

BR 9/26577

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

INIS-BR-2

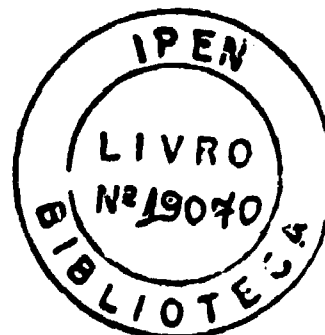
INIS-BR-2441.

**UM SISTEMA DE OBTENÇÃO DE UM PRÉ-PROJETO OTIMIZADO  
DE UM NÚCLEO DE UM REATOR NUCLEAR**

**LUIZ ANTONIO MAI**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de "Mestre na Área de Concentração em Reactores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientadora: Dra. Nanami Kosaka



**SÃO PAULO**  
**1988**

### ERRATA

Na página 17, no eixo vertical da figura 3.2, onde se lê  $f(x)$ , leia-se Y.

Na página 31, na tabela 4.1, onde se lê  $-.0043$ , leia-se  $.0043$ .

Na página 37, o resultado do problema resolvido para o reator nuclear do tipo da usina de ANGRA-1 não está correto pois no vínculo V1,  $a \leq 200$ cm e o sistema está limitado a  $a \leq 150$ cm. Alterou-se o programa para esse exemplo e o resultado obtido após 191 iterações foi:

$$a^0 = 191,2 \text{ cm}$$

$$b^0 = 18,2 \text{ cm}$$

$$\epsilon^0 = 2,6 \%$$

$$H/V^0 = 1,5.$$

O valor de  $K_{ef}$  correspondente foi de 0,9722.

**"Todos os efeitos são  
recíprocos e nenhum  
elemento age sobre  
outro sem que ele  
próprio seja modifi-  
cado"**

**C. G. Jung**

## Agradecimentos

À profa. Dra. Nanami Kosaka pela orientação valiosa e paciência demonstrada durante a execução deste trabalho;

Aos colegas da RTF do IPEN/CNEN - SP pela amizade, apoio e incentivo e em especial: Antônio Belchior Jr., Alfredo Yuuitiro Abe, Carlos Roberto Ferreira, Mitsuo Yamaguchi, Marcos Roberto Rossini, Adimir dos Santos, Leda C. C. Bernardes Fanaro e também aos colegas da Seção CDC Lúcia Estela Menegatti e Gelson Toshio Otani;

Ao pessoal da Biblioteca e do CPD do IPEN/CNEN - SP por tudo;

À Marli Aparecida Bertelli pelo trabalho de digitação;

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN/CNEN - SP) e à Coordenadoria de Projetos Especiais da Marinha do Brasil pelo fornecimento das instalações e equipamentos.

Um Sistema de Obtenção de um Pré-Projeto  
Otimizado do Núcleo de um  
Reator Nuclear

Luiz Antonio Mai

Resumo

O trabalho proposto trata do desenvolvimento de um método de obtenção do pré-projeto de núcleo de um reator nuclear, de uma forma otimizada, levando-se em conta os objetivos do projeto, os limites físicos, econômicos e de segurança. Para tanto, simplificações foram feitas no modelo do reator (homogêneo e unidimensional) e nos cálculos (um grupo energético).

Foi adotado como modelo um típico reator PWR de potência e como parâmetros a serem otimizados: o diâmetro da região de combustível, a largura da região refletora, o enriquecimento médio e a razão de moderação. O objetivo é a obtenção da maior reatividade residual no final de um ciclo.

No trabalho é mostrado a resolução de um problema-exemplo, através do qual, concluiu-se sobre a eficiência, limitações e problemas surgidos. Também são dadas sugestões para um melhor desempenho do sistema e futuros trabalhos.

A System to Obtain an Optimized  
First Design of a Nuclear Reactor Core

Luiz Antonio Mai

Abstract

This work proposes a method for obtaining a first design of nuclear reactor cores. It takes into consideration the objectives of the project, physical limits, economical limits and the reactor safety. For this purpose, some simplifications were made in the reactor model: one energy-group, uni-dimensional and homogenous core.

The adopted model represents a typical PWR core and the optimized parameters are the fuel thickness, reflector thickness, enrichment and moderating ratio. The objective is to gain a larger residual reactivity at the end of the cycle.

This work also presents results for a PWR core. From the results, many conclusions are established: system efficiency, limitations and problems. Also some suggestions are proposed to improve the system performance for future works.

## ÍNDICE

1) <u>Introdução</u> .....	1
1.1 - Considerações Gerais .....	1
1.2 - Objetivos do Trabalho .....	3
1.3 - Procedimento .....	4
2) <u>Técnicas de Otimização</u> .....	6
2.1 - Método do Gradiente .....	7
2.2 - Método Variacional .....	9
2.3 - Programação Linear .....	10
2.4 - Programação Dinâmica .....	11
2.5 - Princípio Máximo de Pontryagin .....	12
3) <u>Descrição Geral do Sistema</u> .....	13
3.1 - Definição do Domínio .....	16
3.2 - Simulador .....	17
3.3 - Biblioteca-Fase .....	19
3.3.1 - Interpolador .....	20
3.4 - Otimizador .....	22
3.4.1 - Malhagem .....	24
3.4.2 - Método do Gradiente .....	24
4) <u>Problema Exemplo</u> .....	30
4.1 - Descrição do Problema .....	30
4.2 - Análise dos Resultados .....	32
4.2.1 - Tempo de Processamento .....	38

<b>5) <u>Considerações Finais</u></b>	
5.1 - Conclusões .....	39
5.2 - Sugestões .....	41
<b><u>APÊNDICE - A - Variação da Razão de Moderação</u></b>	
Ótima com a Queima .....	43
<b><u>APÊNDICE - B - Estudo da Variação da Razão de Moderação com os Parâmetros Básicos do Projeto</u></b>	
.....	46
B1 - Procedimento .....	47
B2 - Resultados .....	48
<b><u>APÊNDICE - C - Programas Utilizados</u></b>	53
C1 - CITHAMMER .....	53
C2 - CITATION .....	54
<b><u>APÊNDICE - D - Exemplos de Determinação de Máximos de Funções Vinculadas pelo Método do Gradiente</u></b>	
.....	55
<b><u>APÊNDICE - E Listagem do Programa</u></b>	58
<b><u>Referências Bibliográficas</u></b>	75



# Um Sistema de Obtenção de um Pré-Projeto Otimizado de Núcleo de um Reator Nuclear

## 1 - Introdução

### 1.1 - Considerações Gerais

Em projetos de reatores nucleares são exigidos inúmeros e demorados cálculos envolvendo vários códigos de computadores, tanto no que se refere a neutrônica e a termohidráulica como também a segurança do núcleo. Porém, todos esses cálculos são executados com base num projeto referência onde os parâmetros básicos já estão aproximadamente determinados. Estes cálculos são feitos levando-se em conta, tanto fatores de desempenho do reator como também fatores de ordem econômica e de segurança que muitas vezes vão de encontro aos primeiros. Assim, impõem-se a necessidade de esquematização de um processo que dose convenientemente os vários parâmetros envolvidos que estão limitados e, na maioria das vezes, vinculados entre si, de modo a obter-se um conjunto de parâmetros ótimo.

Um problema do tipo descrito acima constitui um típico problema de otimização com parâmetros vinculados. Problemas desse tipo podem ser resolvidos por vários métodos como os descritos no Capítulo 2.

Dada a importância de problemas de otimização dentro da área nuclear, vários autores têm trabalhado com os mais variados objetivos, através de diversas técnicas. Terney (1) fornece em seu trabalho uma compilação das principais técnicas de otimização em problemas de engenharia nuclear, Goldschmidt(2), através do *Princípio de Pontriagin* (item 2.5), otimizou a distribuição do combustível físsil para obter a mínima massa crítica em reatores rápidos numa dada potência, Wall(3) utiliza-se da técnica da *Programação Dinâmica* (item 2.4) na otimização do gerenciamento do combustível assim como Kallay(4) utiliza-se da mesma técnica em vários problemas de otimização do reator, Tzanos(5) usou a *Programação Linear* (item 2.3) para otimizar a distribuição de materiais em núcleos de reatores rápidos e Jachic(6,7,8) tem trabalhado com diversos objetivos na otimização de reatores rápidos regeneradores. Nesses trabalhos encontramos intensa bibliografia do tema que mostra a grande importância de problemas de otimização na engenharia nuclear.

De um modo mais amplo, problemas de otimização têm surgido em todos os campos da tecnologia e economia como consequência da exigência de máxima eficácia em nossa sociedade moderna.

Técnicas clássicas de otimização são conhecidas há mais de 150 anos e, com o advento do computador em meados da

década de 1940, nova classe de problemas de otimização surgiu que normalmente não podem ser resolvidos através dos métodos de cálculo tradicionais, são os chamados *problemas de programação*. Esses problemas têm atualmente muito interesse pois surgem em importantes questões práticas na indústria, comércio, planejamento de administração e também na área militar.

## 1.2 - Objetivos do Trabalho

O trabalho aqui apresentado consiste no desenvolvimento de um método de obtenção do projeto referência de um reator térmico, que será denominado de pré-projeto, de uma forma otimizada, obedecendo aos objetivos a que foi proposto, os limites físicos, econômicos e de segurança. Para tanto, simplificações foram feitas no modelo de reator que são: o reator é homogêneo e unidimensional. Os cálculos também foram simplificados para um grupo de energia.

Essas simplificações, no entanto, não comprometem o método em si, pois o objetivo do trabalho consiste justamente em estabelecer as bases da metodologia de cálculo, podendo ser generalizado posteriormente para um reator de duas ou três dimensões e mais de um grupo energético. Essa generalização vai depender basicamente do

que se convencionou chamar de simulador, que será visto no item 3.2.

### 1.3 - Procedimento

Adotou-se como modelo um típico reator PWR de potência e como parâmetros a serem otimizados: a dimensão da região combustível do reator ( $a$ ), a largura da região refletora ( $b$ ), o enriquecimento isotópico médio ( $\epsilon$ ) e a razão de moderação ( $H/U$ ). Foi imposta condições para esses parâmetros, obedecendo ao modelo adotado e, através do módulo de otimização (figura 1.1), obtem-se o conjunto de parâmetros que fornece a maior reatividade no final do ciclo do reator. A figura 1.1 mostra o processo simplificado de otimização do sistema.

O módulo de otimização está diretamente acoplado a um simulador neutrônico nodal unidimensional para a geração dos estados intermediários necessários ao processo de otimização. Este, por sua vez, está acoplado a uma biblioteca de dados nucleares necessária aos cálculos neutrônicos. Esses dados nucleares foram gerados para o final do ciclo do reator por questões de segurança (vide apêndice A). Maiores detalhes do sistema serão expostos no Capítulo 3.

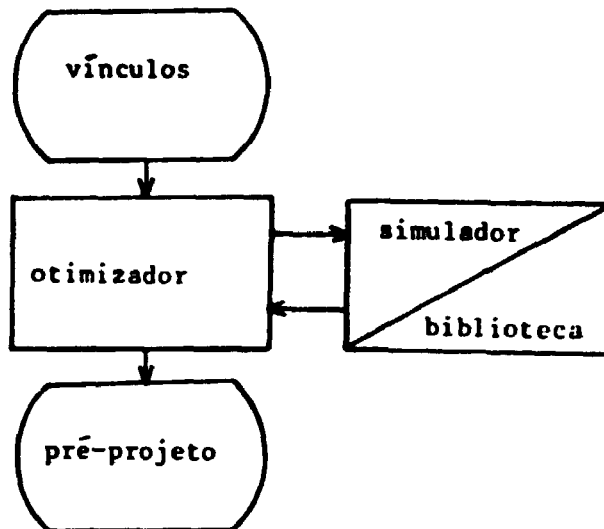


Figura 1.1 - Fluxograma geral simplificado do sistema de otimização

No Capítulo 2 resumiu-se as técnicas de otimização mais comuns, no Capítulo 4 é descrito e analisado os resultados de um problema exemplo e por fim, no Capítulo 5, reuniu-se as principais conclusões e sugestões para possíveis trabalhos futuros. A listagem do programa fonte deste sistema, em linguagem FORTRAN, é apresentada no apêndice E.

## 2 - Técnicas de Otimização

Na área nuclear, os primeiros métodos de otimização utilizados foram os métodos clássicos, onde se destaca entre eles o método gráfico. Com o surgimento dos computadores digitais, desenvolveu-se técnicas mais elaboradas, com uma utilização específica para cada objetivo.

De uma maneira geral, pode-se colocar qualquer problema de otimização segundo o esquema seguinte:

- a) extremar (maximizar ou minimizar) a função objetiva;
- b) pela manipulação adequada dos parâmetros (variáveis) envolvidas;
- c) restritos a vínculos.

Reescrevendo de uma maneira formal tem-se:

- a) extremar  $F(x_1, x_2, x_3, \dots)$
- b) através dos parâmetros  $x_1, x_2, x_3, \dots$
- c) onde  $g(x_1, x_2, x_3, \dots) = 0$

A função  $g$  resume os vínculos do problema.

A colocação de um problema de otimização na forma exposta acima, pode não ser uma tarefa fácil, consistindo muitas vezes no grande trabalho da otimização.

Neste capítulo são descritas sucintamente algumas das principais técnicas de otimização utilizadas atualmente em engenharia nuclear.

## 2.1 - Método do Gradiente(9)

Este é o mais comum dos chamados métodos de ascendência, onde se parte de um ponto inicial e, através de uma certa regra, encontra-se uma direção de ascendência da função objetiva pesquisada. Em seguida, move-se nesta direção até encontrar-se um máximo relativo da função objetiva nesta linha. No novo ponto uma nova direção é determinada e o processo é repetido. A diferença entre os diversos algoritmos de ascendência é a regra através da qual são escolhidas as direções de pesquisa.

O método do gradiente é utilizado no presente trabalho de otimização, porém não se dispõe da expressão analítica da função objetiva e a pesquisa da direção é feita então consultando-se o simulador, assumindo que a "função" seja monotônica.

O método do gradiente é definido pelo algoritmo iterativo

$$x_{k+1} = x_k + \zeta \nabla F(x_k) \quad (2.1)$$

onde  $\zeta$  é um escalar não-negativo que maximiza  $F(x_k + \zeta \nabla F(x_k))$ , isto é, pesquisa-se a partir do ponto  $x_k$  ao longo da direção do gradiente, até que se encontre um ponto máximo nessa linha. Esse máximo é  $x_{k+1}$ . Esse procedimento é repetido até que se encontre uma solução que satisfaça um critério pré-estabelecido.

Os chamados multiplicadores de Lagrange são empregados para obter-se um extremo de  $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  quando sujeito a vínculos  $g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ , fazendo

$$H_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = F(x_1, x_2, \dots, x_n) + \lambda_i g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.2)$$

e

$$\left. \frac{\partial H_i}{\partial x_i} \right|_{x_j = x_j^0} = 0, \quad \text{onde: } \begin{array}{l} i=1, \dots, m \\ j=1, \dots, n. \end{array} \quad (2.3)$$

Obtem-se  $n \times m$  equações que somadas as  $m$  equações de vínculos fornece um sistema completo para determinar-se  $x_j$  e  $\lambda_i$ .

No item 3.4.2 será vista a aplicação do método do gradiente dentro do sistema geral de otimização.



## 2.2 - Método Variacional

No cálculo diferencial, determina-se o máximo ou o mínimo de uma função. No cálculo variacional, o que se quer é o máximo ou o mínimo do que se chama de funcional. Um funcional ( $J[y]$ ) é definido como:

$$J[y] = \int_a^b F[x, y(x), y'(x)] dx. \quad (2.4)$$

Extremar (minimizar) um funcional é determinar qual função  $y$  torna  $J[y]$  um mínimo.

No cálculo diferencial acha-se o extremo de uma função num conjunto de pontos, ao passo que no cálculo variacional, acha-se o extremo de um funcional num conjunto de funções.

Demonstra-se (10) que extremar  $J[y]$  é o mesmo que,  $y$  seja tal que  $F$  satisfaça a seguinte equação:

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial F}{\partial y'} \right] = 0. \quad (2.5)$$

Esta equação é chamada de equação de *Euler-Lagrange*.

