

FORMULAÇÃO ITERATIVA DO MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS PARA O
CÁLCULO DO FLUXO PERTURBADO DE NÊUTRONS

Walleska Daniel da Costa

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
NUCLEAR.

Aprovada por:

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2006

COSTA, WALLESKA DANIEL DA

Formulação Iterativo do Método dos
Pseudo-Harmônicos para o Cálculo do Fluxo
Perturbado de Nêutrons [Rio de Janeiro] 2006

VIII, 40p. 29,7 (COPPE/UFRJ, M.Sc.,
Engenharia Nuclear , 2006)

Dissertação – Universidade Federal
do Rio de Janeiro, COPPE

1.Método Pseudo-Harmônico

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Às minhas lindas filhas
Victória Cristina da Costa e
Thaís Cristina da Costa.

AGRADECIMENTOS

Expresso uma profunda gratidão à Deus por toda a força que me concedeu para a realização deste trabalho.

Expresso meus agradecimentos ao Professor Fernando Carvalho da Silva pela orientação e apoio à realização deste trabalho.

A todos que contribuíram de forma direta ou indireta na realização deste trabalho.

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

FORMULAÇÃO ITERATIVA DO MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS PARA O
CÁLCULO DO FLUXO PERTURBADO DE NÊUTRONS

Walleska Daniel da Costa

Março / 2006

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

A Formulação Iterativa do Método dos Pseudo-Harmônicos é uma poderosa ferramenta para descrever o fluxo de nêutrons e fator de multiplicação efetivo perturbados no cálculo neutrônico.

Esta formulação tem sido aplicada em conjunto com o Método de Expansão Nodal e com o Método de Diferenças Finitas de Malha grossa para o cálculo do fluxo real e para a obtenção do fluxo adjunto de nêutrons.

Neste trabalho a formulação iterativa do Método dos Pseudo-Harmônicos foi utilizada para adaptar um problema de fonte, agrupando as perturbações num termo que pode ser considerado como uma fonte virtual.

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

THE ITERATIVE FORMULATION OF THE METHOD OF PSEUDO-HARMONICS TO
CALCULATE THE PERTURBED NEUTRON FLUX

Walleska Daniel da Costa

March/2006

Advisor: Fernando Carvalho da Silva

Programme: Nuclear Engineering

The iterative formulation of the Method of Pseudo-harmonics is a powerful tool to describe the perturbed neutron flux and effective multiplication factor in the neutronics calculations.

This formulation has been employed together with the Nodal Expansion Method and Finite Difference Coarse Mesh to calculate the real flux and to obtain the adjoint flux.

In this work the iterative formulation of the Pseudo-Harmonics method was used to adapt an eigenvalue problem to a source problem, grouping the perturbations in a term that can be considered as a virtual source.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 – MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL.....	4
2.1 – INTRODUÇÃO.....	4
2.2 –CORRENTES PARCIAIS DE SAÍDA.....	10
2.3 – EQUAÇÃO DE BALANÇO NODAL.....	11
CAPÍTULO 3 – MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS DE MALHA GROSSA.....	12
3.1 – INTRODUÇÃO.....	12
3.2 – COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DE DIREÇÃO E FACE E SEUS FATORES DE CORREÇÕES.....	13
CAPÍTULO 4 – MÉTODOS DOS PSEUDOS-HARMÔNICOS.....	16
4.1 – INTRODUÇÃO.....	16
4.2–MÉTODO PERTURBATIVO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS	17
4.3 – DETERMINAÇÃO DOS VETORES DE BASE	21
4.4 – MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS (FORMULAÇÃO FRACA).....	23
4.5 – MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS (FORMULAÇÃO FORTE}.....	24
4.6 – SOLUÇÃO USANDO PROCESSO ITERATIVO.....	27
4.7– DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE ARBITRÁRIA.....	29

CAPÍTULO 5 - APRESENTAÇÃO DO RESULTADO E CONCLUSÃO.....	31
5.1 – INTRODUÇÃO.....	31
5.2 – SISTEMA DE REFERÊNCIA.....	32
5.3 – SISTEMA PERTURBADO.....	32
5.4 – CARACTERIZAÇÃO DO REATOR.....	32
5.5 – APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS.....	34
5.6 – EFICIÊNCIA, DESEMPENHO COMPUTACIONAL E CONCLUSÃO.....	37

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O Método dos Pseudo-Harmônicos associado a um processo iterativo é apresentado como uma poderosa ferramenta para reproduzir o fluxo de nêutrons e fator de multiplicação efetivo perturbados no cálculo neutrônico.

Esta formulação está baseada na definição de uma região de interesse na qual as mudanças na forma do fluxo devido à perturbação são grandes quando comparadas ao restante do domínio do sistema. Os vetores de base e a forma do fluxo perturbado são obtidos para aquela região específica que considera somente as propriedades físicas locais, e os valores do fluxo não perturbado no contorno são usados como condições de contorno.

Os métodos nodais para solução da equação de difusão de nêutrons, problema de autovalor, estão bem desenvolvidos na análise em Física de Reatores. Eles também podem ser muito úteis na solução de problemas de fonte. Neste trabalho, adaptamos o problema de autovalor para um problema de fonte, agrupando as perturbações num termo que pode ser encarado como uma fonte virtual.

O Método dos Pseudo-Harmônicos Iterativo é aplicado em conjunto com o Método de Expansão Nodal NEM (Finnemann *et al.*, 1977), para o cálculo do fluxo real e com o Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa DFMG (Smith, 1983; Aragonés & Ahnert, 1986; Sutton & Aviles, 1996; Moon *et al.*, 1999 e Chao, 1999) para a obtenção do fluxo adjunto.

Um método de perturbação deve levar em conta o tempo computacional em comparação com o cálculo direto. Eles são particularmente vantajosos quando se considera

uma série de cálculos similares, que como acontece com o cálculo direto podem ser bastante demorados.

O Método dos Pseudo-Harmônicos foi originalmente proposto por Gomit (1985) e teve como suas principais vantagens o fato de a base usada para representar o fluxo perturbado ser construída das autofunções de um mesmo operador não perturbado (fuga mais remoção) do grupo na equação da difusão.

Outra vantagem do método é que os Pseudo-Harmônicos são soluções de equações diferenciais desacopladas em grupos de energia. A discretização espacial destas equações diferenciais, para cada grupo de energia, nos fornece matrizes reais e simétricas. Isto implica que os autovalores sejam reais e os autovetores ortogonais, formando um conjunto completo (Silva *et al.*, 1987).

No capítulo II, é apresentado o Método de Expansão de Fluxo (NEM), a equação da continuidade e a lei de Fick a duas dimensões. Neste método, as funções soluções são aproximadas por polinômios, de onde se obtém os valores do Cálculo Direto.

