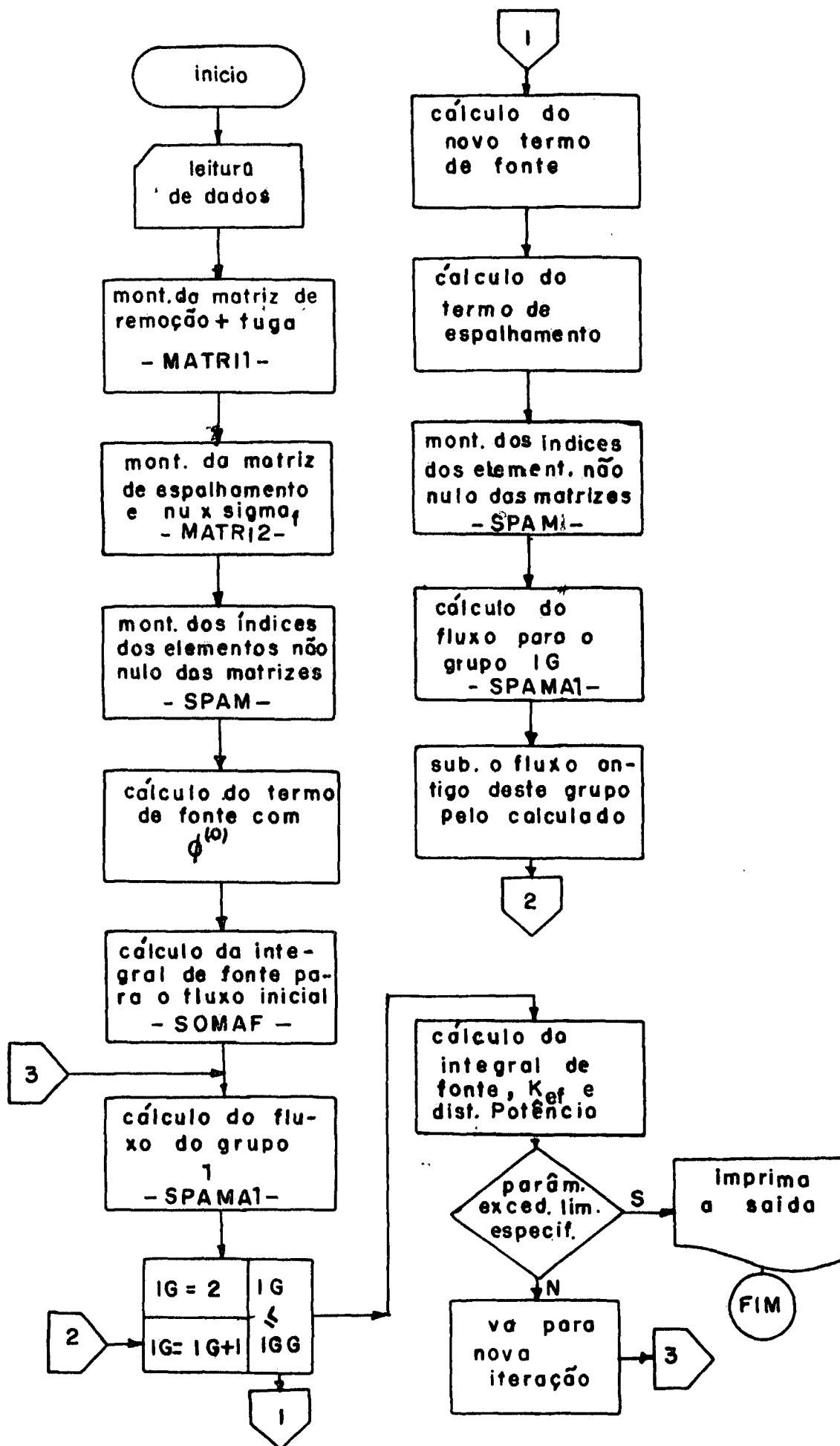


Fig. B.3.2 - Fluxograma do programa.

INSTRUÇÕES PARA ENTRADA NO PROGRAMA

CARTÃO	NOME	COLUNA	FORMATO	DESCRIÇÃO
1	TITU	1-72	18A4	título do problema
2	II	1-3	I3	nº de elementos na direção x
	JJ	4-6	I3	nº de elementos na direção y
	IGG	7-9	I3	nº de grupos de energia
	ITMAX	12-14	I3	nº máximo de iterações
	EPI	17-23	E7.1	precisão de K
	XKØ	26-28	F3.1	1.ª estimativa de K
	NC1	30-32	I2	nº de zonas
	EP2	34-40	E7.1	precisão de S
3	ELX	1-10	F10.0	comprimento do núcleo na direção x
	ELY	11-20	F10.0	comprimento do núcleo na direção y
	XNI	21-30	F10.0	valor de v_g
4	QUI(IG)	1-80	F10.0	valor de χ por grupo de energia
5	INZ(I)	1-80	40I2	tipo de zona de cada elemento (da esquerda p/ direita, de baixo para cima)
6	HX(I)	1-80	8F10.0	largura de cada elemento no sentido do eixo x
7	HY(J)	1-80	8F10.0	largura de cada elemento no sentido do eixo y
8	A(INC,I)	1-80	8F10.0	*
9	FLUØ(INC,I)	1-80	8F10.0	*

* As entradas das constantes nucleares de cada grupo e zona é feita do seguinte modo.

- Seção de choque de remoção, fissão ($v\Sigma_f$) e D, em um cartão para cada zona para o primeiro grupo.

Para os grupos de 2 a IGG

1. Seção de choque de espalhamento ($\Sigma_{1 \rightarrow g}^S, \dots, \Sigma_{g-1, g}^S$).

2. Seção de choque de remoção, fissão ($v\Sigma_f$) e D, num mesmo cartão.

Os itens 1 e 2 são repetidos para todas as zonas de cada grupo, até o último grupo IGG.