### 2.3 - Programação Linear

Em se tratando de otimização através da programação linear, tanto a função objetiva, quanto os vínculos estão expressos necessariamente na forma linear, ou seja a função objetiva é representada por

$$F(\vec{x}) = \sum_{j=1}^n C_j x_j \quad (2.6)$$

e as restrições representadas por

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_j, \quad i=1,2,\dots,k. \quad (2.7)$$

Uma característica importante de problemas de programação linear é que o ponto extremo localiza-se somente nas fronteiras do domínio formado pelas restrições. Isso simplifica bastante o trabalho de busca do extremo, pois apenas tais pontos devem ser pesquisados dentre os infinitos contidos no espaço de soluções possíveis.

Dispõem-se de vários códigos que resolvem este tipo de problema e a maior parte deles baseiam-se no chamado *método Simplex*(11,12).

## 2.4 - Programação Dinâmica

Programação dinâmica é aplicável em problemas de otimização de processos seqüenciais e em processos contínuos que podem ser aproximados, mediante certos critérios, por processos seqüenciais.

O esquema de recarga de um reator é um típico exemplo da aplicação da programação dinâmica. Então por exemplo, se o número de escolhas em cada recarga é  $C(3)$  e o número de recargas, durante a vida do reator é  $N$ , o número de possibilidades de arranjo do núcleo será  $C^N$ . Números razoáveis para essas quantidades são:

$$10 \leq C \leq 30$$

$$15 \leq N \leq 30$$

Portanto tem-se:

$$10^{15} \leq C^N \leq 30^{30} = 10^{44}.$$

Considerando que cada caso leve  $10^{-3}$  segundos para ser calculado no computador, o menor número de possibilidades estipulado acima ( $10^{15}$ ) levaria aproximadamente 31.500 anos para serem calculados. Esse número fornece motivação suficiente para que se pesquise um método mais prático.

A programação dinâmica promove a necessária organização das possibilidades, reduzindo o problema a um tamanho razoável.

Este método baseia-se no chamado *Princípio de Bellman*(13,12) que diz que tendo encontrado uma solução ótima para um estágio isoladamente, a solução ótima do próximo estágio segue aquele mesmo critério.

## 2.5 - Princípio de Pontryagin

Ao contrário do método da programação dinâmica que trata de processos sequenciais discretos (ou aproximadamente discretos), o método de Pontryagin trata de processos sequenciais contínuos que podem ser traduzidos por equações diferenciais.

O teorema fundamental da teoria de Pontryagin, provado por meio da teoria Lebesgue(14), foi formulado inicialmente e usado em estudos de problemas de natureza não nuclear, posteriormente porém, aparece nesta área como mostra a referência 2.

### **3 - Descrição Geral do Sistema**

Neste capítulo é descrito mais detalhadamente cada parte que compõe o sistema de otimização proposto, que está mostrado na forma de diagrama de blocos na figura 3.1 da página seguinte.

O objetivo é determinar, para uma queima de 26.000 MWD/T (apêndice A), o valor do  $K_{ef}$  máximo, obedecendo a certas restrições. Dessa maneira, seguindo o esquema padrão descrito na seção anterior, o problema de otimização fica formalmente colocado da seguinte maneira:

- função objetiva

MÁX.: ( $K_{ef}$ )

- parâmetros de projeto a serem otimizados

. largura da região combustível ( $a$ )

. largura da região reletora ( $b$ )

. enriquecimento médio ( $c$ )

. razão de moderação ( $H/U$ )

- vínculos

. os vínculos podem ser divididos em 3 grupos distintos:

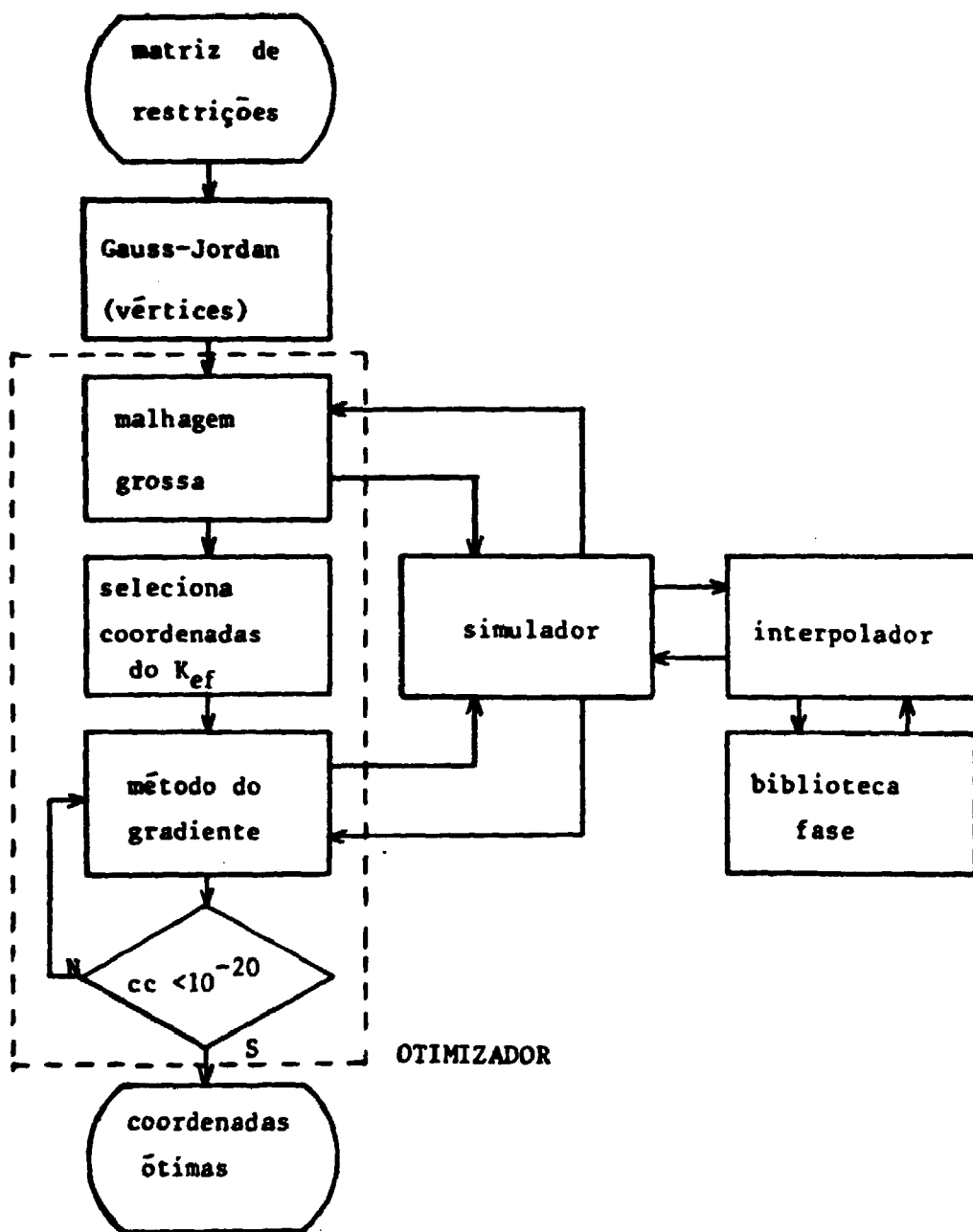


Figura 3.1: Esquemática geral do sistema de otimização.

. físicos: certamente haverá restrições espaciais de várias espécies e assim tem-se:

$$a \leq a_0 \quad (V1)$$

$$b \leq b_0 \quad (V2)$$

$$e \ a + b \leq c_0 \quad (V3)$$

. econômicos: é razoável supor uma restrição no enriquecimento:

$$c \leq c_0 \quad (V4)$$

. Segurança: é necessário garantir a segurança do reator durante toda a operação e isso vai impor uma restrição no coeficiente de temperatura ( $\alpha_T$ ):

$$\alpha_T < 0 \quad (V5)'$$

Com excessão do último, todos os demais vínculos estão expressos em termos dos parâmetros do projeto. Além disso é necessário, para o sistema, que os vínculos estejam expressos na forma linear.

No apêndice C, é descrito em detalhes a transformação do vínculo (V5)' na forma linear dos parâmetros do projeto, através de curvas de razão de moderação. Será visto então que o último vínculo transforma-se na seguinte inequação:

$$0,0043a - 0,117b - 0,162c + H/U \leq 0,43 \quad (V5)$$

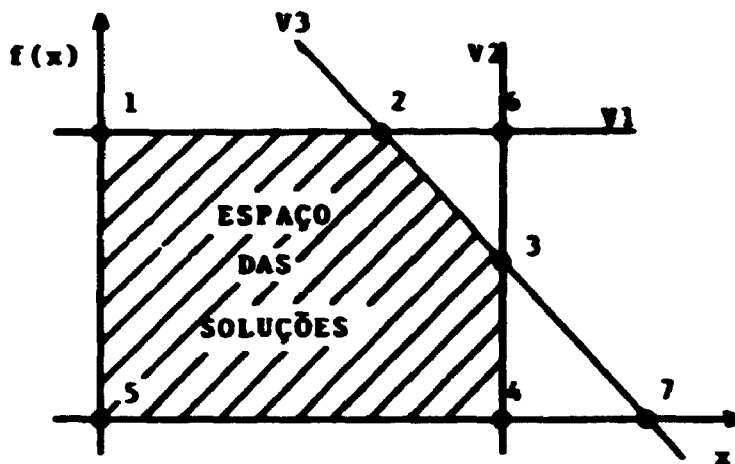
### 3.1 - Definição do Domínio

Uma vez estabelecidos os vínculos lineares entre os parâmetros, é possível determinar o domínio das soluções possíveis num hiperespaço de 4 dimensões convexo que será denominado de hiperespaço das soluções.

O método Simplex (11) de resolução de problemas de programação linear (PL) utiliza o método de Gauss-Jordan para a obtenção dos vértices do domínio, e este será o método utilizado neste trabalho. Esse método consta fundamentalmente em introduzir variáveis de folga para obter um sistema de equações e gerar sistemas na chamada forma canônica, ou seja, a base do sistema deve ser uma matriz identidade. Resolve-se o sistema para as variáveis da base, anulando-se as variáveis não básicas.

Agindo dessa forma, passando por todas as variáveis, obtem-se vários vértices, sendo que muitos dos quais não interessam. A figura 3.2 abaixo ilustra melhor esse problema.





**Figura 3.2:** Vértices gerados pelo método de Gauss-Jordan.

Os vértices 6 e 7 gerados não interessam pois não satisfazem pelo menos um dos vínculos. Isto é solucionado testando-se cada um dos vértices gerados.

### 3.2 - Simulador

O simulador utilizado baseia-se no método nodal absorção-produção, em uma dimensão e em um grupo de energia(15). A utilização do método modal num sistema desse tipo é fundamental por ser rápido, dado o número de execuções necessárias. As vantagens serão ainda maiores para cálculos que envolvam duas ou três dimensões e mais de um grupo de energia.

O método nodal absorção-produção consiste fundamentalmente em relacionar a corrente de nêutrons através da interface entre dois nodos por meio de

coeficientes de acoplamento nodais. Esses coeficientes são, geralmente, funções da geometria e das propriedades de produção e absorção de nêutrons dos materiais e são calculados com base na equação de difusão de nêutrons. Necessita-se pois de constantes celulares homogêneas (seções de choque e coeficientes de difusão) que foram gerados pelo programa CITHAMMER(16) para a confecção da biblioteca-fase. Essas constantes são utilizadas pelo simulador por meio de uma interpolação lagrangeana quadrática (item 3.3.1).

Neste problema é considerado o nodo acoplado apenas com seus vizinhos imediatos. Dividiu-se o reator de tal forma que o tamanho do nodo seja o considerado ótimo segundo a referência 15. A figura 3.3 ilustra um caso com dez nodos no núcleo mais as duas regiões de refletores.

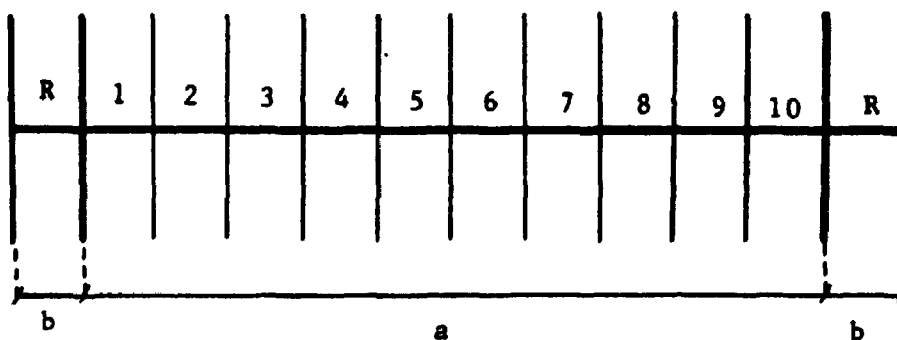


Figura 3.3: Divisão do reator em dez nodos mais as regiões refletoras.

O tamanho de nodo ótimo, conforme a referência 15 é de aproximadamente 11cm e a faixa de variação escolhida para o

núcleo do reator está entre 50 e 150 cm, de modo que N (número de divisões) está entre 5 e 14. Assim tem-se:

$$a_0 = 150 \text{ cm}$$

O limite inferior (50 cm) foi fixado dentro do próprio programa.

### 3.3 - Biblioteca-Fase

Como foi dito, para que seja possível calcular-se o estado atual do reator através do simulador, é necessário que se disponha de uma biblioteca de constantes nucleares (seções de choque e coeficientes de difusão). Esta biblioteca, denominada biblioteca-fase, é montada através do programa CITHAMMER onde as constantes geradas são funções dos parâmetros que definem o estado.

Através desta biblioteca, obtém-se as constantes nucleares para uma determinada combinação de parâmetros por meio de interpolação. Esta biblioteca forma um arquivo a parte que o programa acessa. Dessa forma torna-se mais fácil fazer modificações que por ventura possam ser necessárias. Na tabela 3.1 apresenta-se a biblioteca-fase.

Tabela 3.1: Biblioteca-Fase

H/U	$\epsilon = 1\%$	$\epsilon = 2\%$	$\epsilon = 3\%$	$\epsilon = 4\%$	$\epsilon = 5\%$	
0,6	1.090647738	1.098096427	1.107514433	1.11609367	1.123850214	D
1,2	0.920805643	0.951512808	0.985559901	1.01409143	1.037251213	
1,8	0.754189519	0.790926738	0.839914514	0.88220295	0.915545441	
2,4	0.646219675	0.678085927	0.730117291	0.77718530	0.814318415	
3,0	0.575339227	0.601186332	0.649453093	0.69532445	0.731968376	
0,6	0.021810222	0.021882479	0.021959743	0.02205712	0.022174024	$\Sigma_a$
1,2	0.022882194	0.023112544	0.023380056	0.02363950	0.023878612	
1,8	0.021902190	0.022295249	0.022803359	0.02326847	0.023662527	
2,4	0.020613728	0.021058482	0.021759471	0.02241098	0.022943232	
3,0	0.019387103	0.019833795	0.020628744	0.02139422	0.022015719	
0,6	0.018289813	0.019138646	0.020182550	0.02127509	0.022359164	$v\Sigma_f$
1,2	0.019547551	0.021351812	0.023434323	0.02526202	0.026807269	
1,8	0.017800686	0.020153300	0.023252610	0.02588047	0.027951052	
2,4	0.015810482	0.018185339	0.021968389	0.02523619	0.027730419	
3,0	0.014017259	0.016204710	0.020209920	0.02381228	0.026557865	

### 3.3.1 - Interpolador

O módulo de interpolação atua entre o simulador e a biblioteca-fase fornecendo as constantes nucleares adequadas do estado. O método de interpolação utilizado é a lagrangeana-quadrática(17). A fim de avaliar a qualidade das interpolações, foram feitos gráficos de  $\Sigma_a$ , D e  $v\Sigma_f$  em função de  $\epsilon$  e  $H/U$  a partir dos dados da biblioteca-fase. Através desses gráficos pode-se determinar a região mais sensível de variações que corresponde à faixa compreendida entre 1,0 e 2,0 para  $\epsilon$  e entre 0,6 e 1,2 para  $H/U$ . Além disso, para se interpolar um valor dentro desse intervalo, é necessário em todos os casos, 3 pontos da biblioteca-fase que nas curvas de  $\Sigma_a \times H/U$  e  $v\Sigma_f \times H/U$  delimitam um ponto de máximo. Esse comportamento pode comprometer ainda mais o

resultado interpolado. Escolheu-se então o ponto  $\epsilon = 1,5$  e  $H/U = 0,9$  para se interpolar e comparar com o cálculo efetuado pelo programa CITHAMMER, cujos resultados estão apresentados na tabela 3.2 abaixo.