No capítulo III, é apresentado o Método de Diferenças finitas de Malha Grossa (DFGM), que devido à sua estrutura, a construção da matriz que carrega a fuga e a remoção não é muito trabalhosa. O DFMG faz uso dos resultados provenientes do Método de Expansão Nodal para nos fornecer as matrizes utilizadas para o cálculo dos Pseudo-Harmônicos e também nos fornece o fluxo adjunto.

No capítulo IV, apresentamos o Método dos Pseudo-Harmônicos que consiste, para cada grupo de energia, na expansão da perturbação do fluxo de nêutrons em termos de uma base do mesmo espaço gerado pelos harmônicos. Esta base é formada pelo conjunto de autofunções do operador não perturbado que representa fuga mais remoção do grupo na equação de difusão. É também explicitado o processo iterativo proposto neste trabalho.

No capítulo V, apresentamos o sistema de referência usado, o sistema perturbado, a especificação do tipo de reator, com suas características, os resultados para o fluxo para o autovalor, e a sugestão para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL

2.1 –INTRODUÇÃO

O Método de Expansão Nodal NEM (Finnemann *et al.*, 1977) utiliza a equação da continuidade e a lei de Fick, como equações de partida. É um método de discretização espacial que usa correntes de interface. Estas equações em geometria retangular em coordenadas cartesianas e na formulação de dois grupos de energia são expressas da seguinte forma:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_g(x, y) + \sum_{Rg} (x, y) \phi_g(x, y) = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \sum_{Rg'} (x, y) \phi_{g'}(x, y) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g'=g}} \sum_{Rg'} (x, y) \phi_{g'}(x, y) \quad (2.1)$$

e

$$\vec{J}_g(x, y) = \sum_{u=x,y} (J_{gu}^+(x, y) - J_{gu}^-(x, y)) \hat{e}_u = -D_g(x, y) \sum_{u=x,y} \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y) \hat{e}_u \quad (2.2)$$

O método utiliza como domínio espacial do núcleo do reator, um conjunto de retângulos paralelos contíguos, os nodos. Dentro de um nodo os parâmetros de multigrupos são uniformes. Integrando a equação (2.1) na área $a_x^n a_y^n$ de um nodo n qualquer e a equação (2.2) na área transversal a uma direção u genérica, tem-se que

$$\frac{\sum_{u=x,y,z} (J_{gu}^n - J_{gul}^n)}{a_u^n} + \sum_{Rg} \phi_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{\substack{g'=1 \\ g'=g}}^2 \sum_{Rg'} \phi_{g'}^n \quad (2.3)$$

e

$$J_{gus}^n \equiv J_{gus}^{+n} - J_{gus}^{-n} = -D_g^n \frac{d}{du} \psi_{gu}^n(u) \Big|_{u = u_g^n} \quad (2.4)$$

Sendo os parâmetros $(\Sigma_{Rg}^n, \nu \Sigma_{fg}^n, \Sigma_{gg}^n, e D_g^n)$, que caracterizam o nodo n, uniformes. Eles são assim definidos desta forma:

$$D_g^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n \phi_g^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} D_g(x,y) \phi_g(x,y) dx dy \quad (2.5)$$

$$\Sigma_{Xg}^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n \phi_g^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \Sigma_{Xg}(x,y) \phi_g(x,y) dx dy \quad , \quad x = r, f, s \quad (2.6)$$

E o fluxo médio no nodo (ϕ_g^n) , as correntes parciais médias na face s da direção u do nodo n $(J_{gus}^{\pm n})$ e o fluxo médio numa área transversal à direção u no nodo n $(\psi_{gu}^n(u))$ são definidos da seguinte forma:

$$\phi_g^n \equiv \frac{1}{a_x^n a_y^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \phi_g(x,y) dx dy \quad (2.7)$$

$$J_{gus}^{\pm n} \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}^{\pm}(u_s^n, v, w) dv dw \quad (2.8)$$

e

$$\psi_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \phi_g(u, v, w) dv dw \quad , \quad (2.9)$$

E ainda $u = x, y$, $s = l, r$ (representando, respectivamente, as faces esquerda e direita na

$$\text{direção } u) \text{ e } u_s^n = \begin{cases} 0 & \text{se } s = l \\ a_u^n & \text{se } s = r \end{cases}$$

Observamos pelas equações (2.3) e (2.4) um forte acoplamento entre ϕ_g^n e J_{gus}^n que é feito pelas funções $\psi_{gu}^n(u)$. Tais funções são soluções da equação 1D obtidas da integração da equação da difusão resultante da substituição da equação (2.2) na equação (2.1) numa área transversal à direção u no nodo n , as quais são:

$$-D_g^n \frac{d^2}{du^2} \psi_{gu}^n(u) + \sum_{gu}^n \psi_{gu}^n(u) = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \sum_{fg'}^n \psi_{g'u}^n(u) + \sum_{g'=1}^2 \sum_{gg'}^n \psi_{g'u}^n(u) - L_{gu}^n(u) \quad (2.10)$$

onde $L_{gu}^n(u)$, o termo que representa a fuga transversal à direção u , é assim definido:

$$L_{gu}^n(u) \equiv -\frac{D_g^n}{a_v^n} \int_0^{a_v^n} \left(\frac{\partial}{\partial v} \phi_g(u, v) + \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(u, v) \right) dv \quad (2.11)$$

No Método de Expansão Nodal a solução da equação (2.10) não é obtida nem analiticamente e nem numericamente, mas através de uma expansão polinomial (neste caso, do quarto grau) da seguinte forma:

$$\psi_{gu}^n(u) = \sum_{i=0}^4 c_{igu}^n h_i\left(\frac{u}{a_u^n}\right) \quad ; \quad u = x, y \quad (2.12)$$

As funções de base $h_i\left(\frac{u}{a_u^n}\right)$ e suas propriedades (Finnemann *et al.*, 1977), são assim definidas:

$$h_0(\xi) = 1,$$

$$h_1(\xi) = 2\xi - 1$$

$$h_2(\xi) = 6\xi^2 - 1$$

$$h_3(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(2\xi - 1)$$

$$h_4(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(5\xi^2 - 5\xi - 1), \quad \text{onde } \xi = \frac{u}{a_u^n},$$

e possuem as seguintes propriedades:

$$h_i(\xi) = 0 \quad \text{em } \xi = 0 (u = 0) \text{ e } \xi = 1 (u = a_u^n); \text{ para } m \geq 3,$$

$$\int_0^1 h_i(\xi) d\xi = 0 \quad \text{para } m \geq 1,$$

$$\int_0^1 h_1(\xi) h_i(\xi) d\xi = \begin{cases} 1/3 & \text{se } m = 1 \\ 0 & \text{se } m = 2 \\ 1/5 & \text{se } m = 3 \\ 0 & \text{se } m = 4 \end{cases}$$

$$\int_0^1 h_2(\xi) h_i(\xi) d\xi = \begin{cases} 0 & \text{se } m = 1 \\ 1/5 & \text{se } m = 2 \\ 0 & \text{se } m = 3 \\ -3/35 & \text{se } m = 4 \end{cases}$$

$$\int_0^1 \frac{d}{d\xi} h_1(\xi) \frac{d}{d\xi} h_i(\xi) d\xi = \begin{cases} 4 & \text{se } m = 1 \\ 0 & \text{se } m \neq 1 \end{cases}$$

e

$$\int_0^1 \frac{d}{d\xi} h_2(\xi) \frac{d}{d\xi} h_i(\xi) d\xi = \begin{cases} 12 & \text{se } m = 2 \\ 0 & \text{se } m \neq 2 \end{cases}$$