Listagem do programa

```

C
C ESTE PROGRAMA CALCULA O FLUXO DE NEUTRONS E O FATOR
C DE MULTIPLICACAO, PELA EQUACAO DE DIFUSAO
C SOLUCIONADA PELO METODO DOS ELEMENTOS FINITOS
C EM DUAS DIMENSOES (X-Y)
C
C
C      CCOMMON/DEL/HX(20),HY(20)
C      CCOMMON/REG1/A(400,300),D(20,20),SIGR(20,20)
C      CCOMMON/REG2/IC(400,300),INZ(400)
C      CCOMMON/REG3/II,JJ,IGG,IC1,IC2,IC3,IC4,IC5,IC6,IC7,NLOG
C      CCOMMON/REG6/SO(20,20)
C      CCOMMON/REG7/S21(400),FLU(400)
C      DIMENSION FLUO(400,5),QUI(5),S1(400),DF(400),S11(400),
C      * SIGSP(20,20),XNIS(20,20),SA1(400),POT(20,20),R(20,20),
C      * AXNIS(20,20,5),ICA(400,20),INZA(400),FLUO0(400,10),
C      * TITU(20),XNI(5)
C
C      LEITURA E IMPRESSAO DOS DADOS
C
C      READ(5,100)(TITU(I),I=1,18)
100  FCRMAT(18A4)
      WRITE(6,101)(TITU(I),I=1,18)
101  FORMAT(1X,18A4)
      EPS=1.0E-05
      IS=2
      NZM=1
      READ(5,10) II, JJ, IGG, ITMAX, EPI, XKO, NC1, EP2
10   FORMAT(3I3,2X,I3,2X,E7.1,2X,F3.1,1X,I2,1X,E7.1)
      WRITE(6,11)NC1
11   FORMAT(/1X,'NUM. DE ZONAS =',I2)
      N=II*JJ
      READ(5,20)ELX,ELY,(XNI(IG),IG=1,IGG)
20   FORMAT(8F10.0)
      IF=N
      READ(5,40)(QUI(IG),IG=1,IGG)
40   FCRMAT(8F10.0)
      READ(5,1)(INZ(I),I=1,N)
1   FCRMAT(40I2)
      WRITE(6,13)
13  FCRMAT(1X,'CCNFIGURACAO DO REATOR')
      IN=N
      DC 18 J=1, JJ
      IN1=IN-II+1
      WRITE(6,12)(INZ(I),I=IN1,IN)
      IN=IN1-1
18  CCNTINUE
12  FCRMAT(3X,40I2)
      READ(5,4)(HX(I),I=1,II)
      READ(5,4)(HY(J),J=1,JJ)
      WRITE(6,21)
21  FORMAT(/1X,'LARGURA DAS MALHAS NA DIRECAO:')
      WRITE(6,5)(HX(I),I=1,II)
      WRITE(6,17)(HY(J),J=1,JJ)
      WRITE(6,14)
14  FORMAT(/1X,'VALORES DOS DADOS NUCLEARES DE ENTRADA')
5   FCRMAT(/1X,'X:',20(1X,F4.1))
17  FCRMAT(/1X,'Y:',20(1X,F4.1))
      DO 6 IG=1,IGG
      IG1=IG-1
      DC 7 INC=1,NC1
      IF(IG.EQ.1) GO TO 30
      READ(5,4)(A(INC,I),I=1,IG1)
      WRITE(6,15)(A(INC,I),I=1,IG1)
30  READ(5,4)(FLUO(INC,I),I=1,3)
      WRITE(6,15)(FLUO(INC,I),I=1,3)
7   CCNTINUE
15  FCRMAT(1X,8(3X,E12.6))
4   FORMAT(8F10.0)
C
C      COMPOSICAO DAS MATRIZES PARA TODOS OS GRUPOS
C
C      IF(IG.EQ.1) GO TO 41
      DC 8 IK=1,IG1
      I1=0
      DC 9 J=1, JJ

```

```

DO 9 I=1,II
  I1=I1+1
  NC=INZ(I1)
  SIGSP(I,J)=A(NC,IK)/36.
9  CCNTINUE
  NLOG=10
  CALL MATR12(SIGSP)
8  CCNTINUE
41 I1=0
  DO 16 J=1,JJ
  DG 16 I=1,II
  I1=I1+1
  NC=INZ(I1)
  SIGR(I,J)=FLUO(NC,1)/36.
  AXNIS(I,J,IG)=FLUO(NC,2)
  XNIS(I,J)=FLUO(NC,2)/36.
  D(I,J)=FLUO(NC,3)/3
16 CCNTINUE
  CALL MATR11
  NLOG=9
  CALL MATR12(XNIS)
6  CCNTINUE
  END FILE 8
  END FILE 9
  END FILE 10
  REWIND 8
  REWIND 9
  REWIND 10
700 DO 700 J=1,JJ
  SO(II+1,J)=0.
701 DO 701 I=1,II
  SO(I,II+1)=0.
  SO(II+1,JJ+1)=0.
C
  DG 710 IG=1,IGG
  DG 710 I=1,N
  FLUO(I,IG)=1.
  FLUO(I,IG)=1.
710 CCNTINUE
  DO 80 I=1,N
80  S11(I)=0.
  CALL SPAM
  DO 81 I=1,N
  INZA(I)=INZ(I)
  DO 81 J=1,9
  ICA(I,J)=IC(I,J)
81  CCNTINUE
C
C  CALCULO DO TERMO DE FONTE PARA O FLUXO INICIAL
C
  DG 61 IG=1,IGG
  DG 490 I=1,N
  DG 490 J=1,9
490 A(I,J)=0.
  READ(9) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
  DO 62 I=1,N
  S1(I)=0.
  K2=INZA(I)
  DO 62 K1=1,K2
  K=ICA(I,K1)
62  S1(I)=S1(I)+A(I,K1)*FLUO(K,IG)
  DO 63 I=1,N
63  S11(I)=S11(I)+S1(I)
61  CCNTINUE
  REWIND 9
  DO 64 I=1,II
  DG 64 J=1,JJ
64  SO(I,J)=0.
  IK=0
  DO 500 I=1,II
  DO 501 J=1,JJ
  I1=IK*JJ+J
  SO(I,J)=S11(I1)
501 CCNTINUE
  IK=IK+1
500 CCNTINUE

```

```

C
C   CALCULO DA INTEGRAL DE S PARA C FLUXO INICIAL
C
C   CALL SOMAF(SSO)
C
C   CALCULO DO SISTEMA PARA O PRIMEIRO GRUPO
C
C   IT=0
95   DO 92 IG=1,IGG
      DO 92 I=1,N
92   FLU00(I,IG)=FLU0(I,IG)
      IG=1
      DO 91 I=1,N
      S21(I)=(QUI(I)/XK0)*S11(I)
91   CCNTINUE
      DO 491 I=1,N
      DO 491 J=1,9
491  A(I,J)=0.
      READ(8) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
      CALL SPAM
C
C
C   SUBROTINA PARA A SOLUCAO DC SISTEMA DO GRUPO RAPIDO
C   CALL SPAM1(N,EPS,IS,NZM,IF)
C
C
C   DO 97 I=1,N
C   FLUC(I,1)=FLU(I)
C   CCNTINUE
97
C
C   SOLUCAO DOS SISTEMAS DO GRUPO 2 ATE G
C
C   CALCULO DA NOVA INTEGRAL DA FONTE
C
C
C   DO 110 IG=2,IGG
C
C   CALCULO DO TERMO DE FONTE
C
C
C   IG1=IG-1
C   DO 98 I=1,N
98   S11(I)=0.
      DO 71 IG3=1,IGG
      DO 800 I=1,N
      DO 800 J=1,9
800  A(I,J)=0.
      READ(9) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
      DO 72 I=1,N
      S1(I)=0.
      K2=INZA(I)
      DO 72 K1=1,K2
      K=ICA(I,K1)
72   S1(I)=S1(I)+A(I,K1)*FLU0(K,IG3)
      DO 75 I=1,N
75   S11(I)=S11(I)+S1(I)
71   CCNTINUE
      REWIND 9
      DO 74 I=1,N
      S21(I)=(QUI(IG)/XK0)*S11(I)
74   CCNTINUE
C
C
C   CALCULO DC TERMO DE ESPALHAMENTO
C
C   DO 99 I=1,N
99   SA1(I)=0.
      DO 122 IG4=1,IG1
      DO 810 I=1,N
      DO 810 J=1,9
810  A(I,J)=0.
      READ(10) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
      DO 123 I=1,N
      S1(I)=0.
      K2=INZA(I)
      DO 123 K1=1,K2
      K=ICA(I,K1)