**Tabela 3.2:** Comparação entre os resultados interpolados com os calculados.

$\epsilon = 1,5; H/U = 0,9$	D	$r_a$	$vL_f$
CITHAMMER	1,0247286	0,0231028	0,0205069
INTERPOL.	1,02192106	0,0228301	0,0201826
$\Delta \%$	0,27	1,18	1,58

O maior erro anotado foi 1,58% no valor de  $vL_f$ . Para diversos valores de  $a$  e  $b$  comparou-se o valor do fator de multiplicação efetivo calculado pelo simulador com as constantes da tabela 3.2. Os resultados constam na tabela 3.3.

**Tabela 3.3:**  $K_{ef}$  calculado com constantes interpoladas e calculadas.

$\epsilon = 1,5$ $H/U = 0,9$	$a = 100\text{cm}$ $b = 10\text{cm}$	$a = 120\text{cm}$ $b = 12\text{cm}$	$a = 140\text{cm}$ $b = 14\text{cm}$	$a = 160\text{cm}$ $b = 16\text{cm}$	$a = 180\text{cm}$ $b = 18\text{cm}$	$a = 200\text{cm}$ $b = 20\text{cm}$
CITHAMMER	0.874556	0.875907	0.877035	0.877990	0.878810	0.879520
INTERPOL	0.870957	0.872306	0.873433	0.874388	0.875208	0.875919
$\Delta \%$	0.411	0.411	0.411	0.410	0.410	0.409

Conclui-se, pela tabela 3.3, que o maior erro possível no valor do  $K_{ef}$  é sempre menor que 0,411% e que, portanto, o esquema de interpolação é perfeitamente aceitável.

Pela tabela observa-se que a variação máxima do  $K_{ef}$  entre a primeira comparação e a última é de apenas 0,56% para as constantes calculadas pelo programa CITHAMMER e 0,57% para as constantes calculadas via interpolação. Isso mostra que a variação do  $K_{ef}$  com a dimensão da região do combustível do reator ( $a$ ) se torna quase desprezível para  $a > 100$  cm.

### 3.4 - Otimizador

Neste item são dadas as bases teóricas, com algum detalhe, em que se baseiam os módulos do otimizador.

Uma vez estabelecido o domínio, dispondo do simulador, do interpolador e da biblioteca-fase, resta determinar as coordenadas, ou seja, os parâmetros que fornecerão o valor do fator de multiplicação efetivo ótimo ( $K_{ef}^{ot}$ ).

Para que se possa visualizar o procedimento do otimizador, supõe-se, por exemplo, que a função objetiva

seja função somente de 2 parâmetros (x e y) como mostra a figura 3.4 abaixo.

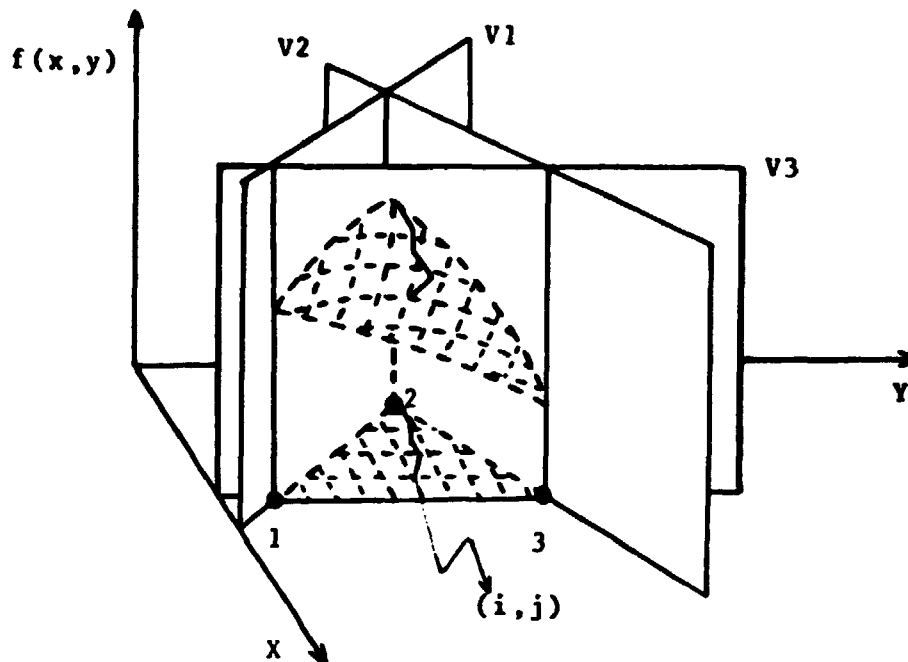


Figura 3.4: Função de duas variáveis vinculadas onde pode-se ver a malhagem e o caminho do método do gradiente.

O método de Gauss-Jordan determina o domínio, ou seja, os vértices 1, 2 e 3 da figura. Através desses pontos calcula-se o centro geométrico (CG) e então é traçada as malhas grossas (quadrícula na figura). Em cada nó da malha determina-se o  $K_{ef}$  selecionando o maior que será também comparado com o maior  $K_{ef}$  dos vértices. Dessa maneira restringe-se o domínio onde se encontra o ponto ótimo que será agora procurado através do método do gradiente (linha quebrada dentro do domínio).

### 3.4.1 - Malhagem

A malhagem foi executada a partir de frações das distâncias máximas entre o centro de massa e os vértices, de modo que cada malha tenha o tamanho adequado às dimensões da sua coordenada.

Cada nó é testado nos vínculos e, se pertencer ao domínio, é calculado o  $K_{ef}$  correspondente. Assim seleciona-se entre os pontos da malha e dos vértices, aquele que dará início ao método do gradiente.

### 3.4.2 - Método do Gradiente

O método do gradiente foi descrito de modo sucinto no item 2.1. O algoritmo apresentado aqui baseou-se na descrição da referência 18.

Naquele item, o método do gradiente é definido pelo algoritmo iterativo

$$x_{k+1} = x_k + \zeta \nabla F(x_k), \quad (3.1)$$

onde  $\zeta$  é um escalar não-negativo que maximiza  $F(x_k + \zeta \nabla F(x_k))$ .



Determina-se  $\zeta$  neste problema através da interpolação quadrática entre 3 pontos. O processo é descrito a seguir.

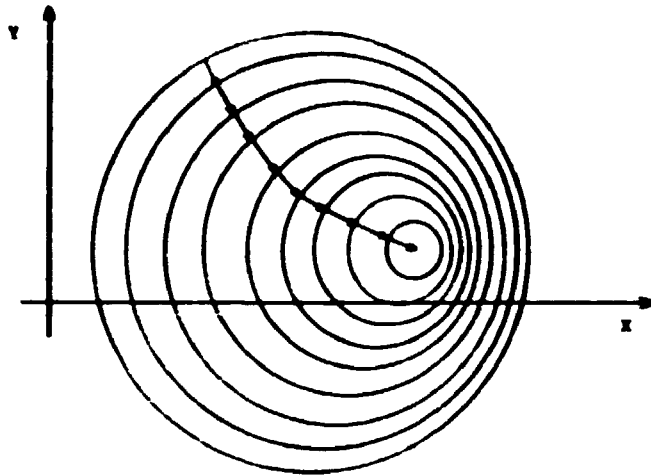
Assume-se um valor inicial da função ( $F_0$ ) correspondente a um ponto  $\tilde{x}$ . O primeiro ponto é determinado através de

$$\tilde{x}_1 = \tilde{x} + \zeta_1 \nabla F(\tilde{x}), \quad (3.2)$$

com  $\zeta_1$  inicialmente igual à unidade. Se a função  $F_1$  é menor que  $F_0$ , então  $\zeta_1$  é sucessivamente reduzido de 50% até que  $F_1 > F_0$ . O último ponto  $\tilde{x}_2$  é determinado dobrando-se a distância até que  $F_2 < F_1$ . Uma parábola é então determinada para um  $\zeta$  dado por:

$$\zeta = \frac{0,5(\zeta_1^2 - \zeta_2^2)F_0 + \zeta_2^2 F_1 - \zeta_1 F_2}{(\zeta_1 - \zeta_2)F_0 + \zeta_1 F_1 - \zeta_1 F_2} \quad (3.3)$$

Nota-se, pela expressão acima, que o máximo da parábola é obtido exatamente apenas para funções quadráticas. Para outras funções, aplica-se a interpolação quadrática várias vezes para obter-se máximos na direção considerada e, a partir daí, nova direção é calculada e novo máximo determinado. Mostra-se isso na figura 3.5 para uma função de 2 variáveis representada graficamente por suas curvas de nível.



**Figura 3.5:** Procura do máximo através do método do gradiente.

Até aqui não se levou em consideração os vínculos. Como foi visto, existem restrições de 2 tipos:

$$\begin{aligned}
 \text{a) } & x_i \leq k_i \\
 \text{b) } & \sum_i a_i x_i \leq k_i
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

Pode-se agrupar essas restrições na seguinte notação:

$$C_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, c \tag{3.5}$$

Isso indica que há  $C$  diferentes restrições  $C_1, C_2, \dots, C_c$ . Algumas dessas restrições são funções de mais de um parâmetro.

O problema de otimização com restrições pode ser resolvido com a introdução da chamada função-penalidade (PF) à função original, ou seja:

$$F^*(\tilde{x}) = F(\tilde{x}) + PF \quad (3.6)$$

onde  $F(\tilde{x})$  é o problema sem restrições e  $F^*(\tilde{x})$  é o novo problema.

Existem diferentes formas de se determinar PF. A que se mostrou mais adequada, depois de vários testes, para o sistema foi

$$PF = -cc \sum_{i=1}^c \frac{1}{[C_i(\tilde{x})]^2}, \quad (3.7)$$

onde  $cc$  é uma constante positiva.

Para entender esse artifício, observa-se que dentro do domínio  $C_i(\tilde{x})$  é positiva e quando  $\tilde{x}$  se aproxima da fronteira, PF torna-se muito pequeno, o que é desejável.

O parâmetro  $cc$  é uma "constante" que é inicializada igual a 0,001. Se numa rodada  $cc$  é relativamente grande, PF será grande mesmo longe da fronteira do domínio. Então o máximo de  $F^*(\tilde{x})$  da equação 3.6 estará distante do máximo de  $F(\tilde{x})$ .

Supõe-se agora que  $cc$  é reduzido e o parâmetro  $\tilde{x}$  achado no parágrafo anterior é usado como parâmetro inicial de uma nova rodada de otimização. Por ser  $cc$  menor, o novo

ótimo estará mais próximo do ótimo da função original  $F(\tilde{x})$ . Se  $cc$  é reduzido suficientemente de valor, as variações do ótimo real estarão bem reduzidas. Observa-se que a medida que  $cc$  se aproxima de zero, o problema  $F^*(\tilde{x})$  se aproxima de  $F(\tilde{x})$ . Devido ao fato de  $cc$  ser reduzido seqüencialmente, este método é chamado de técnica de maximização seqüencial (TMS). O estágio onde  $cc$  tende a zero é representado na figura 3.6 abaixo, para uma função com apenas uma variável.

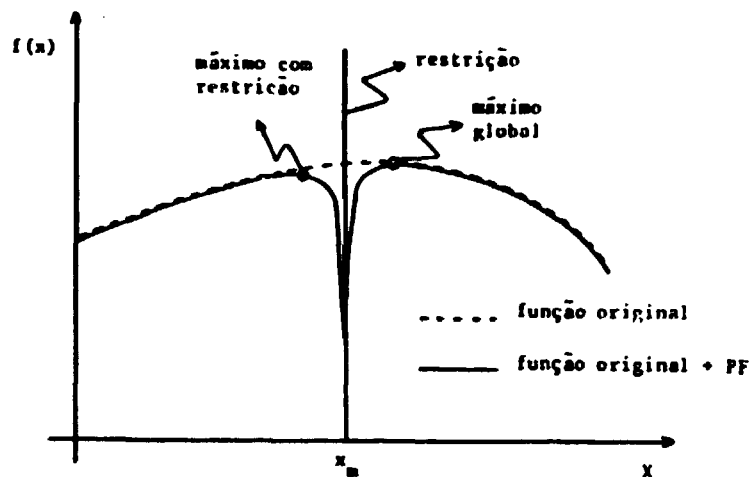


Figura 3.6: Função original e a função original mais PF, com uma restrição e uma variável.

Neste sistema  $cc$  vai até  $1,0 \times 10^{-10}$ . Com uma função de uma variável e com uma restrição, como na figura acima, nota-se que o máximo da função vinculada neste caso, está bem próximo ao vínculo, quando o máximo real estaria no vínculo. A precisão de quão próximo o máximo está do valor real é dado por  $cc$ . Diminuindo muito o valor de  $cc$ , aumenta-se muito o tempo de processamento, assim ponderando concluiu-se que um bom valor para  $cc$  mínimo é o acima.

Testando-se o método do gradiente, acima exposto, para vários tipos de funções vinculada obteve-se um bom resultado. As soluções de algumas das funções testadas são dadas no apêndice D onde foram comparadas com soluções de outros métodos numéricos.

Neste sistema, como foi adiantado no item 3.3.1, a variação do  $K_{ef}$  com a coordenada  $a$  (tamanho do núcleo) é muito pequena nesta faixa que foi apresentada. O gráfico da figura 3.7 mostra esse fato para um conjunto qualquer das outras coordenadas ( $b$ ,  $c$  e  $H/U$ ).

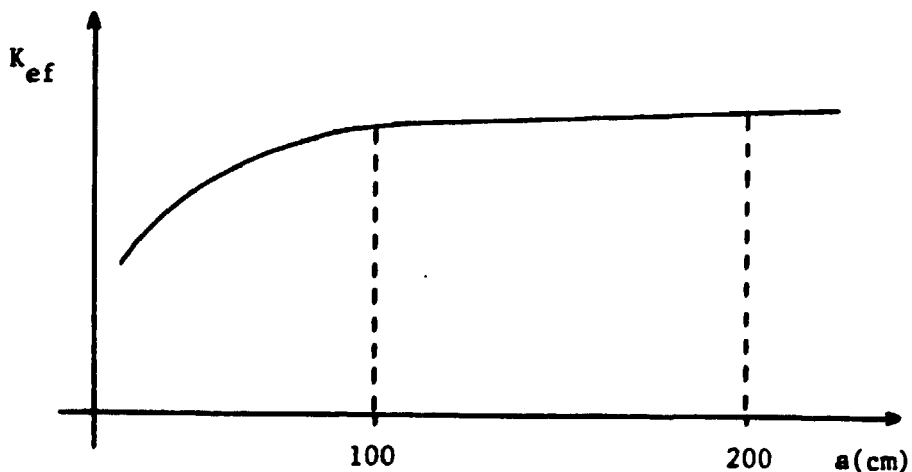


Figura 3.7:  $K_{ef}$  como função do tamanho do núcleo ( $a$ ).

Este fato prejudica o método do gradiente, pois o simulador é pouco sensível a pequenas variações da coordenada  $a$ . Este problema é explicado quantitativamente no item 4.2.

#### 4 - Problema Exemplo

Até aqui foram expostas as bases teóricas do sistema de otimização proposto. Neste capítulo é resolvido um problema exemplo, utilizando-se este sistema, a fim de que seja estabelecido os limites de sua aplicabilidade, precisão, vantagens, desvantagens e problemas na sua utilização.

##### 4.1 - Descrição do Problema

Colocando-se o problema exemplo da maneira formal exposta no início do capítulo anterior, tem-se:

- função objetivo

$$\text{MÁX.: } (K_{ef})$$

- restrições

$$V1 - a \leq 150 \text{ cm}$$

$$V2 - b \leq 20 \text{ cm}$$

$$V3 - (a+b) \leq 160 \text{ cm}$$

$$V4 - c \leq 5\%$$

$$V5 - 0,0043a - 0,117b - 0,162c + H/U \leq 0,43$$

Essas restrições são introduzidas no sistema através da leitura de um arquivo. Esse arquivo é mostrado na tabela 4.1.