Os coeficientes de baixa ordem $c_{0gu}^n, c_{1gu}^n, c_{2gu}^n$ (coeficientes primários) são obtidos

levando em consideração uma condição de consistência, dada por:

$$\phi_g^n = \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \psi_{gu}^n(u) du \quad (2.13)$$

e da aproximação da difusão

$$\psi_{gus}^n \equiv \psi_{gu}^n(u_s^n) = 2(J_{gus}^{+n} + J_{gus}^{-n}) \quad ; \quad s = l, r$$

e aplicando as propriedades das funções de base (Finneman *et al.*, 1977) $h_i(\frac{u}{a_u^n})$, obtemos

as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} c_{0gu}^n &= \phi_g^n \\ c_{1gu}^n &= (J_{gur}^{+n} + J_{gur}^{-n}) - (J_{gul}^{+n} + J_{gul}^{-n}) \end{aligned} \quad (2.14)$$

e

$$c_{2gu}^n = \phi_g^n - ((J_{gur}^{+n} + J_{gur}^{-n}) - (J_{gul}^{+n} + J_{gul}^{-n})) \quad (2.15)$$

Já os coeficientes de alta ordem, c_{3gu}^n e c_{4gu}^n (coeficientes secundários), são obtidos através da equação (2.10) e com o auxílio da técnica dos resíduos ponderados onde as funções pesos são as funções de base. Para os cálculos de c_{3gu}^n e c_{4gu}^n , usamos respectivamente como funções peso as funções de base $h_1(\frac{u}{a_u^n})$ e $h_2(\frac{u}{a_u^n})$ e consideramos a seguinte expansão polinomial para o termo de fuga $L_{gu}^n(u)$:

$$L_{gu}^n(u) = \sum_{i=0}^2 \alpha_{igu}^n h_i(\frac{u}{a_u^n}) \quad , \quad (2.16)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$\alpha_{0gu}^n \equiv \bar{L}_{gu}^n = \sum_{\xi=v,w} ((J_{g\bar{c}r}^{+n} + J_{g\bar{c}r}^{-n}) - (J_{g\bar{c}l}^{+n} + J_{g\bar{c}l}^{-n})) / a_{\xi}^n, \quad (2.17)$$

$$\alpha_{1gu}^n \equiv \frac{1}{2} (L_{gur}^n - L_{gul}^n) \quad (2.18)$$

e

$$\alpha_{2gu}^n \equiv \bar{L}_{gu}^n - \frac{1}{2} (L_{gur}^n - L_{gul}^n), \quad (2.19)$$

com

$$L_{gul}^n = (\alpha_u^{n-1} \bar{L}_{gu}^n + a_u^n \bar{L}_{gu}^{n-1}) / (a_u^{n-1} + a_u^n) \quad (2.20)$$

e

$$L_{gur}^n = L_{gul}^{n-1} \quad (2.21)$$

Sendo que os L_{gus}^n foram obtidos impondo-se a continuidade da função $L_{gu}^n(u)$ e de sua

derivada primeira $\frac{d}{du} L_{gu}^n(u)$ nas interfaces entre os nodos.

2.2 – CORRENTES PARCIAIS DE SAÍDA

Utilizando as definições dos coeficientes primários e substituindo-se a expansão dada pela equação (2.12) na equação (2.4), obteremos as correntes parciais de saída, são elas:

$$J_{gul}^{-n} = A_{0gu}^n (\phi_g^n + c_{4gu}^n) + A_{1gu}^n J_{gul}^{+n} + A_{2gu}^n J_{gur}^{-n} + A_{3gu}^n c_{3gu}^n \quad (2.22)$$

e

$$J_{gur}^{+n} = A_{0gu}^n (\phi_g^n + c_{4gu}^n) + A_{2gu}^n J_{gul}^{+n} + A_{1gu}^n J_{gur}^{-n} + A_{3gu}^n c_{3gu}^n \quad (2.23)$$

sendo que

$$A_{0gu}^n = - \frac{6(D_g^n / a_u^n)}{(1 + 12(D_g^n / a_u^n))} \quad , \quad (2.24)$$

$$A_{1gu}^n = \frac{(1 - 48(D_g^n / a_u^n)^2)}{((1 + 12(D_g^n / a_u^n))(1 + 4(D_g^n / a_u^n)))} \quad (2.25)$$

$$A_{2gu}^n = \frac{-8(D_g^n / a_u^n)}{((1 + 12(D_g^n / a_u^n))(1 + 4(D_g^n / a_u^n)))} \quad (2.26)$$

$$A_{3gu}^n = - \frac{6(D_g^n / a_u^n)}{(1 + 4(D_g^n / a_u^n))} \quad (2.27)$$

2.3 – EQUAÇÃO DE BALANÇO NODAL

Finalmente, obtém-se através da substituição das equações (2.22) e (2.23) na equação (2.3) o sistema de equações que define o fluxo de nêutrons médio no nodo:

$$\left(\sum_{u=x,y} 2 A_{0gu}^n / a_u^n + \Sigma_{Rg}^n \right) \phi_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^n \phi_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \sum_{g''=1}^n \Sigma_{gg''}^n \phi_{g''}^n + \sum_{u=x,y} 2 A_{0gu}^n (\alpha J_{gur}^n + J_{gu}^n) - c_{4gu}^n / a_u^n \quad (2.28)$$

As equações de (2.14) a (2.28), juntamente com os sistemas de equações para o cálculo dos coeficientes de altas ordens (c_{3gu}^n e c_{4gu}^n) e mais as condições de interface e de contorno, fazem parte do esquema iterativo usado no código desenvolvido no Programa de Engenharia Nuclear (PEN), para solucionar problemas estacionários a dois grupos de energia.