```

```

123  S1(I)=S1(I)+A(I,K1)*FLUO(K,IG4)
      DG 125 I=1,N
      SA1(I)=SA1(I)+S1(I)
125  CCNTINUE
122  CCNTINUE
      DO 124 I=1,N
      S21(I)=S21(I)+SA1(I)
124  CCNTINUE
      DG 502 I=1,N
      DC 502 J=1,9
502  A(I,J)=0.
      REAC(8) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
      CALL SPAM
C
C  SUBROTINA PARA A RESOLUCAO DO SISTEMA DE EQUACOES
C
C  CALL SPAMA1(N,EPS,IS,NZM,IF)
C
C  CALCULO DO TERMO DE FONTE
C
      DG 111 I=1,N
111  FLUO(I,IG)=FLU(I)
110  CCNTINUE
      REWIND 8
      REWIND 10
      DO 113 I=1,N
      S11(I)=0.
113  CCNTINUE
      DO 131 IG=1,IGG
      DC 503 I=1,N
      DC 503 J=1,9
503  A(I,J)=0.
      REAC(9) ((A(I,J),J=1,9),I=1,N)
      DO 132 I=1,N
      S1(I)=0.
      K2=INZA(I)
      DO 132 K1=1,K2
      K=ICA(I,K1)
      S1(I)=S1(I)+A(I,K1)*FLUO(K,IG)
132  CCNTINUE
      DC 135 I=1,N
      S11(I)=S11(I)+S1(I)
135  CCNTINUE
131  CCNTINUE
      REWIND 9
      DC 65 I=1,II
      DO 65 J=1,JJ
65  S0(I,J)=0.
      IK=C
      DO 133 I=1,II
      DC 134 J=1,JJ
      POT(I,J)=C.
      II=IK*JJ+J
      SC(I,J)=S11(II)
134  CCNTINUE
      IK=IK+1
133  CCNTINUE
C
C  CALCULO DA INTEGRAL DE S
C
C  CALL SOMAF(SS)
C
C  CALCULO DO FATOR DE MULTIPLICACAO
C
      XK=XK0*SS/SSO
      IF((ABS(XK-XK0)).LT.EPI) GO TO 201
      IF(IT.GE.ITMAX) GO TO 615
      XK1=1./XK
      XK0=XK
      SSC=SS
      IT=IT+1
      GC TO 95
201  DC 210 IG=1,IGG
      DO 220 I=1,N
220  DF(I)=ABS(FLUO(I,IGG)-FLUO0(I,IGG))
      DFMAX=DF(I)
      DC 230 I=1,N
230  IF(DF(I).GT.DFMAX)DFMAX=DF(I)

```

```

210  CCNTINUE
      IF(CFMAX .GT. EP2) GO TO 96
96    IF(IT .LT. ITMAX) GO TO 95
615  XK1=1./XK
      WRITE(6,609)XK,XK1,EP1,EP2,IT
      DC 602 I=1,II
      DC 602 J=1,JJ
602  XNIS(I,J)=0.
      PT1=0.
      DC 600 IG=1,IGG
      IK=0
      DC 770 I=1,II
      DC 771 J=1,JJ
      I1=IK*JJ+J
      PCT(I,J)=FLUO(I1,IG)
771  CCNTINUE
      IK=IK+1
770  CCNTINUE
      DC 780 I=2,II
      DC 780 J=2,JJ
      IF(POT(I,J).GE.0)GO TO 780
      P=HX(I-1)/(HX(I-1)+HX(I))
      Q=HY(J-1)/(HY(J-1)+HY(J))
      PCT(I+1,J)=0.
      PCT(I,JJ+1)=0.
      POT(I+1,JJ+1)=0.
      POT(I,J)=(1.-P)*(1.-Q)*POT(I-1,J-1)+
      *P*(1.-Q)*POT(I+1,J-1)+Q*(1.-Q)*POT(I-1,J+1)+
      *P*Q*POT(I+1,J+1)
780  CCNTINUE
      DO 603 I=1,II
      DO 603 J=1,JJ
      A(I,J)=AXNIS(I,J,IG)/XNI(IG)
      PT1=PT1+A(I,J)*POT(I,J)*HX(I)*HY(J)
      XNIS(I,J)=XNIS(I,J)+A(I,J)*POT(I,J)
603  CCNTINUE
      WRITE(6,231)IG
      CALL IMP (II,JJ,POT)
600  CCNTINUE
      PT=PT1/(ELX*ELY)
      DO 611 I=1,II
      DO 611 J=1,JJ
      R(I,J)=XNIS(I,J)/PT
611  CCNTINUE
      WRITE(6,606)
      CALL IMP(II,JJ,XNIS)
231  FORMAT(//1X,'FLUXO DO GRUPO ',I2)
606  FORMAT(//1X,'DISTRIBUICAO DA POTENCIA')
609  FORMAT(//5X,'FATOR DE MULTIPLICACAO (KEF) = ',E12.6,//5X,
      *'1/KEF = ',E12.6,//5X,'PRECISAO DO FATOR DE MULT. = ',
      *E12.5,//5X,'PRECISAO DO FLUXO = ',E12.5,//5X,
      *'NUMERO DE ITERACOES = ',I3)
      STOP
      END
      SUBROUTINE IMP(II,JJ,P1) ..
      DIMENSION P1(20,20)
      N1=JJ/10
      N2=N1*10+1
      NRE=JJ-N1*10
      IF(N1.EQ.0) GO TO 2001
      DC 2002 K=1,N1
      J1=(K-1)*10+1
      J2=K*10
      WRITE(6,2003)(J,J=J1,J2)
      DC 2002 I=1,II
      WRITE(6,2005)I,(P1(I,J),J=J1,J2)
2002  CCNTINUE
2001  IF(NRE.EQ.0) GO TO 2006
      WRITE(6,2003)(J,J=N2,II)
      DC 2006 I=1,II