**Tabela 4.1: Arquivo das restrições.**

1.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	150.
0.	1.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	20.
1.	1.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	160.
0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	5.
-.0043	-.117	-.162	1.	0.	0.	0.	0.	1.	.43

Nota-se, pela tabela acima, que a matriz de restrições foi completada para estar, desde o início, na forma canônica.

Existe um sexto vínculo implícito ao programa dado por:

$$V6' - a \geq 50 \text{ cm}$$

Este vínculo corresponde a uma limitação do simulador, pois de acordo com a referência 15, o tamanho de modo ótimo é aproximadamente 11 cm e são necessários pelo menos três nodos acoplados, dando um total de 33 cm como espessura mínima da região combustível. Em vistas desse fato e também observando-se a literatura, foi adotado 50 cm como limite inferior para a coordenada  $a$ .

## 4.2 - Análise dos Resultados

Na página seguinte é mostrada a saída dos resultados do programa relativa ao problema exemplo (quadro 4.1).

Pelo quadro 4.1, conclui-se que o domínio possui 21 vértices, sendo que apenas dois deles não se encontram nos eixos do sistema (os dois primeiros). Dentro desse domínio foram calculados 8.349 pontos que, somados aos dois vértices que fornecem coordenadas não nulas, somam 8.351 pontos pesquisados. Desse total o ponto de coordenadas

$$a = 141,7 \text{ cm};$$

$$b = 17,9 \text{ cm};$$

$$c = 5,0\%;$$

$$H/U = 2,5$$

é o que apresenta o maior  $K_{ef}$  (1,20087) e pertence a uma fronteira do domínio. Esse ponto dá início ao método do gradiente. No caso do ponto de maior  $K_{ef}$  ser um dos vértices, este ponto deve sofrer uma pequena redução em suas coordenadas, de modo a colocá-lo no interior do domínio. Essa redução é de 0,5% nas coordenadas  $b$ ,  $c$  e  $H/U$  e 1% na coordenada  $a$ . Essa redução é necessária para dar início ao método do gradiente, pois no ponto de vértice a função penalidade é infinita, o que impossibilitaria o processo.



Quadro 4.1 - Saída de resultados

VERTICE 1 - ( 1.400E+02, 2.000E+01, 5.000E+00, 2.978E+00)  
D: .735162681 XA: .022059607 NYF: .026625982 XF: .011094159  
KEFF(VERT.- 1) = 1.196E+00  
VERTICE 2 - ( 1.500E+02, 1.000E+01, 5.000E+00, 1.765E+00)  
D: .922352099 XA: .023697407 NYF: .027933418 XF: .011638924  
KEFF(VERT.- 2) = 1.169E+00  
VERTICE 3 - ( 1.400E+02, 2.000E+01, 5.000E+00, .000E+00)  
VERTICE 4 - ( 1.500E+02, 1.000E+01, 5.000E+00, .000E+00)  
VERTICE 5 - ( 1.400E+02, 2.000E+01, .000E+00, 2.168E+00)  
VERTICE 6 - ( 1.500E+02, 1.000E+01, .000E+00, 9.550E-01)  
VERTICE 7 - ( 1.400E+02, 2.000E+01, .000E+00, .000E+00)  
VERTICE 8 - ( 1.500E+02, 1.838E+00, .000E+00, .000E+00)  
VERTICE 9 - ( 1.500E+02, 1.000E+01, .000E+00, .000E+00)  
VERTICE 10 - ( 1.500E+02, .000E+00, 5.000E+00, 5.950E-01)  
VERTICE 11 - ( 1.500E+02, .000E+00, 1.327E+00, .000E+00)  
VERTICE 12 - ( 1.500E+02, .000E+00, 5.000E+00, .000E+00)  
VERTICE 13 - ( 1.000E+02, .000E+00, .000E+00, .000E+00)  
VERTICE 14 - ( .000E+00, 2.000E+01, 5.000E+00, 3.580E+00)  
VERTICE 15 - ( .000E+00, 2.000E+01, 5.000E+00, .000E+00)  
VERTICE 16 - ( .000E+00, 2.000E+01, .000E+00, 2.770E+00)  
VERTICE 17 - ( .000E+00, 2.000E+01, .000E+00, .000E+00)  
VERTICE 18 - ( .000E+00, .000E+00, 5.000E+00, 1.240E+00)  
VERTICE 19 - ( .000E+00, .000E+00, 5.000E+00, .000E+00)  
VERTICE 20 - ( .000E+00, .000E+00, .000E+00, 4.300E-01)  
VERTICE 21 - ( .000E+00, .000E+00, .000E+00, .000E+00)

NO. DE PONTOS PESQUISADOS= 8349 KMAX = 1.20087E+00  
AMAX= 1.417E+02 BMAX= 1.792E+01 EMAX= 5.000E+00 HMAX= 2.539E+00

INICIO DO METODO DO GRADIENTE

A(CM)=140.30E+00 B(CM)=17.833E+00 E(Z)=4.4585E+00 H/U=2.5256E+00 KEF= 1.0703E+00  
A(CM)=140.29E+00 B(CM)=17.905E+00 E(Z)=4.5887E+00 H/U=1.8997E+00 KEF= 1.1414E+00  
A(CM)=140.28E+00 B(CM)=17.905E+00 E(Z)=4.7411E+00 H/U=2.0807E+00 KEF= 1.1506E+00  
A(CM)=101.47E+00 B(CM)=18.755E+00 E(Z)=4.9853E+00 H/U=2.6720E+00 KEF= 1.1926E+00  
A(CM)=101.47E+00 B(CM)=18.755E+00 E(Z)=4.9865E+00 H/U=2.6719E+00 KEF= 1.1926E+00  
A(CM)=101.47E+00 B(CM)=18.758E+00 E(Z)=4.9969E+00 H/U=2.6900E+00 KEF= 1.1939E+00

COORDENADAS ENCONTRADAS PELO GRADIENTE

XMAX(1)= .10147288E+03 XMAX(2)= .18757605E+02 XMAX(3)= .49968791E+01 XMAX(4)= .26899591E+01  
VALOR DO KEFF PELO GRAD = 1.19395628E+00 PESQUISAS= 1685 ITERACOES= 105

COORDENADAS DO PONTO OTIMO

AMAX=140.90E+00 BMAX=18.758E+00 EMAX=4.9969E+00 HMAX=2.6900E+00

VALOR MAXIMO DO KEFF PERTENCENTE AO DOMINIO

KEFF(MAX)= 1.20118889E+00

Nota-se que o conjunto de coordenadas correspondente à primeira iteração, não é igual ao ponto inicial do método do gradiente com a referida redução. Isso é devido ao fato que esses valores impressos correspondem ao ponto de máximo da primeira parábola ajustada (item 3.4.2). Essas coordenadas, se comparadas ao ponto inicial, não são muito diferentes e no entanto, o valor do fator de multiplicação efetivo correspondente é cerca de 4% menor. Aqui deve-se lembrar que no método do gradiente não se tem a função real e sim a soma desta com a função penalidade e que, nas primeiras iterações, o valor da constante positiva  $c$  da equação 3.7 é relativamente grande. Isso dá como resultado uma distorção da função real, principalmente nas proximidades das bordas do domínio.

Neste exemplo a convergência se deu com 105 iterações. As coordenadas do ponto ótimo encontradas pelo método do gradiente são:

$$a = 101,5 \text{ cm,}$$

$$b = 18,8 \text{ cm,}$$

$$c = 5,0\%,$$

$$H/U = 2,7.$$

Esse resultado corresponde a um  $K_{ef}$  de 1,1939 que é menor que o ponto de início do método do gradiente.

O método do gradiente caminha no sentido de maximizar o fator de multiplicação efetivo, como de fato acontece. Porém a coordenada correspondente a largura da região combustível ( $a$ ) caminha no sentido de diminuir este fator, pois como pode-se observar nas várias iterações pelo quadro 4.1, o valor da coordenada  $a$  é cada vez menor. É bom lembrar que se está na região onde, mantidos os parâmetros  $b$ ,  $c$  e  $H/U$  constantes, o valor do  $K_{ef}$  não se altera significativamente com a variação de  $a$ , como já notado na figura 3.8. No entanto, se o método do gradiente iniciar do ponto cujo valor de  $a$  é mínimo, ou seja, pouco maior que 50 cm, esta coordenada cresce até um pouco mais de 90cm, que é exatamente o limite da zona de saturação do  $K_{ef}$ . Os outros parâmetros chegam aproximadamente aos mesmos valores anteriores. O valor correspondente do  $K_{ef}$  neste caso é 1,1908, isto é 0,26% menor que no cálculo anterior e 0,84% menor que o ponto inicial do método do gradiente.

Nesta zona de saturação, o incremento dado à coordenada  $a$  para que seja determinada a componente do gradiente correspondente, não é suficientemente grande a ponto de produzir variações no valor do fator de multiplicação efetivo. Isso tem como consequência praticamente a anulação dessa componente do gradiente. Na verdade era exatamente isso que se esperava que acontecesse. Porém, por efeito da variação das outras coordenadas no processo de otimização, particularmente  $H/U$ , a coordenada  $a$  é levada para pontos, ainda que pertencente ao trecho de saturação, que a fazem

diminuir constantemente mas que, no cômputo geral, levam a maximizar o  $K_{ef}$ .

O ponto que dá início ao método do gradiente não está localizado em um dos vértices, como poderia-se imaginar inicialmente e sim numa fronteira. E mais, observando-se a série de iterações, nota-se que algumas variáveis aumentam e diminuem ao longo do processo. Isso sugere que a hipersuperfície do fator de multiplicação efetivo não é isotônica como foi suposto no início do trabalho.

Este último fato e mais a existência de um limite de saturação na dimensão  $a$  do reator, faz com que a distribuição do  $K_{ef}$  ao longo da coordenada  $a$  seja de tal maneira instável que inviabilize o método do gradiente neste trecho.

Até esse ponto, as outras coordenadas caminharam no sentido de maximizar o  $K_{ef}$ . Neste sentido pode-se afirmar que os valores determinados pelo método do gradiente para essas variáveis são, com a aproximação conhecida, os valores ótimos. Sabe-se, no entanto, que aumentando-se a região combustível do reator ( $a$ ), mesmo dentro do limite de saturação (figura 3.8), o  $K_{ef}$  aumenta ligeiramente. Baseando-se nisso, após o método do gradiente, incrementa-se a coordenada  $a$  até o limite máximo das restrições, obtendo-se finalmente o conjunto de parâmetros ótimo para esse problema exemplo:

$$\begin{aligned}
 a &= 140,9 \text{ cm,} \\
 b &= 18,8 \text{ cm,} \\
 \epsilon &= 5,0\%, \\
 H/U &= 2,7,
 \end{aligned}$$

correspondendo a um fator de multiplicação dado por:

$$K_{ef} = 1,20119$$

Outros problemas foram resolvidos por esse sistema, entre eles um correspondente aos limites do reator nuclear da usina de ANGRA-1, cujas restrições são:

$$\begin{aligned}
 V1 - & a \leq 200 \text{ cm} \\
 V2 - & b \leq 20 \text{ cm} \\
 V3 - & a + b \leq 210 \text{ cm} \\
 V4 - & \epsilon \leq 2,6\% \\
 V5 - & 0,0043a - 0,117b - 0,162 + H/U \leq 0,43.
 \end{aligned}$$

Os resultados obtidos após 340 iterações foram:

$$\begin{aligned}
 a^0 &= 192,1 \text{ cm,} \\
 b^0 &= 17,8 \text{ cm,} \\
 \epsilon^0 &= 2,6\%, \\
 H/U^0 &= 1,5.
 \end{aligned}$$

O valor do  $K_{ef}$  correspondente foi de 0,9645.

#### 4.2.1 - Tempo de Processamento

O computador utilizado para os cálculos foi o CDC - CYBER 180/830 disponível a Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN - SP. Nesta máquina, a definição dos vértices e a malhagem (para esse problema exemplo) despenderam 33 minutos de processamento e o método do gradiente mais 12,2 minutos, dando um total de 45,2 minutos.

Durante esse processo foram gerados 10034 pontos da função objetiva.

O quadro 4.1 fornece outras informações sobre a saída de resultados do sistema.

## 5 - Considerações Finais

Neste capítulo sintetiza-se os principais fatos concluídos nos capítulos anteriores e também são dadas sugestões para melhoria do sistema apresentado e trabalhos futuros.

### 5.1 - Conclusões

A observação mais importante é, sem dúvida, o fato da coordenada correspondente à largura do núcleo caminhar, no método do gradiente, no sentido desta ser diminuída quando dentro do trecho de saturação da hipersuperfície do  $K_{ef}$ . Tentou-se explicar este fato no capítulo anterior, porém não foi possível quantificar precisamente o ocorrido, mesmo em se tratando de um sistema relativamente simples como o apresentado. Aqui sabia-se, a priori, o sentido de variação da largura da região combustível do reator que leva ao máximo valor do  $K_{ef}$ , o que possibilitou contornar o problema. Num sistema mais complicado porém, com variáveis que não permitam que se tenha sensibilidade sobre sua variação com relação à função-resposta, o método do gradiente poderá levar a soluções enganosas, também com relação ao sentido de variação da coordenada com a função-resposta, como aconteceu neste trabalho com a coordenada  $a$ .

Mostrou-se no item 3.4.2, que o método do gradiente foi muito eficiente em se tratando de funções com expressões analíticas. Conclui-se agora, no entanto, que funções mais complexas que só podem ser determinadas ponto a ponto, o método do gradiente apresenta problemas e só poderá ser utilizado com um bom conhecimento de como o sentido de variação dos parâmetros influem no comportamento da função resposta.

Para funções que apresentam as características de complexidade citadas, a melhor alternativa seria, depois da malhagem grossa, delimitar um sub-domínio e refinar as malhas, repetindo esse processo até o limite de precisão estipulado. Mesmo assim, esse processo só poderia ser utilizado em domínios onde a função se comporte com certa suavidade. Cabe lembrar que esse método de busca de máximo só será viável se se dispôr de um simulador rápido.

Uma outra observação importante que, de certa forma, está relacionada ao fato, diz respeito ao ponto ótimo não estar num dos vértices no problema-exemplo estudado, como era esperado. Todavia, este ponto está numa fronteira ( $\epsilon = 5\%$ ).

Estes dois fatos demonstraram a precariedade de uma pré-concepção intuitiva de fenômenos, quando não se domina inteiramente as interrelações de variáveis, pois seus comportamentos individuais, mesmo quando bem conhecidos,



podem ser alterados (e no caso da coordenada  $\alpha$  foi invertido) produzindo efeitos imprevisíveis. Quando se dispõe de uma expressão analítica que descreve determinado fenômeno, a própria expressão matemática, muitas vezes, fornece uma antevisão do comportamento da função-resposta. Num caso como o descrito no presente trabalho, isso não é possível, o que facilita muito a ocorrência de previsões equivocadas, que por sua vez levam a caminhos de solução que não são os melhores.

## 5.2 - Sugestões

No item 1.2 foi dito que o objetivo primordial do trabalho era estabelecer uma metodologia de otimização para a obtenção do pré-projeto do núcleo de um reator e que, para isso, simplificações foram feitas (reator homogêneo, unidimensional e cálculos monoenergéticos). Como sugestão imediata propõe-se a otimização de um reator bidimensional com 2 grupos de energia. Logicamente, para isso, necessita-se de um simulador compatível.

Para efetivação desta proposta, contornando os problemas surgidos neste trabalho, sugere-se, como dito no item anterior, a execução de malhagens consecutivas, abandonando o método do gradiente. Aqui, além dos problemas já vistos, o simulador vai ser mais lento devido ao aumento

das dimensões e de grupos energéticos, tornando o método do gradiente muito demorado.

Para tornar o sistema mais completo, além da melhoria do cálculo proposta acima, o acréscimo de vínculos tornaria o pré-projeto encontrado mais próximo do reator final, facilitando toda a série de cálculos posteriores. Por exemplo, poderiam ser acrescentados vínculos que envolvam a termohidráulica do reator e outros vínculos de segurança e economia.

Esse acréscimo de vínculos não modificaria o sistema de cálculo substancialmente, a dificuldade seria estabelecer os próprios vínculos, uma vez que o sistema exige que estes sejam lineares (vide estabelecimento do vínculo V5 no apêndice B).