CAPÍTULO 3

MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS DE MALHA GROSSA

3.1 – INTRODUÇÃO

Os métodos nodais, entre eles o Método de Expansão Nodal NEM (Finnemann *et al.*, 1977), podem apresentar um elevado tempo na execução de cálculos repetitivos, como por exemplo na movimentação de bancos de barras de controle, na pesquisa da concentração crítica de boro solúvel, e também nos cálculos de queima de combustível. Na busca de procedimentos alternativos para acelerar os métodos nodais nestes cálculos, o Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa DFMG (Smith, 1983; Aragonés & Ahnert, 1986; Sutton & Aviles, 1996; Moon *et al.*, 1999; Chao, 1999; Da Silva *et al.*, 2003 e Pereira *et al.*, 2002) vem sendo uma ferramenta muito útil neste sentido.

A formulação do método utiliza como dados de entrada o coeficiente de difusão D_g^n , as correntes médias nas faces dos nodos J_{gus}^n , os fluxos médios nas faces do nodos ψ_{gus}^n , (s = e, d) o fluxo médio nos nodos ϕ_g^n , que são previamente calculados pelo Método de expansão Nodal, exposto no capítulo anterior.

De acordo com esta formulação (Silva e Martinez, 2003), adotando os fatores de correção de malha grossa, podemos escrever as correntes médias nas faces do nodo na seguinte forma:

$$J_{gul}^n = -D_{gul}^n \phi_g^n + D_{guw}^{n-1} \phi_g^{n-1} \quad (3.1)$$

e

$$J_{gur}^n = D_{gur}^n \phi_g^n + D_{gul}^{n-1} \phi_g^{n-1} \quad (3.2)$$

definindo:

- A notação $n-1$ representa o nodo vizinho ao nodo n , na esquerda da direção x e na frente da direção y ;

- A notação $n+1$ representa o nodo vizinho ao nodo n , na direita na direção x e atrás na direção y ;

3.2 – COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DE DIREÇÃO E FACE, E SEUS FATORES DE CORREÇÕES:

Os coeficientes de difusão dependentes de direção ($u = x, y$) e face ($s = l, r$), (Aragones & Ahnert, 1986), são assim

calculados:

$$D_{gul}^n = \frac{2\left(\frac{1}{a_u^{n-1}} D_g^{n-1} + \frac{1}{2} C_{gur}^n\right)\left(\frac{1}{a_u^n} D_g^n - \frac{1}{2} C_{gul}^n\right)}{\left(\frac{1}{a_u^{n-1}} D_g^{n-1} + \frac{1}{2} C_{gur}^{n-1}\right)\left(\frac{1}{a_u^n} D_g^{n+1} + C_{gul}^{n+1}\right)} \quad (3.3)$$

$$D_{gur}^n = \frac{2\left(\frac{1}{a_u^n} D_g^n + \frac{1}{2} C_{gur}^n\right)\left(\frac{1}{a_u^{n+1}} D_g^{n+1} - \frac{1}{2} C_{gul}^{n+1}\right)}{\left(\frac{1}{a_u^{n-1}} D_g^n + \frac{1}{2} C_{gur}^n\right)\left(\frac{1}{a_u^n} D_g^{n+1} + C_{gul}^{n+1}\right)} \quad (3.4)$$

onde

$$C_{gul}^n = \frac{J_{gul}^n + \frac{2}{a_u} D_g^n (\phi_g^n - \psi_{gul}^n)}{\phi_g^n + \psi_{gul}^n} \quad (3.5)$$

e

$$C_{gur}^n = - \frac{J_{gur}^n - \frac{2}{a_u} D_g^n (\phi_g^n - \psi_{gur}^n)}{\phi_g^n + \psi_{gul}^n} \quad (3.6)$$

Considerando-se as definições de n-1 e n+ 1, equações (3.1) e (3.2),e substituindo-as na equação

$$\frac{\sum_{u=x,y,z} (J_{gur}^n - J_{gul}^n)}{a_u} + \sum_{Rg}^n \phi_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \sum_{g''=g}^n \phi_{g'}^n \quad (3.7)$$

tem- se que :

$$A_{n,n_f} \Phi^{n_f} - A_{n,n_e} \Phi^{n_e} + A_{n,n} \Phi^n - A_{n,n_d} \Phi^{n_d} - A_{n,n_t} \Phi^{n_t} = \frac{1}{k_{eff}} S_f^n \quad (3.8)$$

onde n_f , n_e , n_d e n_t representam , nesta ordem , os nodos vizinhos ao nodo n, na frente, à esquerda, à direita e atrás.

As matrizes associadas são:

$$\Phi^n \equiv \begin{bmatrix} \phi_1^n \\ \phi_2^n \end{bmatrix} \quad S_f^n \equiv \begin{bmatrix} \chi_1 \sum_{g=1}^2 \nu \Sigma_{fg}^n \phi_g^n \\ \chi_2 \sum_{g=1}^2 \nu \Sigma_{fg}^n \phi_g^n \end{bmatrix}$$

$$A_{n,m} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a_u} D_{1ur}^m & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_u} D_{2ur}^m \end{bmatrix} \quad ; \quad \text{para } m = \begin{cases} n_f & \text{se } u = y \\ n_e & \text{se } u = x \end{cases}$$

$$A_{n,m} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a_u} D_{1ul}^m & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_u} D_{2ul}^m \end{bmatrix} \quad ; \quad \text{para } m = \begin{cases} n_d & \text{se } u = y \\ n_t & \text{se } u = x \end{cases}$$

e

$$A_{n,n} \equiv \begin{bmatrix} b_1^n & -\Sigma_{12}^n \\ -\Sigma_{21}^n & b_2^n \end{bmatrix}$$

sendo

$$b_g^n \equiv \Sigma_{Rg}^n + \frac{1}{a_x} (D_{gx'l}^n + D_{gx'r}^n) + \frac{1}{a_y} (D_{gy'l}^n + D_{gy'r}^n) \quad (3.9)$$

O sistema bloco penta-diagonal formado por todos os nodos em que o núcleo do reator foi dividido em conjunto com as condições de contorno e simetria, tem as estratégias de solução bem definidas pela teoria do método de diferenças finitas clássica, como por exemplo, o método SOR para as iterações internas, o método de Potências para as iterações externas, aceleração de Chebyshev e o método iterativo de Wielandt (Wachspress, 1966 e Nakamura, 1977).

CAPÍTULO 4

MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS

4.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo, será apresentado o método perturbativo dos pseudo-harmônicos para se obter o fluxo de nêutrons e do fator de multiplicação na região perturbada.

O Método dos Pseudo-harmônicos surgiu como uma alternativa a alguns métodos da teoria da perturbação que apresentavam limitações em problemas complexos.