```

```

WRITE (6,2005) I, (F1(I,J), J=N2, JJ)
2006 CONTINUE
2003 FCORMAT(1/2X,10(9X,13))
2005 FCORMAT(1X,13,2X,10(1X,E11.4))
RETURN
END

SUBROUTINE MATRI1
C
C   SCERCTINA PARA A COMPOSICAO DA MATRIZ
C
C   CEMMCN/DEL/FX(20),FY(20)
C   CEMMCN/REG1/A(400,300),D(20,20),SIGR(20,20)
C   CEMMCN/REG3/I1, JJ, IGG, IC1, IC2, IC3, IC4, IC5, IC6, IC7, NLCC
C
IC1=I1*JJ
IC2=I1+1
IC3=I1+2
IC4=I1-1
IC5=2*I1
IC6=JJ-2
IC7=I1-2
DC IC I=1, IC1
DC IC J=1, 5
10 A(I,J)=0.
C   PRIMEIRA LINHA DO PRIMEIRO BLOCC
F=FY(1)/FX(1)+FX(1)/FY(1)
Y=FX(1)*FY(1)
A(1,1) =4.*C(1,1)*H+16.*SIGR(1,1)*Y
A(1,2) =+2.*C(1,1)*(FY(1)/HX(1)-2.*FX(1)/FY(1))+c.*SIGR(1,1)*Y
A(1,3) =-2.*C(1,1)*(2.*FY(1)/FX(1)-FX(1)/FY(1))+8.*SIGR(1,1)*Y
A(1,4) =-2.*C(1,1)*F+4.*SIGR(1,1)*Y
C   LINHAS INTERMEDIARIAS DO PRIMEIRO BLOCC
DC 30 I=2, IC4
A(I,1)=-C(1,I-1)*(-FY(I-1)/FX(I-1)+2.*FX(1)/HY(I-1))+4.*
* SIGR(1,I-1)*FX(1)*FY(I-1)
A(I,2)=2.*C(1,I-1)*(FY(I-1)/FX(I-1)+HX(1)/HY(I-1))+2.*
* C(1,I)*(FY(I)/FX(I)+X(1)/FY(I))+
* E.*(SIGR(1,I-1)*HX(1)*HY(I-1)+SIGR(1,I)*FX(1)*HY(I))
A(I,3)=C(1,I)*C(1,I)*(HY(I)/FX(I)-2.*FX(1)/FY(I))+4.*SIGR(1,I)*
* FX(1)*HY(I)
A(I,4)=C(1,I-1)*(-HY(I-1)/HX(1)-HX(1)/HY(I-1))+2.*SIGR(1,I-1)
* *FX(1)*FY(I-1)
A(I,5)=C(1,I-1)*(HX(1)/HY(I-1)-2.*FY(I-1)/HX(1))+C(1,I)*
*(-2.*FY(I)/FX(1)+FX(1)/FY(I))+4.*(SIGR(1,I-1)*HX(1)*HY(I-1)+
* SIGR(1,I)*FX(1)*FY(I))
A(I,6)=C(1,I)*(-FY(I)/FX(1)-HX(1)/HY(I))+2.*SIGR(1,I)*FX(1)*
* FY(I)
30 CONTINUE
C   ULTIMA LINHA DO PRIMEIRO BLOCC
A(I,1)=C(1,I-1)*(FY(I-1)/FX(I-1)-2.*FX(1)/FY(I-1))+
* 4.*SIGR(1,I-1)*FX(1)*FY(I-1)
A(I,2)=2.*C(1,I-1)*(FY(I-1)/FX(I-1)+HX(1)/HY(I-1))+2.*C(1,I)*
*(FY(I)/FX(I)+HX(1)/HY(I))+8.*(SIGR(1,I-1)*HX(1)*HY(I-1)+
* SIGR(1,I)*FX(1)*FY(I))
A(I,3)= C(1,I-1)*(-FY(I-1)/FX(I-1)-FX(1)/FY(I-1))+2.*SIGR(1,I-1)
* *FX(1)*FY(I-1)
A(I,4)=C(1,I-1)*(-2.*FY(I-1)/HX(1)+FX(1)/FY(I-1))+C(1,I)*
*(-2.*FY(I)/FX(1)+HX(1)/HY(I))+4.*(SIGR(1,I-1)*HX(1)*FY(I-1)+
* SIGR(1,I)*FX(1)*FY(I))
C   MONTAGEM DOS BLOCOS INTERMEDIARIOS
DC 40 J=1, IC6
IC8=J*I1+1
IC9=J*I1
J1=J+1
C   PRIMEIRA LINHA DOS BLOCOS INTERMEDIARIOS
H1=FY(1)/FX(J)
F2=FY(1)/HX(J1)
X1=FX(J)/FY(1)
X2=FX(J1)/HY(1)
G1=FX(J)*FY(1)
G2=FX(J1)*FY(1)
A(IC8,1)=D(J,1)*(-2.*F1+X1)+4.*SIGR(J,1)*G1
A(IC8,2)=D(J,1)*(-F1-X1)+2.*SIGR(J,1)*G1

```

```

A(IC8,3)=2.*D(J,1)*(H1+X1)+C(J1,1)*(H2+X2))+
*0.*(SIGR(J,1)*G1+SIGR(J1,1)*G2)
A(IC8,4)=D(J,1)*(H1-2.*X1)+L(J1,1)*(H2-2.*X2)+
*4.*(SIGR(J1,1)*G2+SIGR(J,1)*G1)
A(IC8,5)=C(J1,1)*(-2.*H2+X2)+4.*SIGR(J1,1)*G2
A(IC8,6)=C(J1,1)*(-H2-X2)+2.*SIGR(J1,1)*G2
IC12=IC9+2
IC13=IC9+IC4
I1=2
CC 50 I=IC12,IC13
C
CEMAIS LINHAS DOS BLOCOS INTERMEDIARIOS
F1=FY(I1-1)/FX(J)
F2=FY(I1)/FX(J1)
F3=FY(I1)/FX(J)
F4=FY(I1-1)/FX(J1)
F5=FY(I1-1)/FX(J)
F6=FY(I1)/FX(J)
F7=FY(I1-1)/FX(J1)
X1=FX(J)/HY(I1-1)
X2=FX(J1)/FY(I1)
X3=FX(J)/HY(I1)
X4=FX(J1)/FY(I1-1)
X5=FX(J)/FY(I1-1)
X6=FX(J)/FY(I1)
X7=FX(J1)/FY(I1-1)
G1=FX(J1)*FY(I1)
G2=FX(J)*FY(I1)
G3=FX(J1)*FY(I1-1)
G4=FX(J)*FY(I1-1)
G5=FX(J)*FY(I1-1)
G6=FX(J1)*FY(I1-1)
G7=FX(J)*FY(I1)
A(I,1)=-D(I,11-1)*C.5*(F5+X5)+SIGR(J,11-1)*G5
A(I,2)=D(J,11-1)*(-F5+1.5+C.5*X5)+L(J,11)*(-H6-1.5+0.5*X6)+
*2.*(SIGR(J,11-1)*G5+SIGR(J,11)*G7)
A(I,3)=D(J,11)*C.5*(-H6-X6)+SIGR(J,11)*G7
A(I,4)=D(J,11-1)*(C.5*F5+1.5-X5)+C(J1,11-1)*(C.5*H7-1.5-X7)+
*2.*(SIGR(J,11-1)*G5+SIGR(J1,11-1)*G6)
A(I,5)=D(J,11-1)*(F1+3.*X1)+D(J1,11)*(H2+3.*X2)+D(J1,11-1)
*
*(F4-3.*X4)+D(J,11)*(F3-3.*X3)+4.*(SIGR(J,11-1)*G4+
*SIGR(J1,11)*G1+SIGR(J1,11-1)*G3+SIGR(J,11)*G2)
A(I,6)=D(J1,11)*(C.5*F2+1.5-X2)+C(J,11)*(C.5*H3-1.5-X3)+2.*(
*SIGR(J1,11)*G1+SIGR(J,11)*G2)
A(I,7)=D(J1,11-1)*.5*(-H4-X4)+SIGR(J1,11-1)*G3
A(I,8)=D(J1,11)*(-F2+1.5+.5*X2)+C(J1,11-1)*(-F4-1.5+.5*X4)+
*2.*(SIGR(J1,11)*G1+SIGR(J1,11-1)*G3)
A(I,9)=C(J1,11)*.5*(-F2-X2)+SIGR(J1,11)*G1
I1=I1+1
50
C
CONTINUE
CONTAGEM DA ULTIMA LINHA DE CADA BLOCO
F1=FY(I1-1)/FX(J)
F2=FY(I1-1)/FX(J1)
F3=FY(I1)/FX(J1)
F4=FY(I1)/FX(J)
X1=FX(J)/HY(I1-1)
X2=FX(J1)/FY(I1-1)
X3=FX(J1)/FY(I1)
X4=FX(J)/FY(I1)
G1=FX(J1)*FY(I1)
G2=FX(J)*FY(I1-1)
G3=FX(J)*FY(I1)
G4=FX(J1)*FY(I1-1)
A(I,1)=D(J,11-1)*C.5*(-F1-X1)+SIGR(J,11-1)*G2
A(I,2)=D(J,11-1)*(-F1+1.5+C.5*X1)+C(J,11)*(-F4-1.5+.5*X4)+
*2.*(SIGR(J,11-1)*G2+SIGR(J,11)*G3)
A(I,3)=D(J,11-1)*(0.5*F1+1.5-X1)+C(J1,11-1)*(C.5*H2-1.5-X2)+
*2.*(SIGR(J,11-1)*G2+SIGR(J1,11-1)*G4)
A(I,4)=D(J,11-1)*(H1+2.*X1)+D(J1,11)*(H3+3.*X3)+D(J1,11)*
*(H3-3.*X3)+D(J,11)*(F4-3.*X4)+4.*(SIGR(J,11-1)*G2+SIGR(J1,
*11)*G1+SIGR(J1,11-1)*G4+SIGR(J,11)*G3)
A(I,5)=D(J1,11-1)*0.5*(-F2-X2)+SIGR(J1,11-1)*G4
A(I,6)=D(J1,11-1)*(-F2-1.5+.5*X2)+C(J1,11)*(-H3+1.5+.5*X3)+
*2.*(SIGR(J1,11-1)*G4+SIGR(J1,11)*G1)
40
CONTINUE