Uma vez dispondo de um simulador bidimensional trabalhando com 2 grupos de energia com a rapidez necessária e dos principais vínculos envolvendo os parâmetros básicos na forma linear, ter-se-á uma ferramenta realmente útil no auxílio de projetos de núcleos de reatores nucleares.

APÊNDICE A: Variação da Razão de Moderação Ótima com a Queima

Variando-se a razão de moderação para uma célula unitária padrão de um elemento combustível tipo ANGRA-I, calculou-se o valor do fator de multiplicação infinito ( $K_{\infty}$ ) com o programa CITHAMMER(16) para várias etapas de queima a uma certa potência constante. A figura A.1 mostra o perfil de queima de cada caso.

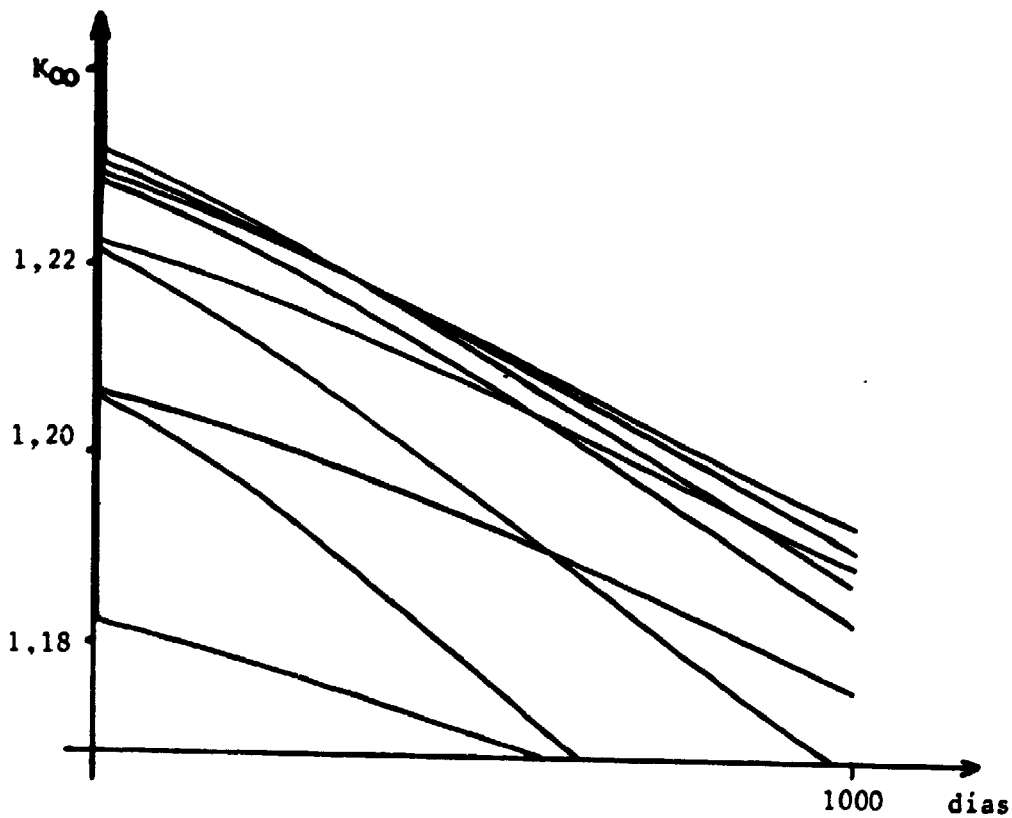


Figura A.1:  $K_{\infty}$  como função do tempo de queima

Nota-se, pelas curvas, vários cruzamentos que podem ser explicados como uma competição entre o fator de utilização térmica ( $f$ ) e a probabilidade de escape à ressonância ( $p$ ).

A figura A.2 mostra a curva de  $K_{\infty}$  versus  $H/U$  (razão de moderação) para diversas etapas de queima. Verifica-se que a medida que se processa a queima, a razão de moderação ótima se desloca para valores menores de  $H/U$ .

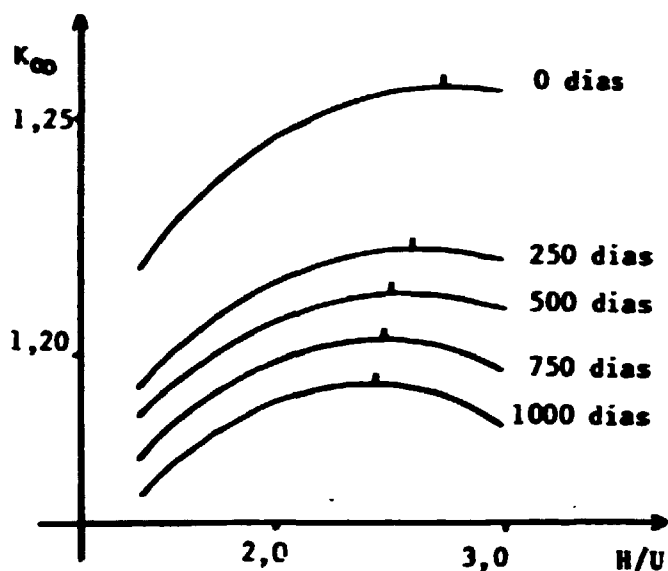
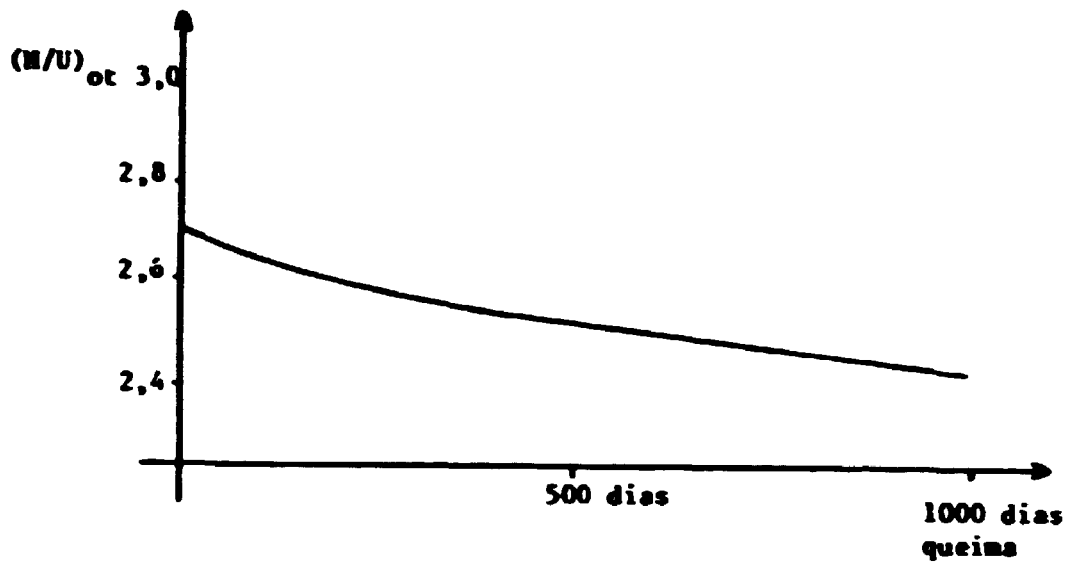


Figura A.2:  $K_{\infty}$  como função de  $H/U$  para 5 etapas de queima.

Determinando-se visivelmente os pontos de máximo da figura A.2, foi levantada a curva de razão de moderação ótima como função da queima (figura A.3)



**Figura A.3:** Razão de moderação ótima versus queima.

No sistema aqui apresentado, a queima foi estendida até 26.000 MWd/T, que corresponde, aproximadamente, ao limite do ciclo de um reator PWR tipo ANGRA-I. Nesta queima levantou-se as curvas de moderação de maneira a garantir a estabilidade inerente do reator até o fim do ciclo.

APÊNDICE B: Estudo da Variação da Razão de Moderação com os Parâmetros Básicos do Projeto

De acordo com o que foi mencionado no Capítulo 3, todos os vínculos do problema de otimização dos parâmetros do núcleo do reator homogêneo unidimensional, quais sejam: tamanho da região combustível ( $a$ ), largura do refletor ( $b$ ), enriquecimento ( $\epsilon$ ) e razão de moderação ótima ( $H/U$ ), devem se apresentar na forma de inequações lineares. Verificou-se naquela ocasião, que o vínculo que relaciona  $H/U$  com os demais parâmetros é o que apresenta maiores dificuldades, enquanto que os outros são obtidos de maneira imediata.

Neste apêndice desenvolve-se o procedimento para a obtenção dos coeficientes  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  e  $C_4$  da seguinte equação:

$$(H/U)_{ot} = C_1\epsilon + C_2a + C_3b + C_4 \quad (B1)$$

Aqui,  $(H/U)_{ot}$  é a razão de moderação ótima que forma o vínculo de  $H/U$ .

Os cálculos foram executados através de um método paramétrico com a utilização do programa CITHAMMER para geração de constantes nucleares e do programa CITATION(19) para os cálculos de reator.

## B.1 - Procedimento

Fixou-se um valor para o enriquecimento  $e$ , através do programa CITHAMMER, gerou-se as seções de choque microscópicas para diversas razões de moderação com 6 estágios de queima. Com valores de  $a$  e  $b$  também fixados, foram efetuados cálculos considerando a queima do combustível através do programa CITATION para os diversos casos. Para o último estágio da queima ( $\sim 26.000$  MWD/T) foi feito um gráfico de  $K_{ef}$  versus  $H/U$ , cuja forma geral é apresentada na figura B.1 abaixo (vide também apêndice A).

Através do gráfico obteve-se a razão de moderação ótima  $((H/U)_{ot})$  para um dado enriquecimento, largura da região combustível e largura do refletor.

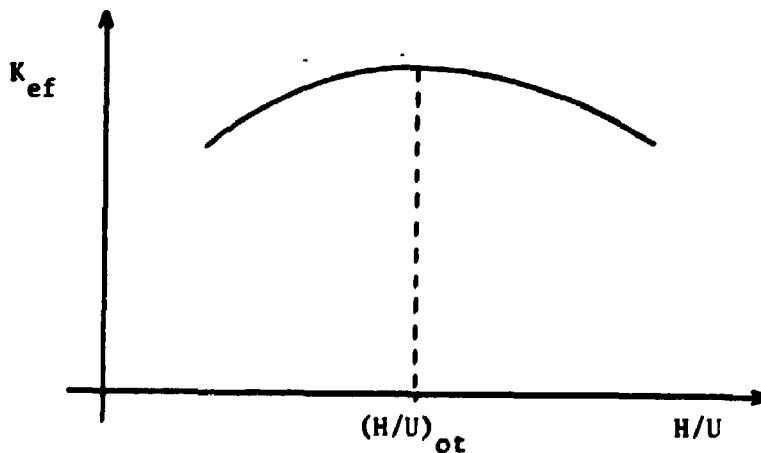


Figura B.1:  $K_{ef}$  versus  $H/U$  para um estágio da queima.

Variando-se  $e$ ,  $a$  e  $b$  e repetindo o processo mais 5 vezes, obteve-se um conjunto de pontos que determina um hiperplano médio através de uma regressão linear e, dessa

maneira, determina-se os coeficientes  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  e  $C_4$  procurados.

## B.2 - Resultados

Utilizou-se para os cálculos os valores  $\epsilon$ ,  $a$  e  $b$  que constam na tabela B.1 abaixo. Na mesma tabela encontra-se os valores de  $(H/U)_{ot}$  obtidos nos gráficos.

O objetivo é aproximar a função  $(H/U)_{ot}$  por uma função  $g(\epsilon, a, b)$  da família

$$C_1 \epsilon + C_2 a + C_3 b + C_4,$$

pelo método dos mínimos quadrados(17).

Aproximar a função  $(H/U)_{ot}$  tabelada nos pontos  $\epsilon_i$ ,  $a_i$  e  $b_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, 6$ , pelo método dos mínimos quadrados, significa determinar os coeficientes  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  e  $C_4$  do hiperplano  $C_1 \epsilon + C_2 a + C_3 b + C_4$  de modo que a soma dos quadrados dos erros em cada ponto seja mínima.



**Tabela B.1:** valores de  $\epsilon$ ,  $a$  e  $b$  e o correspondente

$$(H/U)_{ot} - Q = 26.000 \text{ MWD/T.}$$

CASO	$\epsilon$ (%)	$a$ (cm)	$b$ (cm)	$(H/U)_{ot}$
1	1	100	6	0,96
2	2	120	9	1,26
3	3	140	11	1,64
4	3,5	160	14	1,88
5	4,0	180	17	2,24
6	5,0	200	20	2,82

O residuo em cada ponto  $(\epsilon_i, a_i, b_i, (H/U)_{ot}^i)$  é dado por:

$$r(\epsilon_i, a_i, b_i, (H/U)_{ot}^i) = r_i = (H/U)_i - g(\epsilon_i, a_i, b_i, (H/U)_i) \quad (B2)$$

Portanto, deseja-se determinar  $C_1, C_2, C_3$  e  $C_4$  que minimiza

$$M(C_1, C_2, C_3, C_4) = \sum_{i=1}^6 r_i^2 = \sum_{i=1}^6 [(H/U)_i - C_1 \epsilon_i - C_2 a_i - C_3 b_i - C_4]^2 \quad (B3)$$

Para isso é necessário que

$$\frac{\partial M(C_1, C_2, C_3, C_4)}{\partial C_1} = \frac{\partial M(C_1, C_2, C_3, C_4)}{\partial C_2} =$$

$$= \frac{\partial M(C_1, C_2, C_3, C_4)}{\partial C_3} = \frac{\partial M(C_1, C_2, C_3, C_4)}{\partial C_4} = 0 \quad (B4)$$

Fazendo as operações necessárias e arranjando na forma matricial, obtem-se o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 \epsilon_i^2 & \sum_{i=1}^6 a_i \epsilon_i & \sum_{i=1}^6 b_i \epsilon_i & \sum_{i=1}^6 \epsilon_i \\ \sum_{i=1}^6 \epsilon_i a_i & \sum_{i=1}^6 a_i^2 & \sum_{i=1}^6 b_i a_i & \sum_{i=1}^6 a_i \\ \sum_{i=1}^6 \epsilon_i b_i & \sum_{i=1}^6 a_i b_i & \sum_{i=1}^6 b_i^2 & \sum_{i=1}^6 b_i \\ \sum_{i=1}^6 \epsilon_i & \sum_{i=1}^6 a_i & \sum_{i=1}^6 b_i & \sum_{i=1}^6 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 (H/U)_i \epsilon_i \\ \sum_{i=1}^6 (H/U)_i a_i \\ \sum_{i=1}^6 (H/U)_i b_i \\ \sum_{i=1}^6 (H/U)_i \end{bmatrix} \quad (B5)$$

Substituindo os valores numéricos e executada as contas obtem-se:

$$\begin{bmatrix} 0067.25 & 03040.0 & 00274.0 & 00018.5 \\ 03040.0 & 1.4 \cdot 10^5 & 12520.0 & 00900.0 \\ 00274.0 & 12520.0 & 01123.0 & 00077.0 \\ 00018.5 & 00900.0 & 00077.0 & 00006.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0037.92 \\ 1737.60 \\ 00155.4 \\ 0010.74 \end{bmatrix} \quad (B6)$$

Pelo método da eliminação de Gauss, resolve-se o sistema e os valores encontrados para os coeficientes foram:

$$C_1 = 0,161739$$

$$C_3 = 0,117391$$

$$C_2 = -4,30435 \cdot 10^{-3}$$

$$C_4 = 0,430435$$

Na tabela B.2 abaixo é mostrada uma comparação entre os valores de  $(H/U)_{ot}$  calculados e os valores estimados pela expressão linear juntamente com o erro percentual.

**Tabela B.2:** valores calculados e estimados para  $(H/U)_{ot}$  juntamente com o erro percentual

CASO	$(H/U)_{ot}$ calculado	$(H/U)_{ot}$ estimado	$\Delta \%$
1	0,96	0,87	-9,4
2	1,20	1,29	7,4
3	1,64	1,60	-2,4
4	1,88	1,95	3,7
5	2,24	2,30	2,7
6	2,82	2,73	-3,2

Verifica-se que o erro médio é inferior a 5%.