O Método é chamado de pseudo-harmônicos, devido ao fato de que Gandini (1978) propôs uma metodologia de perturbação explícita, chamada de método padrão ou método dos harmônicos. Nesta metodologia o fluxo de nêutrons perturbado era construído por meio de uma expansão em autofunções associadas ao operador de difusão. O método padrão produzia excelentes resultados quando aplicado a problemas unidimensionais e para um grupo de energia, no entanto em problemas multidimensionais e com mais grupos de energia, dificuldades numéricas e matemáticas eram observadas. Em vista desta limitação, foi desenvolvido o método dos Pseudo-Harmônicos (Gomit *et al.*, 1982), que tem como idéia básica construir o fluxo de nêutrons perturbado por meio de uma expansão em autofunções associadas à parte do operador de difusão que contém apenas a fuga e a remoção. Como esta parte do operador de difusão é representada por uma matriz simétrica, o problema de autovalor associado a esta matriz gera autovalores e autofunções reais. Deste modo, a grande vantagem deste método é que as auto-funções são obtidas grupo a grupo, e portanto, através de equações diferenciais desacopladas.

4.2 – MÉTODO PERTURBATIVO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS

A equação de Difusão, na forma multigrupo, para um sistema crítico, no estado estacionário pode ser descrita por:

$$(A - \lambda_0 F) \phi_0 = 0 \quad (4.1)$$

onde λ_0 é o autovalor fundamental, F é o operador fonte de fissão, $A = B + S$ representa a fuga mais remoção e S espalhamento. O fluxo de nêutrons não perturbado ϕ_0 , no modo fundamental, é representado por:

$$\phi_0 = \begin{bmatrix} \phi_{1,0} \\ \vdots \\ \phi_{g,0} \\ \vdots \\ \phi_{G,0} \end{bmatrix}$$

com G indicando o número de grupos de energia.

Se uma perturbação é causada no núcleo do reator, o fluxo perturbado de nêutrons é solução da seguinte equação:

$$(A' - \lambda') \phi = 0 \quad (4.2)$$

com

$$A' = A + \delta A$$

$$B' = B + \delta B$$

$$S' = S + \delta S$$

$$F' = F + \delta F$$

$$\lambda' = \lambda_0 + \delta \lambda$$

e

$$\phi' = \begin{bmatrix} \phi'_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi'_g \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi'_G \end{bmatrix}$$

Sendo

$$\phi' = \phi_0 + \delta \phi \tag{4.3}$$

onde $\delta \phi$ representa a perturbação no fluxo.

Expandindo tanto no fluxo perturbado, ϕ' , quanto no autovalor perturbado, λ' ,

tem-se:

$$\phi' = \sum_{k=0}^{\infty} \phi^{(k)} = \phi^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \phi^{(k)} \tag{4.4}$$

$$\lambda' = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^{(k)} = \lambda^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{(k)} \tag{4.5}$$

Onde o índice k nas equações (4.4) e (4.5) significa a ordem de aproximação na expansão, e obviamente $\underset{\sim}{\phi}^{(0)} = \underset{\sim}{\phi}_0$ e $\lambda^{(0)} = \lambda_0$, com $\underset{\sim}{\phi}^{(k)}$ satisfazendo ao seguinte sistema de

recorrência:

$$\begin{cases} (A - \lambda_0 F) \underset{\sim}{\phi}^{(0)} = 0 & (4.6) \\ (A - \lambda_0 F) \underset{\sim}{\phi}^{(k)} = \underset{\sim}{S}^{(k)} & ; \quad k = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (4.7)$$

desde que:

$$\underset{\sim}{S}^{(k)} = -\delta A \underset{\sim}{\phi}^{(k-1)} + \sum_{l=1}^k \lambda^{(l)} F \underset{\sim}{\phi}^{(k-l)} + \sum_{l=0}^{k-1} \lambda^{(l)} \delta F \underset{\sim}{\phi}^{(k-l-1)} \quad (4.8)$$

Analisando a k-ésima equação do sistema (4.6) e (4.7), vê-se que, pelo fato do operador $(A - \lambda_0 F)$ ser singular a equação (4.7) terá solução se, e somente se, $\left\langle \underset{\sim}{\phi}_0^* \underset{\sim}{S}^{(k)} \right\rangle = 0$.

Esta condição implica que:

$$\lambda^{(k)} = \frac{\left\langle \underset{\sim}{\phi}_0^* \delta A \underset{\sim}{\phi}^{(k-1)} \right\rangle - \sum_{l=1}^{k-1} \lambda^{(l)} \left\langle \underset{\sim}{\phi}_0^* F \underset{\sim}{\phi}^{(k-l)} \right\rangle - \sum_{l=0}^{k-1} \lambda^{(l)} \left\langle \underset{\sim}{\phi}_0^* \delta F \underset{\sim}{\phi}^{(k-l-1)} \right\rangle}{\left\langle \underset{\sim}{\phi}_0^* F \underset{\sim}{\phi}_0 \right\rangle} \quad (4.9)$$

onde $\langle \rangle$ indica tanto a integração em volume quanto as operações matriciais envolvidas. O

fluxo adjunto, no modo fundamental, $\underset{\sim}{\phi}_0^*$, satisfaz à seguinte equação:

$$(A^* - \lambda_0 F^*) \underset{\sim}{\phi}_0^* = 0 \quad (4.10)$$

com A^* e F^* sendo os operadores adjuntos a A e F , respectivamente, e

$$\underset{\sim 0}{\phi}^* = \begin{bmatrix} \phi_{1,0}^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{g,0}^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{G,0}^* \end{bmatrix}$$

Observamos que a solução da equação diferencial (4.7) não é a única, uma vez que todas as funções da forma abaixo satisfazem a esta equação.

$$\underset{\sim}{\phi}^{(k)} = c^{(k)} \underset{\sim 0}{\phi} + \underset{\sim part}{\phi}^{(k)} \tag{4.11}$$

onde $c^{(k)}$ é uma constante arbitrária da solução homogênea e $\underset{\sim part}{\phi}^{(k)}$ representa a solução particular da k -ésima equação (4.7).

A solução particular $\underset{\sim part}{\phi}^{(k)}$, para todo k , pertence a um espaço ortogonal a $\underset{\sim 0}{\phi}$. Este

espaço, que denominamos H_0 , é gerado pelos autovetores de modos mais altos (harmônicos)

$\underset{\sim i}{\phi}$ ($i = 1, 2, 3, \dots$) que satisfazem às seguintes equações:

$$(A - \lambda_i F) \underset{\sim i}{\phi} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, 3, \dots \tag{4.12}$$

Os harmônicos satisfazem, também, à seguinte relação de ortogonalidade

$$\left\langle \underset{\sim n}{\phi}^* F \underset{\sim i}{\phi} \right\rangle = 0 \quad \text{para } i \neq n \quad ; \quad \forall i, n = 0, 1, 2, \dots \tag{4.13}$$

onde $\phi_{\sim n}^*$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) são os autovetores adjuntos, de modos mais altos, que satisfazem às equações:

$$(A^* - \lambda_n F^*) \phi_{\sim n}^* = 0 \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

Os vetores $\phi_{\sim part}^{(k)}$ da expressão (4.11) para $k \geq 1$, podem, por sua vez, ser representados por uma combinação linear de vetores $\psi_{\sim g,j}$, cujo o conjunto forma uma base para H_0 . As componentes do vetor $\psi_{\sim g,j}$, são obtidas a partir dos pseudo-harmônicos.