```



```

C      MONTAGEM DO ULTIMO BLOCCO
      I=I+1
      IC14=IC1-IC5+1
      IC15=IC14+1
C      MONTAGEM DA PRIMEIRA LINHA DO ULTIMO BLOCCO
      F2=FY(I)/FX(JJ)
      F1=FY(I)/FX(JJ-1)
      X1=FX(JJ-1)/HY(I)
      X2=FX(JJ)/FY(I)
      G1=FX(JJ-1)*FY(I)
      G2=FX(JJ)*HY(I)
      A(I,1)=C(JJ-1,1)*(-2.*F1+X1)+4.*SIGR(JJ-1,1)*G1
      A(I,2)=C(JJ-1,1)*(-H1-X1)+2.*SIGR(JJ-1,1)*G1
      A(I,3)=C(JJ-1,1)*2.*(F1+X1)+C(JJ,1)*2.*(F2+X2)+8.*(SIGR(
      *JJ-1,1)*G1+SIGR(JJ,1)*G2)
      A(I,4)=C(JJ-1,1)*(H1-2.*X1)+C(JJ,1)*(H2-2.*X2)+4.*(SIGR(
      *JJ-1,1)*G1+SIGR(JJ,1)*G2)
C      MONTAGEM DAS LINHAS INTERMEDIARIAS DO ULTIMO BLOCCO
      IC16=I+1
      IC17=IC1-1
      I1=2
      CC 60 I=IC16,IC17
      H1=FY(I1-1)/FX(JJ-1)
      F2=FY(I1)/FX(JJ-1)
      H2=FY(I1-1)/FX(JJ)
      F4=FY(I1)/FX(JJ)
      X1=FX(JJ-1)/FY(I1-1)
      X2=FX(JJ-1)/FY(I1)
      X3=FX(JJ)/FY(I1-1)
      X4=FX(JJ)/FY(I1)
      G1=FX(JJ-1)*HY(I1-1)
      G2=FX(JJ-1)*FY(I1)
      G3=FX(JJ)*FY(I1-1)
      G4=FX(JJ)*FY(I1)
      A(I,1)=C(JJ-1,I1-1)*C.5*(-H1-X1)+SIGR(JJ-1,I1-1)*G1
      A(I,2)=C(JJ-1,I1-1)*(-F1+1.5+C.5*X1)+C(JJ-1,I1)*(-F2-1.5+
      *C.5*X2)+2.*(SIGR(JJ-1,I1-1)*G1+SIGR(JJ-1,I1)*G2)
      A(I,3)=C(JJ-1,I1)*C.5*(-F2-X2)+SIGR(JJ-1,I1)*G2
      A(I,4)=C(JJ-1,I1-1)*(C.5*H1+1.5-X1)+C(JJ,I1-1)*(C.5*H2-1.5-
      *X3)+2.*(SIGR(JJ-1,I1-1)*G1+SIGR(JJ,I1-1)*G3)
      A(I,5)=C(JJ-1,I1-1)*(F1+3.*X1)+C(JJ,I1)*(F4+3.*X4)+
      *C(JJ,I1-1)*(H2-3.*X3)+C(JJ-1,I1)*(F2-3.*X2)+4.*(SIGR(JJ-1,
      *I1-1)*G1+SIGR(JJ,I1)*G4+SIGR(JJ,I1-1)*G3+SIGR(JJ-1,I1)
      **G2)
      A(I,6)=C(JJ,I1)*(C.5*F4+1.5-X4)+C(JJ-1,I1)*(C.5*H2-1.5-X2)+
      *2.*(SIGR(JJ,I1)*C4+SIGR(JJ-1,I1)*G2)
      I1=I1+1
60    CONTINUE
C      ULTIMA LINHA DO ULTIMO BLOCCO
      F1=FY(I1-1)/FX(JJ-1)
      F2=FY(I1)/FX(JJ-1)
      F3=FY(I1-1)/FX(JJ)
      F4=FY(I1)/FX(JJ)
      X1=FX(JJ-1)/FY(I1-1)
      X2=FX(JJ-1)/FY(I1)
      X3=FX(JJ)/FY(I1-1)
      X4=FX(JJ)/FY(I1)
      G1=FX(JJ-1)*FY(I1-1)
      G2=FX(JJ-1)*HY(I1)
      G3=FX(JJ)*FY(I1-1)
      G4=FX(JJ)*FY(I1)
      A(I,1)=C(JJ-1,I1-1)*C.5*(-H1-X1)+SIGR(JJ-1,I1-1)*G1
      A(I,2)=C(JJ-1,I1-1)*(-F1+1.5+C.5*X1)+C(JJ-1,I1)*(-H2-1.5+.5*
      *X2)+2.*(SIGR(JJ-1,I1-1)*G1+SIGR(JJ-1,I1)*G2)
      A(I,3)=C(JJ-1,I1-1)*(C.5*F1+1.5-1)+C(JJ,I1-1)*(C.5*H2-
      *1.5-X3)+2.*(SIGR(JJ-1,I1-1)*G1+SIGR(JJ,I1-1)*G3)
      A(I,4)=C(JJ-1,I1-1)*(H1+3.*X1)+C(JJ,I1)*(F4+3.*X4)+
      *C(JJ,I1-1)*(F3-3.*X3)+C(JJ-1,I1)*(F2-3.*X2)+4.*(SIGR(
      *JJ-1,I1-1)*G1+SIGR(JJ,I1)*G4+SIGR(JJ,I1-1)*G3+SIGR(
      *JJ-1,I1)*G2)
      WRITE(6,1)((A(I,J),J=1,9),I=1,IC1)
      RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE MATRIZ (X)
C     SE SUBPROGRAMA COMPE A MATRIZ DE FISSAO E ESPALFAMENTO
COMMON/DEL/FX(20),FY(20)
COMMON/REG1/C(400,300),D(20,20),SIGR(20,20)
COMMON/REG2/I1,J1,IC6,IC1,IC2,IC3,IC4,IC5,IC6,IC7,ALCG
DIMENSION X(20,20)

C
C
DC IC I=1,IC1
DC IC J=1,5
C(I,J)=C.
C
10 CCONTINUE
C     PRIMEIRA LINHA, PRIMEIRO ELCCO
C(I,1) =16.*X(I,1)*FX(I)*FY(I)
C(I,2) =8.*X(I,1)*FX(I)*FY(I)
C(I,3) =8.*X(I,1)*FX(I)*FY(I)
C(I,4) =4.*X(I,1)*FX(I)*FY(I)
C
C     DEMAIS LINHAS INTERMEDIARIAS DO PRIMEIRO ELCCO
DC IC I=2,IC4
C(I,1) =4.*X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)
C(I,2) =8.*(X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)+X(I,I)*FX(I)*FY(I))
C(I,3)=4.*X(I,I)*FX(I)*FY(I)
C(I,4) =2.*X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)
C(I,5) =4.*(X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)+X(I,I)*FX(I)*FY(I))
C(I,6) =2.*X(I,I)*FX(I)*FY(I)
30 CCONTINUE
C     ULTIMA LINHA DO PRIMEIRO ELCCO
C(I,1) =4.*X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)
C(I,2) =8.*(X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)+X(I,I)*FX(I)*FY(I))
C(I,3) =2.*X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)
C(I,4) =4.*(X(I,I-1)*FX(I)*FY(I-1)+X(I,I)*FX(I)*FY(I))
C
C     PRIMEIRA LINHA DOS ELCCOS INTERMEDIARIOS
DC IC J=1,IC6
IC6=J*11+1
IC5=J*11
J1=J+1
C(IC6,1) =4.*X(J,1)*FX(J)*FY(1)
C(IC6,2) =2.*X(J,1)*FX(J)*FY(1)
C(IC6,3) =8.*(X(J,1)*FX(J)*FY(1)+X(J1,1)*FX(J1)*FY(1))
C(IC6,4) =4.*(X(J,1)*FX(J)*FY(1)+X(J1,1)*FX(J1)*FY(1))
C(IC6,5) =4.*X(J1,1)*FX(J1)*FY(1)
C(IC6,6) =2.*X(J1,1)*FX(J1)*FY(1)
C
C     DEMAIS LINHAS DOS ELCCOS INTERMEDIARIOS.
IC12=IC5+2
IC13=IC5+IC4
I1=2
DC SC I=IC12,IC13
C(I,1) =X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)
C(I,2)=2.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J,I1)*FX(J)*FY(I1))
C(I,3) =X(J,I1)*FX(J)*FY(I1)
C(I,4) =2.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J1,I1-1)*
* FX(J1)*FY(I1-1))
C(I,5)=4.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J,I1)*FX(J)*FY(I1)+
*X(J1,I1)*FX(J1)*FY(I1)+X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1))
C(I,6) =2.*(X(J1,I1)*FX(J1)*FY(I1)+X(J,I1)*FX(J)*FY(I1))
C(I,7) =X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1)
C(I,8) =2.*(X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1)+X(J1,I1)*FX(J1)*
* FY(I1))
C(I,9) =X(J1,I1)*FX(J1)*FY(I1)
I1=I1+1
50 CCONTINUE
C     ULTIMA LINHA DOS ELCCOS INTERMEDIARIOS
C(I,1) =X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)
C(I,2)=2.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J,I1)*FX(J)*FY(I1))
C(I,3) =2.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J1,I1-1)*FX(J1)*
* FY(I1-1))
C(I,4)=4.*(X(J,I1-1)*FX(J)*FY(I1-1)+X(J,I1)*FX(J)*FY(I1)+
* X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1)+X(J1,I1)*FX(J1)*FY(I1))
C(I,5) =X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1)
C(I,6)=2.*(X(J1,I1-1)*FX(J1)*FY(I1-1)+X(J1,I1)*FX(J1)*
* FY(I1))
40 CCONTINUE
C     ULTIMO ELCCO