Um erro de 5% na determinação de  $(\frac{dK}{dL})_0$  não acarreta erro superior a 1% no valor de  $K_{L,0}$  em todos os casos, conforme análise dos gráficos, uma vez que a variação do  $K_{L,0}$ , nas redondezas do valor calculado, é muito pequena pois o valor estimado pela aproximação encontra-se nas vizinhanças de um ponto máximo.

## APÊNDICE C: Programas Utilizados

### C.1 - CITHAMMER

O programa CITHAMMER é uma modificação do programa HAMMER(16) para permitir o cálculo com queima. Este programa é composto de quatro sub-programas que calculam parâmetros neutrônicos para uma célula representativa da região do reator considerada, a partir da sua composição, da geometria e da temperatura.

Os sub-programas que compõem o CITHAMMER são:

i) THERMOS - resolve a integral de transporte em 30 grupos energéticos e os condensa para 1 grupo térmico (0 eV - 0,625 eV).

ii) HAMLET - resolve a integral de transporte para 54 grupos energéticos, de modo semelhante ao THERMOS, para a faixa rápida e condensa as seções de choque para 3 grupos energéticos (0,625 eV - 5,53 KeV; 5,53 KeV - 821 KeV e 821 KeV - 10 MeV).

iii) FLOG - é um programa de difusão em uma dimensão acoplado aos outros dois sub-programas acima. É usado na pesquisa de dimensão, concentração e cálculo de "buckling" crítico.

iv) CITHAM2 - executa o cálculo de queima para as cadeias de Urânio e Tório, calculando as concentrações dos principais núclídeos dessas cadeias para cada passo de queima, realizando assim a realimentação do programa.

## C.2 - CITATION

O programa CITATION resolve a equação de difusão em multigrupo pelo método das diferenças finitas. Pode ser aplicado para várias geometrias em até 3 dimensões. Executa cálculos estáticos e dinâmicos fornecendo: fator de multiplicação efetivo ( $K_{eff}$ ), distribuição espacial de fluxo de nêutrons e potência, taxas de reação, concentrações de boro e dimensões críticas, etc.

## APÊNDICE D: Exemplos de Determinação de Máximos de Funções vinculadas pelo Método do Gradiente

Antes de se utilizar o método do gradiente no sistema de otimização, este foi testado para vários tipos de funções. Neste apêndice são mostrados alguns exemplos dessas funções. Procurou-se funções cujos pontos de máximo estivessem nos mais diversos pontos do domínio a fim de validar incondicionalmente o método. No entanto, uma observação é necessária quanto ao ponto que dá início ao método: o método do gradiente caminha no sentido de maior inclinação da função e esse fato pode levar a uma solução errada dependendo do ponto inicial, como mostra o esquema da figura D.1 abaixo.

Partindo-se do ponto  $X_1$ , como ilustrado na figura, o método do gradiente levará a solução  $X_a$  que não é a ótima, como pode-se perceber visualmente na figura. Esse problema é contornado pela malhagem (item 3.4.1) que faz com que o ponto inicial já esteja próximo ao ponto ótimo da função (ponto  $X_0$  da figura).

Na tabela D.1 abaixo, apresenta-se algumas das funções com seus respectivos pontos de máximo dentro do domínio, calculado através do método do gradiente e através de outros métodos numéricos que constam nas referências 10 e 21.

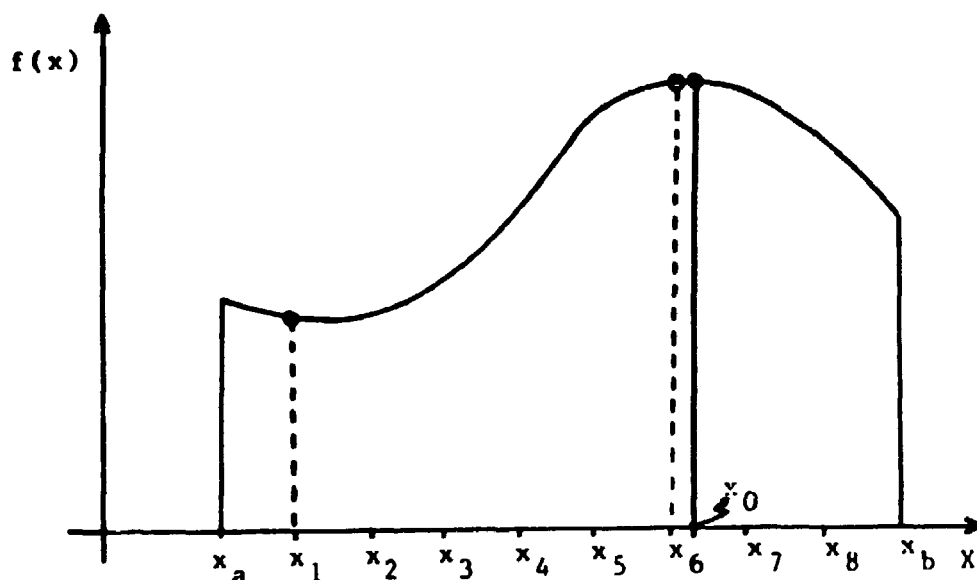


Figura D.1: Ilustração da importância da escolha do ponto inicial no método do gradiente.

As restrições foram as mesmas usadas no sistema de otimização em estudo, ou seja:

$$x_1 \leq 150$$

$$x_2 \leq 20$$

$$x_1 + x_2 \leq 160$$

$$0,0043 x_1 - 0,117 x_2 - 0,162 x_3 + x_4 \leq 0,43$$

A precisão pode ser melhorada diminuindo-se o parâmetro  $\epsilon$  (equação 3.7), que é a condição de parada do método do gradiente, mas isso implicaria num aumento do tempo de execução. Em função do compromisso precisão-tempo, considerou-se os resultados como bons. Esses exemplos foram rodados no micro-computador IBM-AT e o tempo máximo de execução foi de aproximadamente 12 segundos. Esse tempo e



conseqüentemente o número de iterações dependem da escolha do ponto inicial.

Tabela D.1: Comparação de resultados do método do gradiente com outros métodos numéricos.

Função Objetiva	solução referência	sol.do método do gradiente
$100(x_1^2 - x_2)^2 + (1-x_1)^2 - x_3 + x_4$	$x_1 = 150$ $x_2 = 0$ $x_3 = 2,1$ $x_4 = 0,13$ F.O.= 5,06+E10	$x_1 = 150$ $x_2 = 0$ $x_3 = 1,8$ $x_4 = 0$ F.O.= 5,06+E 10
$(x_1+115)^2 + (x_2+15)^2 +$ $(x_3+2,5)^2 + (x_4+0,7)^2$	$x_1 = 150$ $x_2 = 10$ $x_3 = 5$ $x_4 = 1,76$ F.O.= 7,09+E04	$x_1 = 150$ $x_2 = 9,8$ $x_3 = 5$ $x_4 = 1,81$ F.O.= 7,09+E 04
$5 x_1 + 3 x_2 + x_3 + 2 x_4$	$x_1 = 150$ $x_2 = 10$ $x_3 = 5$ $x_4 = 1,76$ F.O.= 788,53	$x_1 = 150$ $x_2 = 9,8$ $x_3 = 5$ $x_4 = 1,56$ F.O.= 787,52
$x_1 + x_2 + x_3 + x_4$	$x_1 = 140$ $x_2 = 20$ $x_3 = 5$ $x_4 = 2,98$ F.O.= 167,98	$x_1 = 140$ $x_2 = 19,6$ $x_3 = 5$ $x_4 = 2,78$ F.O.= 167,38

APENDICE E: Listagem do programa

```
C *****
C *****
C ***** SISTEMA DE OBTENCAO DE UM PRE-PROJETO OTIMIZADO DE *****
C *****
C ***** NUCLEO DE UM REATOR NUCLEAR *****
C *****
C *****
C *****
C *****
C ***** PROGRAMA PRINCIPAL *****
C
COMMON/M/ CC, R1(5), KC
DIMENSION C(5,9),C1(5,9),R(5),X(200,4),Y(200,4),DIST(5),
*SS(3),YY(200,4),E(10),GRAD(10),S(10),XX1(10),X1(10),X2(10),X3(10)
REAL LAMBX,LAMB,LAMBX1
REWIND 5
DO 25 IX=1,5
READ (5,*) (C1(IX,JY),JY=1,9),R1(IX)
25 CONTINUE
KONT=1
C
C ***** SELECIONA AS COLUNAS DA BASE *****
C
N=9
DO 22 I=1,N-4
DO 22 J=I+1,N-3
DO 22 K=J+1,N-2
DO 22 L=K+1,N-1
DO 22 M1=L+1,N
DO 23 IX=1,5
R(IX)=R1(IX)
DO 23 JX=1,9
C(IX,JX)=C1(IX,JX)
23 CONTINUE
C
C ***** SUBROTINA DE APLICACAO DO METODO DE GAUSS-JORDAN *****
C
CALL GAUSS (C,R,I,J,K,L,M1,ITEST)
C
C ***** RESOLVE O SISTEMA NA FORMA CANONICA *****
C
EP=-1.0E-05
IF(ITEST.EQ.0) GO TO 22
IF(I.EQ.1) GO TO 1
IF(I.EQ.2) GO TO 2
IF(I.EQ.3) GO TO 3
IF(I.EQ.4) GO TO 4
X(KONT,1)=0.
X(KONT,2)=0.
X(KONT,3)=0.
X(KONT,4)=0.
GO TO 17
1 IF(R(1).LT.EP) GO TO 22
X(KONT,1)=R(1)
IF(J.EQ.2) GO TO 10
```

```

26 IF(J-3) 5,6,5
6 IF(I.NE.1) GO TO 7
  X(KONT,2)=0.
7 IF(R(2).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,3)=R(2)
  GO TO 27
5 IF(J.LE.4) GO TO 8
  IF(I.EQ.1) GO TO 28
  IF(I.EQ.2) GO TO 29
  GO TO 31
28 X(KONT,2)=0.
  X(KONT,3)=0.
  GO TO 31
29 X(KONT,3)=0.
  GO TO 31
31 X(KONT,4)=0.
  GO TO 17
8 IF(I.EQ.1) GO TO 30
  IF(I.EQ.2) GO TO 32
  GO TO 33
30 X(KONT,2)=0.
  X(KONT,3)=0.
  GO TO 33
32 X(KONT,3)=0.
  GO TO 33
33 IF(R(2).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,4)=R(2)
  GO TO 17
2 X(KONT,1)=0.
  IF(R(1).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,2)=R(1)
  GO TO 26
3 X(KONT,1)=0.
  X(KONT,2)=0.
  IF(R(1).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,3)=R(1)
  GO TO 5
10 IF(R(2).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,2)=R(2)
  IF(K.EQ.3) GO TO 20
27 IF(K.LE.4) GO TO 11
  IF(J.NE.2) GO TO 12
  X(KONT,3)=0.
12 X(KONT,4)=0.
  GO TO 17
11 IF(J.NE.2) GO TO 13
  X(KONT,3)=0.
13 IF(R(3).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,4)=R(3)
  GO TO 17
20 IF(R(3).LT.EP) GO TO 22
  X(KONT,3)=R(3)
  IF(L.EQ.4) GO TO 14
  X(KONT,4)=0.
  GO TO 17

```

```

14 IF(R(4).LT.EP) GO TO 22
   X(KONT,4)=R(4)
   GO TO 17
  4 X(KONT,1)=0.
    X(KONT,2)=0.
    X(KONT,3)=0.
    IF(R(1).LT.EP) GO TO 22
    X(KONT,4)=R(1)
    GO TO 17
17 KONT=KONT+1
22 CONTINUE

```

C  
C  
C

\*\*\*\*\* SEPARA OS VERTICES IGUAIS E OS GUARDA EM Y \*\*\*\*\*

```

EP=1.0E-05
M=1
DO 34 J1=1,4
34 Y(1,J1)=X(1,J1)
DO 35 I1=2,KONT
DO 36 K1=1,M
DO 37 J1=1,4
   DIF=ABS(X(I1,J1)-Y(K1,J1))
   IF(DIF.GT.EP) GO TO 36
37 CONTINUE
   GO TO 35
36 CONTINUE
   M=M+1
   DO 39 J1=1,4
39 Y(M,J1)=X(I1,J1)
35 CONTINUE

```

C  
C  
C

\*\*\*\*\* TESTA OS VERTICES ENCONTRADOS NOS VINCULOS \*\*\*\*\*

```

DO 44 JJ=1,5
44 R1(JJ)=R1(JJ)+EP
   KONT=0
   KKONT=0
   DO 42 MM=1,M
   IF(Y(MM,1).GT.R1(1)) GO TO 42
   IF(Y(MM,2).GT.R1(2)) GO TO 42
   CONTA1=Y(MM,1)+Y(MM,2)
   IF(CONTA1.GT.R1(3)) GO TO 42
   IF(Y(MM,3).GT.R1(4)) GO TO 42
   CONTA2=0.0043*Y(MM,1)-0.117*Y(MM,2)-0.162*Y(MM,3)+Y(MM,4)
   IF(CONTA2.GT.R1(5)) GO TO 42
   KONT=KONT+1
   WRITE(*,43) KONT,(Y(MM,JJ),JJ=1,4)
43 FORMAT(1X,'VERTICE',I3,' - ', '(,1PE10.3,3(' ,',1PE10.3),')',)
   YY(KONT,1)=Y(MM,1)
   YY(KONT,2)=Y(MM,2)
   YY(KONT,3)=Y(MM,3)
   YY(KONT,4)=Y(MM,4)
   IF(Y(MM,1).LE.0.) GO TO 505
   IF(Y(MM,2).LE.0.) GO TO 505
   IF(Y(MM,3).LE.0.) GO TO 505

```

```

IF(Y(MM,4).LE.0.) GO TO 505
CALL INTER (Y(MM,3),Y(MM,4),SS,XX)
WRITE(*,503) SS(1), SS(2), SS(3), XX
503 FORMAT(1X,'D=',F11.9,' XA=',F11.9,' NXF=',F11.9,' XF=',F11.9)
KKONT=KKONT+1
CALL SIMULAT ( Y(MM,1), Y(MM,2), SS, XX, LAMB)
WRITE(*,507) KKONT, LAMB
507 FORMAT(1X,'KEFF(VERT.-',I3,') =' ,1PE10.3)
WRITE(*,*)' '
IF(KKONT.EQ.1) GO TO 506
IF(LAMB.LE.LAMBX) GO TO 505
506 LAMBX=LAMB
AA=Y(MM,1)
BB1=Y(MM,2)
EE=Y(MM,3)
HH=Y(MM,4)
505 DO 45 JJ=1,4
45 X(KONT,JJ)=Y(MM,JJ)
42 CONTINUE

```

C  
C  
C

\*\*\*\*\* CALCULA O CENTRO DE MASSA DO DOMINIO \*\*\*\*\*

```

SOMA1=0.
SOMA2=0.
SOMA3=0.
SOMA4=0.
DO 46 JK=1,KONT
SOMA1=SOMA1+X(JK,1)
SOMA2=SOMA2+X(JK,2)
SOMA3=SOMA3+X(JK,3)
SOMA4=SOMA4+X(JK,4)
46 CONTINUE
ABAR=SOMA1/KONT
BBAR=SOMA2/KONT
EBAR=SOMA3/KONT
HBAR=SOMA4/KONT
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,47) ABAR,BBAR,EBAR,HBAR
47 FORMAT(1X,'CENTRO DE MASSA - ',3(1PE10.3,', '),1PE10.3)

```

C  
C  
C

```

***** CALCULO DAS DISTANCIAS MAXIMAS ENTRE COORDENADAS CM-VERT.****
DO 508 III=1,KONT
DT1= ABS(Y(III,1)-ABAR)
IF(III.EQ.1) GO TO 510
IF(DT1.LE.DTM1) GO TO 509
510 DTM1=DT1
509 DT2= ABS(Y(III,2)-BBAR)
IF(III.EQ.1) GO TO 511
IF(DT2.LE.DTM2) GO TO 520
511 DTM2=DT2
520 DT3= ABS(Y(III,3)-EBAR)
IF(III.EQ.1) GO TO 512
IF(DT3.LE.DTM3) GO TO 515
512 DTM3=DT3