```

```

I=I+1
IC14=IC1-IC5+1
IC15=IC14+1
C
  PRIMEIRA LINHA DO ULTIMO BLOCC
C(I,1) =4.*X(JJ-1,1)*FX(JJ-1)*FY(1)
C(I,2) =2.*X(JJ-1,1)*FX(JJ-1)*HY(1)
C(I,3) =8.*(X(JJ-1,1)*FX(JJ-1)*FY(1)+X(JJ,1)*FX(JJ)*HY(1))
C(I,4) =4.*(X(JJ-1,1)*FX(JJ-1)*FY(1)+X(JJ,1)*FX(JJ)*FY(1)
* )
C
  LINHAS INTERMEDIARIAS DO ULTIMO BLOCC
IC16=I+1
IC17=IC1-1
I1=2
DO 60 I=IC16,IC17
C(I,1) =X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*FY(I1-1)
C(I,2) =2.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*HY(I1-1)+
* )X(JJ-1,I1)*FX(JJ-1)*FY(I1))
C(I,3) =X(JJ-1,I1)*FX(JJ-1)*HY(I1)
C(I,4) =2.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*HY(I1-1)+
* )X(JJ,I1-1)*FX(JJ)*HY(I1-1))
C(I,5) =4.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*HY(I1-1)+X(JJ-1,I1)*
*FX(JJ-1)*FY(I1)+X(JJ,I1-1)*FX(JJ)*FY(I1-1)+X(JJ,I1)*FX(JJ)*
*FY(I1))
C(I,6) =2.*(X(JJ,I1)*FX(JJ)*HY(I1)+X(JJ-1,I1)*FX(JJ-1)*
*FY(I1))
I1=I1+1
60 CONTINUE
C
  ULTIMA LINHA DO ULTIMO BLOCC
C(I,1) =X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*FY(I1-1)
C(I,2) =2.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*FY(I1-1)+
* )X(JJ-1,I1)*FX(JJ-1)*FY(I1))
C(I,3) =2.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*FY(I1-1)+X(JJ,I1-1)*
*FX(JJ)*HY(I1-1))
C(I,4) =4.*(X(JJ-1,I1-1)*FX(JJ-1)*FY(I1-1)+X(JJ-1,I1)*
*FX(JJ-1)*FY(I1)+X(JJ,I1-1)*FX(JJ)*FY(I1-1)+X(JJ,I1)*FX(JJ)*
*FY(I1))
WRITE(NLCC) ((C(I,J),J=1,6),I=1,IC1)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE SCMAT(SCMAT)
COMMON/DEL/FX(20),FY(20)
COMMON/REG3/I1,JJ,ICG,IC1,IC2,IC3,IC4,IC5,IC6,IC7,NLCC
COMMON/REG6/S(2C,2C)
DIMENSION SIME1(400)
SCMAT=C.
SIME1(1)=(6.*S(1,1)+2.*S(2,1))/8.
SIME1(1)=(6.*S(1,1)+2.*S(1,2))/8.
SIME2=(6.*S(2,1)+2.*S(2,2))/8.
SMEME=(6.*SIME1+2.*SIME2)/8.
SIME2=(6.*S(1,2)+2.*S(2,2))/8.
SCMA=((S(1,1)+S(2,1)+S(1,2)+S(2,2))/36.+(SIME1+SIME1(1)+
* )SIME2+SIME2)/9.+4.*SMEME/9.)*4.*FX(1)*FX(1)
SIME1(1)=SIME2
SCMAT=SCMAT+SCMA
DO 40 I=2,I1
F1=FX(I-1)*FX(1)
F2=FX(I)**2.
F3=FX(I-1)**2.
F4=FX(I-1)*(FX(I-1)+FX(I))
SIME1(1)=(8.*S(1,1)*F3-2.*S(1,1)*F2+6.*S(1,1)*F1+5.*S(1+1,1)*F1+
* )S(1+1,1)*F2-3.*S(1-1,1)*F1+S(1-1,1)*F2)/(8.*F4)
SIME3=(6.*S(1+1,1)+2.*S(1+1,2))/8.
SMEME=(6.*SIME2+3.*SIME3-SIME1)/8.
SIME2=(8.*S(1,2)*F3-2.*S(1,2)*F2+6.*S(1,2)*F1+5.*S(1+1,2)*F1+
* )S(1+1,2)*F2-3.*S(1-1,1)*F1+S(1-1,1)*F2)/(8.*F4)
SCMA=((S(1,1)+S(1+1,1)+S(1,2)+S(1+1,2))/36.+(SIME3+SIME2+
* )SIME1(1)+SIME2)/9.+4.*SMEME/9.)*4.*FX(1)*FX(1)
SCMAT=SCMAT+SCMA
SIME1=SIME2
SIME2=SIME3
SIME1(1)=SIME2
40 CONTINUE

```

```

C      CC 50 J=2,00
      (CALCULC CC HESTC CC REATOR)
      X1=HY(J-1)*FY(I)
      X2=FY(J)**2.
      X3=FY(J-1)**2.
      X4=FY(J-1)*(HY(J-1)+FY(J))
      SJME1=(8.*S(1,J)*X3-2.*S(1,J)*X2+6.*S(1,J)*X1+5.*S(1,J+1)*X1+
      *S(1,J+1)*X2-3.*S(1,J-1)*X1+S(1,J-1)*X2)/(8.*X4)
      SJME2=(8.*S(2,J)*X3-2.*S(2,J)*X2+6.*S(2,J)*X1+5.*S(2,J+1)*X1+
      *S(2,J+1)*X2-3.*S(2,J-1)*X1+S(2,J-1)*X2)/(8.*X4)
      SMEME=(6.*SJME1+2.*SJME2)/8.
      SIME2=(6.*S(1,J+1)+2.*S(2,J+1))/8.
      SCMA=((S(1,J)+S(1,J+1)+S(2,J)+S(2,J+1))/36.+(SJME1+SJME2+
      *SIME1(1)+SIME2)/5.+4.*SMEME/5.)*4.*HX(I)*FY(J)
      SCMAT=SCMAT+SCMA
      SIME1(1)=SIME2
      CC 50 I=2,11
      H1=HX(I-1)**2.
      F2=FX(I)**2.
      F3=FX(I-1)*FX(I)
      F4=FX(I-1)*(HX(I-1)+FX(I))
      X1=FY(J-1)**2.
      X2=FY(J)**2.
      X3=FY(J-1)*FY(J)
      X4=FY(J-1)*(FY(J-1)+FY(J))
      SIME2=(8.*S(1,J+1)*F1-2.*S(1,J+1)*F2+6.*S(1,J+1)*F3+5.*S(1+1,J+1)
      **F3+S(1+1,J+1)*F2-3.*S(1-1,J+1)*F3+S(1-1,J+1)*F2)/(8.*F4)
      SJME3=(8.*S(1+1,J)*X1-2.*S(1+1,J)*X2+6.*S(1+1,J)*X3+5.*S(1+1,J+1)
      *X3+S(1+1,J+1)*X2-3.*S(1+1,J-1)*X3+S(1+1,J-1)*X2)/(8.*X4)
      SMEME=(6.*SJME2+3.*SJME3-SJME1)/8.
      SCMA=((S(1,J)+S(1,J+1)+S(1+1,J)+S(1+1,J+1))/36.+(SJME3+SJME2+
      *SIME1(1)+SIME2)/5.+4.*SMEME/5.)*4.*FX(I)*FY(J)
      SCMAT=SCMAT+SCMA
      SIME1(I)=SIME2
      SJME1=SJME2
      SJME2=SJME3
5C      CCNTINLE
      RETURN
      ENC

```

```

SUBROUTINE SPAN
CCMPCN/REG2/IC(4CC,3CC),INZ(4CC)
CCMPCN/REG3/II,JJ,IC8,IC1,IC2,IC3,IC4,IC5,IC6,IC7,NLCC
IC(1,1)=1
IC(1,2)=2
IC(1,3)=IC2
IC(1,4)=IC3
INZ(1)=4
CC 3C I=2,IC4
IC(1,1)=I-1
IC(1,2)=I
IC(1,3)=I+1
IC(1,4)=IC4+1
IC(1,5)=I+11
IC(1,6)=I+IC2
INZ(1)=6
CCNTINLE
IC(1,1)=I-1
IC(1,2)=I
IC(1,3)=IC5-1
IC(1,4)=IC5
INZ(1)=4
CC 4C J=1,IC6
IC8=J*11+1
IC9=J*11
J1=J+1
IC(IC8,1)=IC9-IC4
IC(IC8,2)=IC9-IC7
IC(IC8,3)=IC8
IC(IC8,4)=IC8+1
IC(IC8,5)=IC9+IC2
IC(IC8,6)=IC9+IC3
INZ(IC8)=6

```

```

IC12=IC5+2
IC13=IC5+IC4
I1=2
CC 5C I=IC12,IC13
IC(1,1)=1-IC2
IC(1,2)=1-I1
IC(1,3)=1-IC4
IC(1,4)=1-1
IC(1,5)=1
IC(1,6)=1+1
IC(1,7)=1+IC4
IC(1,8)=1+I1
IC(1,9)=1+IC2
INZ(I)=9
I1=I1+1
5C CONTINUE
IC(1,1)=1-IC2
IC(1,2)=1-I1
IC(1,3)=1-1
IC(1,4)=1
IC(1,5)=1+IC4
IC(1,6)=1+I1
INZ(I)=6
4C CONTINUE
I=I+1
IC14=IC1-IC5+1
IC15=IC14+1
IC(1,1)=IC14
IC(1,2)=IC15
IC(1,3)=1
IC(1,4)=1+1
INZ(I)=4
IC16=1+1
IC17=IC1-1
I1=2
CC 6C I=IC16,IC17
IC(1,1)=1-IC2
IC(1,2)=1-I1
IC(1,3)=1-IC4
IC(1,4)=1-1
IC(1,5)=1
IC(1,6)=1+1
INZ(I)=6
I1=I1+1
6C CONTINUE
IC(1,1)=1-IC2
IC(1,2)=1-I1
IC(1,3)=1-1
IC(1,4)=1
INZ(I)=4
RETURN
ENC