```

```

515 DT4= ABS(Y(III,4)-HBAR)
    IF(III.EQ.1) GO TO 519
    IF(DT4.LE.DTM4) GO TO 508
519 DTM4=DT4
508 CONTINUE
    WRITE(*,*) ' '
    WRITE(*,521) DTM1, DTM2, DTM3, DTM4
521 FORMAT(1X,'DISTANCIAS MAXIMA CM-VERTICE = ',4(1PE10.3))
    WRITE(*,*) ' '

```

```

C
C***** CONFECCAO DA MALHAGEM NO DOMINIO *****
C

```

```

    PAS1=DTM1/10.
    PAS2=DTM2/10.
    PAS3=DTM3/10.
    PAS4=DTM4/10.
    KCONT=0
    DO 513 IS=-10,10
    DO 513 JS=-10,10
    DO 513 KS=-10,10
    DO 513 LS=-10,10
514 ABAR1=ABAR+IS*PAS1
    BBAR1=BBAR+JS*PAS2
    EBAR1=EBAR+KS*PAS3
    HBAR1=HBAR+LS*PAS4
    IF(ABAR1.LE.050.OR.ABAR1.GT.R1(1)) GO TO 513
    IF(BBAR1.LE.0.OR.BBAR1.GT.R1(2)) GO TO 513
    IF((ABAR1+BBAR1).LE.050.OR.(ABAR1+BBAR1).GT.R1(3)) GO TO 513
    IF(EBAR1.LE.0.OR.EBAR1.GT.R1(4)) GO TO 513
    IF(HBAR1.LE.0) GO TO 513
    REST=.0043*ABAR1-.117*BBAR1-.162*EBAR1+HBAR1
    IF(REST.LE.0.OR.REST.GT.R1(5)) GO TO 513
    CALL INTER (EBAR1, HBAR1, SS, XX)
    KCONT=KCONT+1
    CALL SIMULAT (ABAR1, BBAR1, SS, XX, LAMB)
    IF(KCONT.EQ.1) GO TO 516
    IF(LAMB.LE.LAMBX1) GO TO 513
516 LAMBX1=LAMB
    AB=ABAR1
    BB=BBAR1
    EB=EBAR1
    HB=HBAR1
513 CONTINUE
    IF(LAMBX1.GE.LAMBX) GO TO 517
    LAMBX1=LAMBX
    AB=AA
    BB=BB1
    EB=EE
    HB=HH
517 WRITE(*,*) 'KEFF MAX. E COORD. ENTRE VERTICES E MALHAS'
    WRITE(*,*) ' '
    WRITE(*,518) KCONT, LAMBX1
518 FORMAT(1X,'NO. DE PONTOS PESQUISADOS=',I5,' KMAX = ',1PE15.5)
    WRITE(*,702) AB, BB, EB, HB
702 FORMAT(1X,'AMAX= ',1PE10.3,' BMAX= ',1PE10.3,' EMAX= ',1PE10.3,

```

```

* HMAX= ,1PE10.3)
CALL SECOND(T)
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,60000) T
60000 FORMAT(1X,'ATE AQUI O TEMPO DE CPU FOI ',E12.4,' SEG.')
```

C

```

C***** METODO DO GRADIENTE *****
C
C VALORES INICIAIS
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'INICIO DO METODO DO GRADIENTE'
```

```

WRITE(*,*)' '
AB=AB-(AB*.01)
BB=BB-(BB*.005)
EB=EB-(EB*.005)
HB=HB-(HB*.005)
5001 CC=0.001
KCC=0
KC=0
NN=4
XX1(1)=AB
XX1(2)=BB
XX1(3)=EB
XX1(4)=HB
EO= FUNC(XX1)
```

C

```

C ACHE GRADIENTE
622 DO 628 I=1,NN
IF(I.EQ.1) GO TO 998
DELTA=.0001*XX1(I)
GO TO 997
998 DELTA=.1*XX1(I)
997 XSAVE=XX1(I)
XX1(I)=XX1(I)+DELTA
```

C

```

C ** ALTERACAO PARA TESTE DE XX(1) ***
C
IF(I.NE.1) GO TO 60002
60003 IF(XX1(I).LT.R1(1)) GO TO 60002
XX1(I)=XX1(I)-.5
GO TO 60003
```

C

```

C ** FIM DA ALTERACAO ..... ***
C
60002 GRAD(I)=( FUNC(XX1)-EO)/ABS(DELTA)
628 XX1(I)=XSAVE
```

C

```

C ACHE DIRECAO S
DO 644 I=1,NN
644 S(I)= GRAD(I)
```

C

```

C INTERPOLACAO QUADRATICA
C
C ACHE ALFA 1
A1=1.
```

```

653 DO 654 I=1,NN
654 X1(I)=XX1(I)+A1*S(I)
    REST1=X1(1)+X1(2)
    REST2=.0043*X1(1)-.117*X1(2)-.162*X1(3)+X1(4)
    IF(REST1.GT.R1(3).OR.X1(1).LT.050.OR.X1(2).LT.0.
*OR.X1(3).LT.0.OR.X1(4).LT.0.OR.REST2.GT.R1(5).OR.X1(1).GT.
*R1(1).OR.X1(2).GT.R1(2).OR.X1(3).GT.R1(4)) GO TO 911
    E1= FUNC(X1)
    IF(E1.GT.E0) GO TO 663
911 A1=.5*A1
    IF(A1.GE.1E-05) GO TO 653
6123 CC=CC/100
    IF(CC.LT.1E-10) GO TO 6107
    GO TO 622

```

C

C ACHE ALFA 2

```

663 A2=A1
664 A2=A2+(A2*.1)
6665 DO 666 I=1,NN
666 X2(I)=XX1(I)+A2*S(I)
    REST1=X2(1)+X2(2)
    REST2=.0043*X2(1)-.117*X2(2)-.162*X2(3)+X2(4)
    IF(REST1.GE.R1(3).OR.X2(1).LE.050.OR.X2(2).LE.0.
*OR.X2(3).LE.0.OR.X2(4).LE.0.OR.REST2.GE.R1(5).OR.X2(1).GE.
*R1(1).OR.X2(2).GE.R1(2).OR.X2(3).GE.R1(4)) GO TO 6666
    E2= FUNC(X2)
    IF(E2.LT.E1) GO TO 674
    IF( ABS(E2).GT.1E+20) GO TO 6120
    A1=A2
    E1=E2
    GO TO 664
6666 A2=A2-(A2*.05)
    GO TO 6665

```

C

C ACHE ALFA

```

674 A=(A1*A1-A2*A2)*E0+A2*A2*E1-A1*A1*E2
    A=.5*A/((A1-A2)*E0+A2*E1-A1*E2)

```

C

C ACHE NOVO X

```

DO 685 I=1,NN
685 XX1(I)=XX1(I)+A*S(I)
    E0= FUNC(XX1)
    IF(E0.GT.E1) GO TO 695
    DO 691 I=1,NN
691 XX1(I)=XX1(I)+(A1-A)*S(I)
    E0= FUNC(XX1)
695 KCC=KCC+1
    WRITE(*,7771) XX1(1), XX1(2), XX1(3), XX1(4), E0
7771 FORMAT(1X,'A(CM)=' ,3PE10.4,' B(CM)=' ,2PE10.4,' E(X)=' ,1PE10.4,
*' H/U=' ,1PE10.4,' KEF= ',E10.4)
    GO TO 622
6120 WRITE(*,*)'*** NAO HA MAXIMO NA DIRECAO DO GRADIENTE ***'
    GO TO 6121
6107 CC=0
    E0= FUNC(XX1)

```



```

WRITE(+,+) ' '
WRITE(+,+) 'COORDENADAS ENCONTRADAS PELO GRADIENTE'
WRITE(+,6108) (I,XX1(I), I=1,NN)
6108 FORMAT(1X,4(' XMAX(',I1,')= ',E15.8))
FUNCAO= EO
WRITE(+,6109) FUNCAO, KC, KCC
6109 FORMAT(1X,'VALOR DO KEFF PELO GRAD = ',1PE15.8,' PESQUISAS= ',I6,
*' ITERACOES= ',I3)
WRITE(+,+) ' '
CALL SECOND(T)
WRITE(+,60001) T
60001 FORMAT(1X,'ATE AQUI O TEMPO DE CPU FOI ',E12.4,' SEG.')
```

```

889 XX1(1)=XX1(1)*1.01
REST1=XX1(1)+XX1(2)
REST2=.0043*XX1(1)-.117*XX1(2)-.162*XX1(3)+XX1(4)
IF(REST1.GT.R1(3).OR.XX1(1).LT.050.OR.XX1(2).LT.0.
*OR.XX1(3).LT.0.OR.XX1(4).LT.0.OR.REST2.GT.R1(5).
*OR.XX1(1).GT.R1(1).OR.XX1(2).GT.R1(2).OR.XX1(3).
*GT.R1(4)) GO TO 888
GO TO 889
888 XX1(1)=XX1(1)*.99
WRITE(+,+) ' '
WRITE(+,+) 'COORDENADAS DO PONTO OTIMO'
WRITE(+,890) (XX1(I),I=1,NN)
890 FORMAT(1X,'AMAX=',3PE10.4,' BMAX=',2PE10.4,' EMAX=',1PE10.4,
*' HMAX=',1PE10.4)
FF=FUNC(XX1)
WRITE(+,+) ' '
WRITE(+,+) 'VALOR MAXIMO DO KEFF PERTENCENTE AO DOMINIO'
WRITE(+,891) FF
891 FORMAT(1X,'KEFF(MAX)= ',1PE15.8)
CALL SECOND(T)
WRITE(+,892) T
892 FORMAT(1X,'ATE AQUI O TEMPO DE CPU FOI ',E12.4,' SEG.')
```

```

6121 STOP
END
```

C

```

FUNCTION FUNC(X)
REAL LAMB
COMMON/M/ CC, R1(5), KC
DIMENSION X(10), SS(3)
KC=KC+1
CALL INTER (X(3), X(4), SS, XX)
CALL SIMULAT (X(1), X(2), SS, XX, LAMB)
PF1=-X(1)-X(2)+R1(3)
PF2=-.0043*X(1)+.117*X(2)+.162*X(3)-X(4)+R1(5)
PF3=-X(1)+R1(1)
PF4=-X(2)+R1(2)
PF5=-X(3)+R1(4)
PF6=+X(1)-50
PF1=PF1**2
PF2=PF2**2
PF3=PF3**2
PF4=PF4**2
PF5=PF5**2
```

```

PF6=PF6**2
X2=X(2)**2
X3=X(3)**2
X4=X(4)**2
FUNC=LAMB-CC*(1/PF1+1/PF2+1/PF3+1/PF4+1/PF5+1/PF6+1/X2+1/X3
**1/X4)
RETURN
END

```

```

C
C***** SUBROTINA DE APLICACAO DO METODO DE GAUSS-JORDAN *****
C

```

```

SUBROUTINE GAUSS (C,R,I,J,K,L,M1,ITEST)
DIMENSION C(5,9),R(5),IND(5)
ITEST=1
IND(1)=I
IND(2)=J
IND(3)=K
IND(4)=L
IND(5)=M1
DO 15 II=1,5
IMAX=II
DO 5 IT=II,5
I2=IND(IT)
IF( ABS(C(IT,I2)).LE. ABS(C(IMAX,I2))) GO TO 5
IMAX=IT
5 CONTINUE
DO 25 JT=1,9
A=C(IT,JT)
C(IT,JT)=C(IMAX,JT)
C(IMAX,JT)=A
25 CONTINUE
A=R(IT)
R(IT)=R(IMAX)
R(IMAX)=A
I2=IND(IT)
IF(C(IT,I2).EQ.0) GO TO 80
TEMP=1.0/C(IT,IND(IT))
DO 50 JA=1,9
50 C(IT,JA)=C(IT,JA)*TEMP
R(IT)=R(IT)*TEMP
DO 60 JA=1,5
IF(IT.EQ.JA) GO TO 60
TEMP=C(JA,IND(IT))
DO 70 LA=1,9
70 C(JA,LA)=C(JA,LA)-C(IT,LA)*TEMP
R(JA)=R(JA)-R(IT)*TEMP
60 CONTINUE
15 CONTINUE
GO TO 90
80 ITEST=0
90 RETURN
END

```

```

C
C ***** SUBROTINA DE INTERPOLACAO LAGRANGEANA BIDIMENSIONAL *****
C

```

```

SUBROUTINE INTER (XBAR, YBAR, SS, XX)
DIMENSION X(5),Y(5),F(5,5),AUX(15),B(15),A(5,5),D(5,5),C(5,5),
*SS(3)
DATA X/1.,2.,3.,4.,5./
DATA Y/.6,1.2,1.8,2.4,3.0/
REWIND 6
DO 10 I=1,5
READ(6,*) (A(I,J),J=1,5)
10 CONTINUE
DO 20 I=1,5
READ(6,*) (D(I,J),J=1,5)
20 CONTINUE
DO 30 I=1,5
READ(6,*) (C(I,J),J=1,5)
30 CONTINUE
M=1
NP=5
DO 11 I=1,5
DO 11 J=1,5
F(I,J)=A(I,J)
11 CONTINUE
35 DO 15 L=1,NP
S=0
DO 40 K=1,5
B(K)=1.
DO 50 J=1,5
IF(J.EQ.K) GO TO 50
B(K)=B(K)*(YBAR-Y(J))/(Y(K)-Y(J))
50 CONTINUE
S=S+B(K)*F(K,L)
40 CONTINUE
AUX(L)=S
15 CONTINUE
S=0
DO 60 K=1,5
B(K)=1.
DO 70 J=1,NP
IF(J.EQ.K) GO TO 70
B(K)=B(K)*(XBAR-X(J))/(X(K)-X(J))
70 CONTINUE
S=S+B(K)*AUX(K)
60 CONTINUE
SS(M)=S
M=M+1
IF(M.EQ.3) GO TO 90
IF(M.GT.3) GO TO 95
DO 12 I=1,5
DO 12 J=1,5
F(I,J)=D(I,J)
12 CONTINUE
GO TO 35
90 DO 13 I=1,5
DO 13 J=1,5
F(I,J)=C(I,J)
13 CONTINUE

```

```

GO TO 35
95 XX=S/2.4
RETURN
END

```

C  
C  
C

```

***** SUBROTINA SIMULAT *****

```

```

SUBROUTINE SIMULAT ( ABAR,BBAR, SS, XX, LAMBDA)
REAL M,MT,LAMB,NISIGF,LAMBDA
COMMON/A/ N,IC1,IC2,LL,LLM,KM
COMMON/B/ BORO(1),BOROC,BOR1,BOR2,LAMB,EPS1,EPS2,EPS3
COMMON/C/ FI(30),FI1(30),FIM(30),FIT,P(30),P1(30),PH(30),PT,
*S2(32,5,1,1)
COMMON/D/ DX(32),D(32),SIGA(32),SIGF(32),NISIGF(32),ERF(32)
DIMENSION A1(5,1,1),A2(5,1,1),A3(5,1,1),A4(5,1,1),A5(5,1,
* 1),S1(32,5,1,1),B(30,1),BB(2),DB(1),M(30),NREG(32),SS(3),
*Y(200,4)
REWIND 7

```

C  
C  
C

```

LEITURA DOS DADOS DE ENTRADA

```

```

READ(7,1)JH,KM,LLM,IC1,IC2,NZM
FORMAT(6I3)
1 IF(ABAR.LE.60) GO TO 500
IF(ABAR.LE.70) GO TO 501
IF(ABAR.LE.80) GO TO 502
IF(ABAR.LE.90) GO TO 503
IF(ABAR.LE.100) GO TO 504
IF(ABAR.LE.110) GO TO 505
IF(ABAR.LE.120) GO TO 506
IF(ABAR.LE.130) GO TO 509
IF(ABAR.LE.140) GO TO 510
IF(ABAR.LE.150) GO TO 511

```

```

500 N=5
GO TO 508
501 N=6
GO TO 508
502 N=7
GO TO 508
503 N=8
GO TO 508
504 N=9
GO TO 508
505 N=10
GO TO 508
506 N=11
GO TO 508
509 N=12
GO TO 508
510 N=13
GO TO 508
511 N=14
508 NI = N + 2
READ(7,3) PT,EPS1,EPS2,EPS3
3 FORMAT(4E12.6)