```

```

SUBROUTINE SPAM1(N,EFS,IS,NZM,IF)
COMMON/REG1/A(4CC,3CC),D(2C,2C),SIGR(2C,2C)
COMMON/REG2/IC(4CC,3CC),INZ(4CC)
COMMON/REG7/ B(4CC),X(4CC)
DIMENSION IX(4CC),IY(4CC),IZ(4CC)

```

```

C
C SOLUCAC DE UM SISTEMA DE EQUACOES ALGEBRICAS AX=B,
C ATRAVES DO METODO DE ELIMINACAO DE GAUSS, APLICANDO
C TECNICAS PARA MATRIZES ESPARSAS.
C

```

```

CC 1 I=1,N
IY(I)=1
1 IZ(I)=1
IF(NZM .EQ. 1) GO TO 2C5
C ARRANJO DOS ELEM. DE A EM ORDEM CRESCENTE.
CC 2CC I=1,N
J1=1
IK=1
NZ=INZ(I)
IF(NZ .EQ. 1) GO TO 2CC

```

```

C     MLC=MLC+1
      DC 16 K=12,N
      IF(I2(K) .EQ. NJ) GC TC 17
16    CONTINUE
17    I2(K)=1
      I2(I2)=NJ
      J=I2(I)+1
      DC 18 K=2,J
      IF(I2(K) .EQ. NJ) GC TC 19
18    CONTINUE
19    I2(K)=I2(2)
      I2(2)=NJ
      I=NJ
14    A1=A(I,1)
      A(I,1)=C.
      E(I)=E(I)/A1
      NZ=INZ(I)
      DC 24 K=1,NZ
24    A(I,K)=A(I,K)/A1
C     CPERACCES DE ELIMINACAC.
      NM=I2(I)+1
      IF(NM .GE. 3) GO TC 25
      IF(I5 .EQ. 2) GC TC 20
      GC TC 10
25    DC 40 L=3,NM
      I1=I2(L)
      A2=A(I1,1)
      A(I1,1)=C.
C     KCE=KCE+1
      NZ=INZ(I)
      IF(NZ .GT. 1) GC TC 57
C     DESLCCAMENTO DE ELEMENTOS ALFA LINHA.
      IF(INZ(I1) .EQ. 1) GC TC 56
      K3=INZ(I1)-1
      DC 303 K4=1,K3
      IC(I1,K4)=IC(I1,K4+1)
      A(I1,K4)=A(I1,K4+1)
303  CONTINUE
      INZ(I1)=INZ(I1)-1
      GC TC 56
57    NN=IC(I,NZ)
      NZ1=INZ(I1)
      IF(IC(I1,NZ1) .GT. NN) NN=IC(I1,NZ1)
      DC 50 K=12,NN
50    X(K)=C.
      IF(NZ1 .EQ. 1) GC TC 55
      DC 51 K1=2,NZ1
      K=IC(I1,K1)
      X(K)=A(I1,K1)
51    CONTINUE
55    DC 52 K1=2,NZ
      K=IC(I,K1)
      X(K)=X(K)-A2*A(I,K1)
52    CONTINUE
      K1=C
      INZ(I1)=INZ(I1)-1
      DC 53 K=12,NN
      IF(X(K) .EQ. C) GC TC 53
      K1=K1+1
      A(I1,K1)=X(K)
      IC(I1,K1)=K
53    CONTINUE
C     KCN=KCN+NZ-(K1-INZ(I1))
C     KEC=KEC+(K1-INZ(I1))
      INZ(I1)=K1
56    E(I1)=E(I1)-A2*E(I)
      IF(INZ(I1) .GT. NZ1) NZ1=INZ(I1)
40    CONTINUE
      IF(I5 .EQ. 1) GC TC 10
20    CONTINUE
      GC TC 33
10    CONTINUE
C     SUBSTITUICAO REGRESSIVA.
33    J=I2(N)

```

```

204 CC 201 J=J1,N
    CC 202 K1=1K,NZ
    IF(1C(1,K1) .EQ. 0) CC TC 203
202 CCNTINLE
201 CCNTINLE
203 IALX=1C(1,1K)
    1C(1,1K)=1C(1,K1)
    1C(1,K1)=IALX
    AX=A(1,1K)
    A(1,1K)=A(1,K1)
    A(1,K1)=AX
    1K=1K+1
    IF(1K .GE. NZ) CC TC 200
    J1=J+1
    CC TC 204
200 CCNTINLE
    NZM=1
C DET. DA TCL DO SISTEMA.
205 AM=A(1,1)
    CC 206 I=1,N
    NZ=1NZ(1)
    CC 206 K=1,NZ
    IF(ABS(AM) .GE. ABS(A(1,K))) CC TC 206
    AM=A(1,K)
206 CCNTINLE
    TCL=EPS*ABS(AM)
    IF(1S .EQ. 2) CC TC 2
    N1=N-1
    CC 10 I2=1,N1
    I=I2(12)
    L=1
    IX(1)=C
    AM=C.
    NZ=12+1F
    IF(N2 .GT. N) NZ=N
    CC 11 J1=I2,N2
    J=I2(J1)
    IF(1C(J,1) .NE. 12) CC TC 11
    L=L+1
    IX(1)=IX(1)+1
    IX(L)=J
    IF(ABS(A(J,1)) .LE. ABS(AM)) CC TC 11
    AM=A(J,1)
    NJ=J
11 CCNTINLE
    IF(ABS(AM) .GT. TCL) CC TC 12
    CC TC 101
2 N1=N-1
    CC 20 I2=1,N1
    I=I2(12)
    L=1
    IX(1)=C
    NZ=1+1F
    IF(N2 .GT. N) NZ=N
    CC 21 J1=I2,N2
    J=I2(J1)
    IF(1C(J,1) .NE. 12) CC TC 21
    L=L+1
    IX(1)=IX(1)+1
    IX(L)=J
21 CCNTINLE
    NJ=IX(2)
    IF(ABS(A(NJ,1)) .GT. TCL) CC TC 12
22 NZ=IX(1)+1
    CC 23 K=2,NZ
    NJ=IX(K)
    IF(ABS(A(NJ,1)) .GT. TCL) CC TC 15
23 CCNTINLE
    NJ=IX(2)
101 1S=-1
    IF(IX(1) .EQ. 0) CC TC 150
12 IF(NJ .EQ. 1) CC TC 14
C MLCANCA DE LINHAS.
15 CCNTINLE

```

```

      NZ=INZ(J)
      DO 3C K=1,NZ
      IF(IC(J,K) .NE. C) GO TO 32
3C  CONTINUE
      GO TO IC1
32  E(J)=E(J)/A(J,K)
      DO 3C J=2,N
      IB=N-J+1
      J1=I2(I1)
      NZ=INZ(J1)
      IF(IC(J1,NZ) .EQ. C) GO TO 3C
      DO 3C K=1,NZ
      IA=IC(J1,K)
      I1=I2(IA)
      E(J1)=E(J1)-A(J1,K)*E(I1)
3C  CONTINUE
      DO 34 I=1,N
      J=IY(I)
      K=IZ(J)
34  X(I)=E(K)
15C RETURN
      END

```