```

```

    DO 5 III=1,N
    DX(III)=ABAR/N
5    CONTINUE
    DX(N+1)=BBAR
    DX(N+2)=BBAR
    READ(7,51) (BORO(K),K=1,KM)
51   FORMAT(6E12.6)
    LM = LLM + 1
    READ(7,53) (BB(LL),LL=1,LM)
53   FORMAT(6E12.6)
    DO 55 LL=1,LLM
    DB(LL) = BB(LL+1) - BB(LL)
55   CONTINUE
    DO 507 I=1,N
507  NREG(I)=1
    NNI=N+1
    NNII=N+2
    NREG(NNI)=2
    NREG(NNII)=2

C
C   ENTRADA DAS SECOES DE CHOQUE INTERPOLADAS E DA AGUA
C
    XM1=3.

C
C   INTERPOLADAS
C
    A1(1,1,1)=SS(1)
    A1(2,1,1)=SS(2)
    A1(3,1,1)=XX
    A1(4,1,1)=SS(3)
    A1(5,1,1)=.316E-10
    IF(NZM.LT.2) GO TO 66

C
    XM2=0.

C
C   AGUA
C
    A2(1,1,1)=0.276
    A2(2,1,1)=0.009
    A2(3,1,1)=0.0
    A2(4,1,1)=0.0
    A2(5,1,1)=0.0

C
    IF(NZM.LT.3) GO TO 66

C
66  I1 = 1
    I2 = 1

C
    DO 35 I=1,N1
    IF(NREG(I).EQ.1) M(I) = XM1*DX(I)
    IF(NREG(I).EQ.1) GO TO(10,11),I1
    IF(NREG(I).EQ.2) M(I) = XM2*DX(I)
    IF(NREG(I).EQ.2) GO TO(15,16),I2

C
10  I1 = 2

```

```

11 DO 14 LL=1,LLM
DO 13 K=1,KM
DO 12 J=1,JM
S1(I,J,K,LL) = A1(J,K,LL)
S2(I,J,K,LL) = A1(J,K,LL)
12 CONTINUE
13 CONTINUE
14 CONTINUE
GO TO 35

```

C

```

15 I2 = 2
16 DO 19 LL=1,LLM
DO 18 K=1,KM
DO 17 J=1,JM
S1(I,J,K,LL) = A2(J,K,LL)
S2(I,J,K,LL) = A2(J,K,LL)
17 CONTINUE
18 CONTINUE
19 CONTINUE
GO TO 35
35 CONTINUE

```

C

```

MT = 0.0
DO 39 I=1,N1
MT = MT + M(I)
39 CONTINUE

```

C

```

IKM = KM - 1
IF(KM.EQ.1) IKM = 1
IC2 = 0
DO 300 LL=1,LLM
DO 290 K=1,KM,IKM
DO 280 J =1,JM
DO 180 I=1,N1

```

C

```

IF(J.EQ.1) GO TO 130
IF(J.EQ.2) GO TO 140
IF(J.EQ.3) GO TO 150
IF(J.EQ.4) GO TO 160
IF(J.EQ.5) GO TO 170

```

C

```

130 D(I) = S2(I,J,K,LL)
GO TO 180
140 SIGA(I) = S2(I,J,K,LL)
GO TO 180
150 SIGF(I) = S2(I,J,K,LL)
GO TO 180
160 NISIGF(I) = S2(I,J,K,LL)
GO TO 180
170 ERF(I) = S2(I,J,K,LL)

```

C

```

180 CONTINUE

```

C

```

IF(J.LT.JM) GO TO 280
IC2 = IC2 + 1

```

```

BOR1 = BORO(1)
BOR2 = BORO(KM)
C
CALL NOD3 (LAMBDA)
260 CONTINUE
290 CONTINUE
300 CONTINUE
RETURN
END
C
SUBROUTINE NOD3 (KEFF)
C
REAL L,LAMB,LAMB1,LAMB2,KEF,KEFF,NISIGF,NISGF1,NISGF2
COMMON/A/ N,IC1,IC2,LL,LLM,KM
COMMON/B/ BORO(1),BOROC,BOR1,BOR2,LAMB,EPS1,EPS2,EPS3
COMMON/C/ FI(30),F11(30),FIM(30),FIT,P(30),P1(30),PM(30),PT,
* S2(32,5,1,1)
COMMON/D/ DX(32),D(32),SIGA(32),SIGF(32),NISIGF(32),ERF(32)
DIMENSION W(30,30),C(30,30),OSI(30),FLUX(30),FLUX0(30),
* TEST(30),DBOR(1)
DIMENSION D1(32),D2(32),SIGA1(32),SIGA2(32),SIGF1(32),SIGF2(32),
* NISGF1(32),NISGF2(32),ERF1(32),ERF2(32),ALB(32),L(32),
* SH(32),CH(32)
DATA W/900*0./,C/900*0./,FLUX/30*1./,FLUX0/30*1./,KEF/1./
KEFF=1.
N1 = N + 2
DO 104 I=1,N1
L(I) = SQRT(D(I)/SIGA(I))
SH(I) = SINH(DX(I)/L(I))
CH(I) = COSH(DX(I)/L(I))
ALB(I) = (L(I)*SH(I) - 2.*D(I)*CH(I))/(L(I)*SH(I) + 2.*D(I)*CH(I))
104 CONTINUE
C
CALCULO DOS COEFICIENTES W(I,J) E C(I,J) DE ACOPLAMENTO NODAIS
C
COEFICIENTES W(I,J) E C(I,J) PARA O NODO I = 1
C
106 B1 = (1. - ALB(N+1))/(2. + 2.*ALB(N+1))
B2 = -(1. - ALB(2))/(2. + 2.*ALB(2))
ALFA1 = B1*L(1)/D(1)
ALFA2 = ALFA1/SIGA(1)
ALFA3 = (B2*CH(1) - D(1)*SH(1)/L(1))/(D(1)*CH(1)/L(1) - B2*SH(1))
ALFA4 = B2/(SIGA(1)*(D(1)*CH(1)/L(1) - B2*SH(1)))
A1 = (ALFA4 - ALFA2)/(ALFA1 - ALFA3)
A2 = (ALFA1*A1 + ALFA2)
C
W(1,1) = SIGA(1)*L(1)*(A1*SH(1) + A2*(CH(1) - 1.))/DX(1) + 1
W(1,2) = D(1)*ABS(A1*SH(1) + A2*CH(1))/(L(1)*DX(1))
C
C(1,1) = NISIGF(1)*W(1,1)/SIGA(1)
C(1,2) = NISIGF(1)*W(1,2)/SIGA(2)
C
OSI(1) = 1./(W(1,1) + W(1,2))
C
COEFICIENTES W(I,J) E C(I,J) PARA OS NODOS I = 2 ATE I = N-1

```

```

C
N2 = N - 1
DO 107 I = 2,N2
B1 = (1. - ALB(I-1))/(2. + 2.*ALB(I-1))
B2 = -(1. - ALB(I+1))/(2. + 2.*ALB(I+1))
ALFA1 = B1*L(I)/D(I)
ALFA2 = ALFA1/SIGA(I)
ALFA3 = (B2*CH(I) - D(I)*SH(I)/L(I))/(D(I)*CH(I)/L(I) - B2*SH(I))
ALFA4 = B2/(SIGA(I)*(D(I)*CH(I)/L(I) - B2*SH(I)))
A1 = (ALFA4 - ALFA2)/(ALFA1 - ALFA3)
A2 = ALFA1*A1 + ALFA2
C
W(I,I-1) = D(I)*ABS(A2)/(L(I)*DX(I))
W(I,I) = SIGA(I)*L(I)*(A1*SH(I) + A2*(CH(I) - 1.))/DX(I) + 1.
W(I,I+1) = D(I)*ABS(A1*SH(I) + A2*CH(I))/(L(I)*DX(I))
C
C(I,I-1) = NISIGF(I)*W(I,I-1)/SIGA(I-1)
C(I,I) = NISIGF(I)*W(I,I)/SIGA(I)
C(I,I+1) = NISIGF(I)*W(I,I+1)/SIGA(I+1)
C
OSI(I) = 1./(W(I,I-1) + W(I,I) + W(I,I+1))
107 CONTINUE
C COEFICIENTES W(I,J) E C(I,J) PARA O NODO I = N
C
B1 = (1. - ALB(N-1))/(2. + 2.*ALB(N-1))
B2 = -(1. - ALB(N+2))/(2. + 2.*ALB(N+2))
ALFA1 = B1*L(N)/D(N)
ALFA2 = ALFA1/SIGA(N)
ALFA3 = (B2*CH(N) - D(N)*SH(N)/L(N))/(D(N)*CH(N)/L(N) - B2*SH(N))
ALFA4 = B2/(SIGA(N)*(D(N)*CH(N)/L(N) - B2*SH(N)))
A1 = (ALFA4 - ALFA2)/(ALFA1 - ALFA3)
A2 = ALFA1*A1 + ALFA2
C
W(N,N-1) = D(N)*ABS(A2)/(L(N)*DX(N))
W(N,N) = SIGA(N)*L(N)*(A1*SH(N) + A2*(CH(N) - 1.))/DX(N) + 1.
C
C(N,N-1) = NISIGF(N)*W(N,N-1)/SIGA(N-1)
C(N,N) = NISIGF(N)*W(N,N)/SIGA(N)
C
OSI(N) = 1./(W(N,N-1) + W(N,N))
C
C DETERMINACAO DAS DISTRIBUICOES DE FLUXO DE NEUTRONS E POTENCIA
C METODO ITERATIVO DE GAUSS-SIEDEL
C
C OBSERVACAO - FLUXO(1) NORMALIZADO = 1.
C
C ITER = 0
108 ITER = ITER + 1
C
C IF(MOD(ITER,2).EQ.0) GO TO 115
C
C FLUXO(1) = (C(1,1)*FLUXO(1) + C(2,1)*FLUXO(2))/KEFF
C
C DO 109 I=2,N2
C FLUXO(I) = (C(I-1,I)*FLUXO(I-1) + C(I,I)*FLUXO(I) + C(I+1,I)*

```



```

*FLUXO(I+1))/KEFF
109 CONTINUE
   FLUXO(N) = (C(N-1,N)*FLUXO(N-1) + C(N,N)*FLUXO(N))/KEFF
C
   GO TO 118
C
115 FLUXO(N) = (C(N-1,N)*FLUXO(N-1) + C(N,N)*FLUXO(N))/KEFF
   N3 = N - 2
   DO 117 I = 1,N3
   FLUXO(N-I) = (C(N-I-1,N-I)*FLUXO(N-I-1) + C(N-I,N-I)*FLUXO(N-I) +
*FLUXO(N-I+1,N-I)*FLUXO(N-I+1))/KEFF
117 CONTINUE
C
   FLUXO(1) = (C(1,1)*FLUXO(1) + C(2,1)*FLUXO(2))/KEFF
C
118 CONTINUE
   FLUXOT = 0.
   DO 116 I = 1,N
   FLUXOT = FLUXOT + FLUXO(I)
116 CONTINUE
C
   DO 114 I = 1,N
   FLUXO(I) = FLUXO(I)/FLUXOT
   FI1(I) = FLUXO(I)
114 CONTINUE
   SOMA1 = C(1,1)*FLUXO(1) + C(2,1)*FLUXO(2) + C(N-1,N)*FLUXO(N-1) +
*C(N,N)*FLUXO(N)
C
   SOMA2 = 0.
   DO 110 I=2,N2
   SOMA2 = SOMA2 + C(I-1,I)*FLUXO(I-1) + C(I,I)*FLUXO(I) + C(I+1,I)*
*FLUXO(I+1)
110 CONTINUE
C
   DO 111 I=1,N
   TEST(I) = ABS((FLUXO(I) - FLUX(I))/FLUXO(I))
   FLUX(I) = FLUXO(I)
111 CONTINUE
C
   KEFF = SOMA1 + SOMA2
   TEST1 = ABS((KEFF - KEF)/KEFF)
   KEF = KEFF
C
   DO 112 I=1,N
   IF(TEST(I).GT.EPS1) GO TO 108
112 CONTINUE
   IF(TEST1.GT.EPS2) GO TO 108
C
   FIT = 0.
   PT1 = 0.
   DO 142 I=1,N
   P(I) = ERF(I)*SIGF(I)*FI1(I)
   PT1 = PT1 + P(I)
142 CONTINUE
   DO 143 I=1,N

```

```
P1(I) = P(I)/PT1  
P(I) = PT*P1(I)  
PM(I) = P(I)/DX(I)  
FI(I) = P(I)/(ERF(I)*SIGF(I))  
FIM(I) = FI(I)/DX(I)  
FIT = FIT + FI(I)  
143 CONTINUE  
RETURN  
END
```

## Referências Bibliográficas

1. TERNEY, W.B. Optimization techniques in nuclear engineering. Massachusetts, 1967. ( Ph.D. Thesis. Massachusetts Institute of Technology).
2. GOLDSCHMIDT, P. & QUENON, J. Minimum critical mass in fast reactors with bounded power density. Nucl. Sci. Eng., 39:311-9, 1970.
3. WALL, I & Frenech, H. The application of dynamic programming to fuel management optimization. Nucl. Sci. Eng., 22:285-97, 1965
4. KALLAY, N. Dynamic programming and nuclear reactor systems design. Nucl. Sci. Eng., 8:315-25, 1960.
5. TZANOS, C.P.; GYFTOPOULOS, E.P. & DRISCOL, M.J. Optimization of material distributions in fast reactor cores. Nucl. Sci. Eng., 52:84-94, 1973.
6. JACHIC, J. Otimização das zonas de enriquecimento que maximizam o ganho de regeneração em um reator rápido. In: ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA NUCLEAR. Física de reatores: anais do 4º Encontro Nacional de... realizado em Itaipava, RJ, 3-5 nov., 1983. Rio de Janeiro, 1983.

7. JACHIC, J. Um método de otimização de parâmetros na física de reatores nucleares. In: ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA NUCLEAR. Física de reatores: anais do 5º Encontro Nacional de... realizado em Itaipava, RJ, 3-5 nov., 1983. Rio de Janeiro 1983.
  
8. JACHIC, J. Projeto neutrônico conceitual do núcleo de um reator rápido de 50 MW (uma metodologia de cálculo otimizado). Rio de Janeiro, DINEU/IEN, 1985. (Comunicação técnica).
  
9. FRITZSCHE, H. Programação não-linear: análise e métodos. São Paulo, Edgard Blücher, 1978.
  
10. BUTKOV, E. Física matemática. Rio de Janeiro, Ed. Guanabara Dois, 1983.
  
11. BREGALDA, P.F.; OLIVEIRA, A.A.F. & BORNSTEIN, C.T. Introdução à programação linear, Rio de Janeiro, Ed. Campus, 1983.
  
12. CONVERSE, A.O. Otimização. São Paulo, EDART, 1977.
  
13. BELLMAN, R.E. Dynamic programming. New Jersey, Princeton Univ., 1957.

14. TOLLE, H. Optimization methods. New York, Springer-Verlog-Berlin, Hedelberg, 1975.
15. FERREIRA, C.R. Utilização do método nodal absorção-produção em cálculos de distribuição de fluxo de nêutrons e de potência em uma dimensão e um grupo de energia. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1974 (Dissertação de mestrado).
16. SWICH, J.E. & HONECH, H.C. The HAMMER system: heterogeneous analysis of multigroup methodes of exponential and reactor. Aiken, Du Pont de Nemours, 1967. (DP-1064)
17. HUMES, A.F.P.C.; MELO, I.S.H.; YOSHIDO, L.K. & MARTINS, W.T. Noções de cálculo numérico, São Paulo, McGraw-Hill do Brasil, 1984.
18. DANIELS, R.W. An introduction to numerical methods and optimization techniques. New York, Elsevier North Holland, 1978.
19. FOWLER, T.B.; VONDY, D.R. & CUNNINGHAM, G.W. Nuclear reactor core analysis code: citation. Oak Ridge National Lab., 1971. (ORNL-TM-2496-Rev.1)

20. LINEAR programming with bounded variables for IBM-PC: versão 4.11. s.l., Eastern Software Products, 1984, (Manual do usuário). ( BLP-88 ).
21. HOPPER, M.J., comp. Harwell subroutine library: a catalogue of subroutines. Harwell, UKAEA Atomic Energy Research Establishment, 1979. ( AERE-R-9185 )