Assim $\phi_{\sim part}^{(k)}$ pode ser expresso como:

$$\phi_{\sim part}^{(k)} = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{g=1}^G \alpha_{j,g}^{(k)} \psi_{\sim g,j} \quad (4.15)$$

4.3 – DETERMINAÇÃO DOS VETORES DE BASE $\psi_{\sim g,j}$

Os Pseudo-Harmônicos são as autofunções de cada operador de B_g representando fuga

$(-\vec{\nabla} \cdot D_g \vec{\nabla})$ mais remoção (Σ_R^g) , em cada grupo g de energia, onde:

$$B_g = -\vec{\nabla} \cdot D_g \vec{\nabla} + \Sigma_R^g \quad ; \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (4.16)$$

O operador B_g possui uma infinidade de autovalores $\gamma_{g,j}$ reais e positivos, e as autofunções associadas (os pseudo-harmônicos) $\omega_{g,j}$ são soluções da seguinte equação:

$$B_g \omega_{g,j} = \gamma_{g,j} \omega_{g,j} \quad ; \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (4.17)$$

A partir dos pseudo-harmônicos, $\omega_{g,j}$, construímos dois vetores $w_{\sim g,j}$ da forma

$$w_{\sim 1,j} \equiv \begin{bmatrix} \omega_{\sim 1,j} \\ 0 \\ \sim \end{bmatrix} \quad w_{\sim 2,j} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_{\sim 2,j} \\ \sim \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

os vetores $w_{\sim g,j}$ pertencem ao espaço gerado pelos harmônicos, $\phi_{\sim i}$ ($i = 1, 2, 3, \dots$), e pelo

fluxo no modo fundamental, $\phi_{\sim 0}$. Assim, os vetores $w_{\sim g,j}$ podem ser expressos como:

$$w_{\sim g,j} = \sum_{i=0}^{\infty} b_{ij}^g \phi_i \quad (4.19)$$

onde os coeficientes b_{ij}^g são determinados com a utilização da relação de ortogonalidade

(4.13), logo,

$$b_{ij}^g = \frac{\left\langle \phi_{\sim i}^* F w_{\sim g,j} \right\rangle}{\left\langle \phi_{\sim i}^* F \phi_{\sim i} \right\rangle} \quad (4.20)$$

Desejamos então construir (a partir do conjunto $w_{\sim g,j}$) uma base para o espaço H_0

que é ortogonal a $\phi_{\sim 0}$. Para isso, definimos um conjunto de vetores $\psi_{\sim g,j}$, através da extração

da contribuição da componente $\phi_{\sim 0}$ em (4.18), assim:

$$\psi_{\sim g,j} = w_{\sim g,j} - \frac{\left\langle \phi_{\sim 0}^* F w_{\sim g,j} \right\rangle}{\left\langle \phi_{\sim 0}^* F \phi_{\sim 0} \right\rangle} \phi_{\sim 0} \quad (4.21)$$

Agora, resta-nos calcular os coeficientes $\alpha_{j,g}^{(k)}$ da expansão dos $\phi_{\sim part}^{(k)}$, equação (4.15).

4.4 – MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS (FORMULAÇÃO FRACA)

Neste método, é sugerida a inversão de uma matriz (ver Silva. F.C, 1985). O problema tem o seguinte tratamento:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sum_{g=1}^G \alpha_{j,g}^{(k)} (B + S - \lambda_0 F) \omega_j^g = s^{(k)} \quad (4.22)$$

mas como $B\omega_j^g = \beta_{g,j} \omega_j^g$ se truncarmos a série acima no N-ésimo harmônico, multiplicarmos a esquerda por $\omega_i^{g'}$ e integrarmos em todo o volume, obteremos :

$$\beta_{g',i} \langle \omega_{g',i} \omega_{g',i} \rangle \alpha_{i,g'}^{(k)} + \sum_{j=1}^N \sum_{g=1}^G r_{ij}^{g'g} \alpha_{j,g}^{(k)} = f_{i,g'}^{(k)} \quad (4.23)$$

onde :

$$r_{ij}^{g'g} = \langle \omega_i^{g'} (S - \lambda_0 F) \omega_j^g \rangle \quad e \quad (4.24)$$

$$f_{i,g'}^{(k)} = \langle \omega_i^{g'} s^{(k)} \rangle \quad (4.25)$$

sendo que:

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

$$g' = 1, 2, \dots, G$$

Notamos então que a expressão (4.18) representa um sistema de N x G equações lineares, que pode ser representado matricialmente da seguinte forma:

$$(U + R) \alpha^{(k)} = s^{(k)} \quad (4.26)$$

com

$$\alpha^{(k)} = \begin{bmatrix} \alpha_{1,1}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{N,1}^{(k)} \\ \alpha_{1,2}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{N,2}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{1,G}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{N,G}^{(k)} \end{bmatrix} \quad s^{(k)} = \begin{bmatrix} f_{1,1}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{N,1}^{(k)} \\ f_{1,2}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{N,2}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{1,G}^{(k)} \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{N,G}^{(k)} \end{bmatrix}$$

as componentes $\alpha_{j,g}^{(k)}$ do vetor $\alpha^{(k)}$, solução da equação (4.20), são os coeficientes que necessitamos para determinar os $\phi^{(k)}$.

4.5 - MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS (FORMULAÇÃO FORTE)

A seguir será exposta a solução via sistema recorrente (ver Abreu.M.P, 1990). Podemos escrever a expressão resultante da substituição de (4.15) em (4.11) e a expressão resultante na equação (4.7), podemos escrever a seguinte equação:

$$\sum_{l=1}^L \alpha_l \left[\beta_l I - \lambda F - S \right]_{\sim} w = \tilde{s}^{(k)} \quad (4.27)$$

Pelo método dos pseudo-harmônicos (de Abreu *et al.*, 1989), podemos definir um conjunto de vetores linearmente independentes da seguinte maneira:

$$\eta_{\sim j} \equiv \left[\beta_j I - \lambda F - S \right]_{\sim j} w_j \quad ; \quad j = 1, \dots, J \quad (4.28)$$

A equação (4.27) fica assim escrita

$$\sum_{j=1}^J \alpha_j \eta_j = s^{(k)} \quad (4.29)$$

Para calcular os α_j , os vetores η_j são ortogonalizados, pois isto facilita a obtenção dos coeficientes α_j . A ortogonalização dos vetores η_j é feita através do processo de Gram-Schmidt, da seguinte forma:

Sendo

$$\underset{\sim l}{v} = \underset{\sim l}{\eta} \quad (4.30)$$

os demais vetores ortogonais são dados por

$$\underset{\sim j}{v} = \underset{\sim j}{\eta} - \sum_{m=1}^{j-1} a_{jm} \underset{\sim m}{v} \quad ; \quad j = 2, \dots, J \quad (4.31)$$

com

$$a_{jm} \equiv \frac{\left\langle \underset{\sim j}{v}^T \underset{\sim j}{\eta} \right\rangle}{\left\langle \underset{\sim j}{v}^T \underset{\sim j}{v} \right\rangle} \quad ; \quad m = 1, \dots, j-1 \quad \text{e} \quad j = 2, \dots, J \quad (4.32)$$

onde

$$\left\langle \underset{\sim m}{v}^T \underset{\sim j}{\eta} \right\rangle \equiv \sum_{k=1}^J v_{mk} \eta_{jk} \quad (4.33)$$

e

$$\left\langle \underset{\sim m}{v}^T \underset{\sim m}{v} \right\rangle \equiv \sum_{k=1}^J v_{mk} v_{mk}$$

De acordo com (4.31) observamos as seguintes propriedades:

$$\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_j \sim_m \end{matrix} \right\rangle = 0, \quad \text{para } m = 1, \dots, j-1 \quad \text{e} \quad j = 2, \dots, J \quad (4.34)$$

e ainda

$$\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_j \sim_j \end{matrix} \right\rangle = \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{v} \\ \sim_j \sim_j \end{matrix} \right\rangle \quad \text{para} \quad j = 1, \dots, J \quad (4.35)$$

Agora, multiplicando a equação (4.29) por \mathbf{v}_m^T e aplicando o produto interno, segue

$$\sum_{j=1}^J \alpha^{(k)} \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_m \sim_j \end{matrix} \right\rangle = \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{s}^{(k)} \\ \sim_m \sim \end{matrix} \right\rangle \quad (4.36)$$

Usando as propriedades dadas em (4.34) e (4.35) na equação acima, chegamos a

$$\alpha^{(k)} \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_m \sim_m \end{matrix} \right\rangle + \sum_{j=m+1}^J \alpha^{(k)} \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_m \sim_j \end{matrix} \right\rangle = \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{s}^{(k)} \\ \sim_m \sim \end{matrix} \right\rangle, \quad (4.37)$$

de onde se obtém

$$\alpha^{(k)} \equiv \frac{\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{s}^{(k)} \\ \sim_j \sim \end{matrix} \right\rangle}{\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{v} \\ \sim_j \sim_j \end{matrix} \right\rangle} \quad (4.38)$$

e

$$\alpha^{(k)} = \frac{\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{s}^{(k)} \\ \sim_j \sim \end{matrix} \right\rangle - \sum_{m=j+1}^J \alpha^{(k)} \left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \boldsymbol{\eta} \\ \sim_j \sim_m \end{matrix} \right\rangle}{\left\langle \begin{matrix} \mathbf{v}^T \mathbf{v} \\ \sim_j \sim_j \end{matrix} \right\rangle}; \quad j = J, \dots, 1 \quad (4.39)$$

Com as expressões dadas em (4.38) e (4.39), para os coeficientes α_l , a solução particular dada em (4.15) fica então determinada.

4.6 – SOLUÇÃO USANDO PROCESSO ITERATIVO

Apresentamos agora o método dos pseudo-harmônicos utilizando o processo iterativo. Seja a equação para o sistema perturbado:

$$B' \phi' = \lambda' F' \phi' + S' \phi' \quad (4.40)$$

Agora vamos reescrever a equação em função dos operadores não perturbados e das perturbações:

$$(B + \delta B) \phi' = (\lambda + \delta \lambda) (F + \delta F) \phi' + (S + \delta S) \phi' \quad (4.41)$$

isolando os operadores não perturbados chegaremos a

$$(B - \lambda F - S) \phi' = (\delta \lambda F' + \lambda \delta F + \delta S - \delta B) \phi' \quad (4.42)$$

No processo iterativo, fazemos

$$(B - \lambda F - S) \phi^{(i+1)} = S^{(i)} \quad , \quad (4.43)$$

com

$S^{(i)} \equiv (\delta \lambda^{(i)} F' + \lambda \delta F - \delta A) \phi^{(i)}$, definida como a fonte virtual do problema,

onde

$$\delta A \equiv \delta B - \delta S$$

Pela Alternativa de Freedholm, qual seja,

$$\langle \phi^{*T} S^{(i)} \rangle = 0$$

tem- se que

$$\delta \lambda^{(i)} = \frac{\langle \phi^{*T} (\delta A - \lambda \delta F) \phi^{(i)} \rangle}{\langle \phi^{*T} F' \phi^{(i)} \rangle} \quad (4.44)$$

Agora , fazendo:

$$s_f^{(i)} \equiv F' \phi^{(i)} \quad (4.45)$$

e

$$s_p^{(i)} \equiv (\delta A - \lambda \delta F) \phi^{(i)} \quad , \quad (4.46)$$

podemos escrever :

$$\delta \lambda^{(i)} = \frac{\langle \phi^{*T} s_p^{(i)} \rangle}{\langle \phi^{*T} s_f^{(i)} \rangle} \quad (4.47)$$

e

$$s^{(i)} = \delta \lambda^{(i)} s_f^{(i)} - s_p^{(i)} \quad (4.48)$$

4.7- DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE ARBITRÁRIA

Para obtermos a solução geral do problema basta calcularmos a constante c da equação

(4.9) . Com esta finalidade , normalizaremos ϕ' à unidade da seguinte forma :

$$\sum_{n,g} \phi_g^n = 1 \quad \text{e} \quad \sum_{n,g} \phi_g'^n = 1$$

logo,

$$\sum_{n,g} \phi_g'^n = c \sum_{n,g} \phi_g^n + \sum_{n,g} \phi_{g,part}'^n \Rightarrow 1 = c + \sum_{n,g} \phi_{g,part}'^n \quad (4.49)$$

mas

$$\begin{bmatrix} u_1^T & u_2^T \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix}$$

Usamos o fato de:

$$\begin{bmatrix} u_1^T & u_2^T \end{bmatrix} \equiv u^T$$

além de

$$\begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} \equiv \phi$$

e

$$\sum_{n,g} \phi_{g,part}'^n \equiv \langle u^T \phi'_{part} \rangle$$

Substituindo estes valores na equação (4.42), chegaremos a :

$$1 = c + \langle u^T \phi'_{part} \rangle$$

Isolando a constante arbitrária, chegamos a

$$c = 1 - \langle \mathbf{u}^r \phi'_{part} \rangle$$

Algoritmo do Processo Iterativo:

- 1) Faz-se $i = 1$
- 2) Faz-se $\phi^{(i)} = \phi$ e $\lambda^{(i)} = \lambda$
- 3) Faz-se $i = i + 1$
- 4) Calcula-se $s_f^{(i)}$ e $s_p^{(i)}$ usando (1) e (2)
- 5) Calcula-se $\delta \lambda^{(i)}$ usando (3)
- 6) Calcula-se $\lambda^{(i+1)} = \lambda + \delta \lambda^{(i)}$
- 7) Calcula-se $s^{(i)}$ usando (4)
- 8) Calcula-se $\beta_j^{(i+1)}$
- 9) Calcula-se $\phi_{part}^{(i+1)} = \sum_{j=1}^{NPH+NPH} \beta_j^{(i+1)} \Gamma_j$; $\Gamma_j \equiv W_j - b_j \phi$;
- 10) Calcula-se $c^{(i+1)} = 1 - \langle \mathbf{u}^T \phi_{part}^{(i+1)} \rangle$
- 11) Calcula-se $\phi^{(i+1)} = c^{(i+1)} + \phi_{part}^{(i+1)}$
- 12) Testa-se a convergência, fazendo-se:
 Se $|(\lambda^{(i+1)} - \lambda^{(i)}) / \lambda^{(i+1)}| \leq \varepsilon_\lambda$, então
 Se $\max_{n,g} |(\phi_{n,g}^{(i+1)} - \phi_{n,g}^{(i)}) / \phi_{n,g}^{(i+1)}| \leq \varepsilon_\phi$
 Se não convergir, retornar ao item 3.

CAPÍTULO 5

APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS E CONCLUSÃO

5.1 – INTRODUÇÃO

Este capítulo destina-se a apresentação e a análise dos resultados obtidos pelo método proposto.

Para a execução desta proposta de trabalho foram utilizados sete programas.

São eles, o programa TRATA que discretiza o núcleo em nodos e gera o arquivo de entrada para o NEM 3D. Este calcula os fluxos reais que são usados como dados de entrada para o programa COLAPSA, que faz a colaptação das seções de choque de três dimensões para duas dimensões. Os dados de saída do programa COLAPSA são os dados de entrada para o DFMG 2D, que nos gera como saída os fluxos adjuntos e as matrizes. Além destes programas foram elaborados mais três: o PSEUDO que calcula os pseudo-harmônicos, o ORTOGON que calcula e ortogonaliza os vetores η e v , e o programa ITERA que faz o cálculo da fonte, dos fluxos perturbados, dos autovalores e a diferença percentual entre o método dos pseudo-harmônicos iterativo e o cálculo direto.

5.2 – SISTEMA DE REFERÊNCIA

O sistema de referência para a aplicação do método foi um reator de potência nuclear de grande porte tipo PWR (Reator a Água Pressurizada) com 193 elementos combustíveis.

5.3 – SISTEMA PERTURBADO

Foram simuladas três tipos de perturbações: a primeira com a retirada de todas as barras, a segunda com a retirada da barra central e a terceira, alterando a concentração de boro solúvel, caracterizando uma perturbação global.

5.4 – CARACTERIZAÇÃO DO REATOR

São apresentadas nesta seção as regiões que caracterizam o núcleo do reator utilizado. Na figura (5.1) podemos observar a configuração para o núcleo. A numeração de 1 a 11 indica as posições das barras de controle em 1/8 de núcleo.

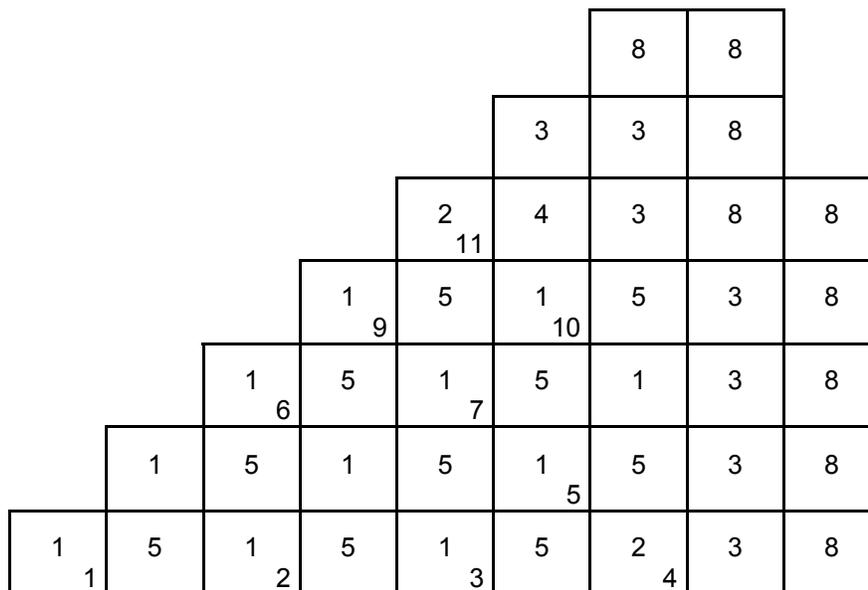


Figura (5.1) – Reator e barras de controle.

Na tabela (5.1) tem-se as seções de choque (dois grupos de energia) caracterizando cada região do núcleo.

Tabela (5.1) – Parâmetros de Multigrupos do PWR

Tipo	g	Σ_{ag}	D_g	$\nu \Sigma_{fg}$	Σ_{gg}'
1	1	9.298335 E-03	1.436000	5.870800 E-03	0.0
	2	5.287868 E-02	3.6350000 E-01	9.606700 E-02	1.775700 E-02
2	1	9.474735 E-03	1.436600	6.190800 E-03	0.0
	2	5.632868 E-02	53.636000 E-01	1.035800 E-01	1.762100 E-02
3	1	1.016773 E-02	1.438900	7.452700 E-03	0.0
	2	6.936668 E-02	3.638000 E-01	1.323600 E-01	1.710100 E-02
4	1	9.815735 E-03	1.438100	6.190800 E-03	0.0
	2	6.304067 E-02	3.665000 E-01	1.035800 E-01	1.729000 E-02
5	1	9.946735 E-03	1.438500	6.428500 E-03	0.0
	2	6.553867 E-02	3.665000 E-01	1.091100 E-01	1.719200 E-02
6	1	9.985735 E-03	1.438900	6.190800 E-03	0.0
	2	6.639668 E-02	3.679000 E-01	1.035800 E-01	1.712500 E-02
7	1	1.011473 E-02	1.439300	6.428500 E-01	0.0
	2	6.889468 E-02	3.680000 E-01	1.091100 E-01	1.702700 E-02
8	1	2.226735 E-03	1.320000	0.0	0.0
	2	5.124368 E-02	2.772000 E-01	0.0	2.310600 E-02

5 – APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

No primeiro caso analisado, são retiradas todas as barras do reator. O gráfico abaixo, mostra o comportamento do fluxo de nêutrons ao longo da linha do nodo de maior desvio, que foi de 19%.

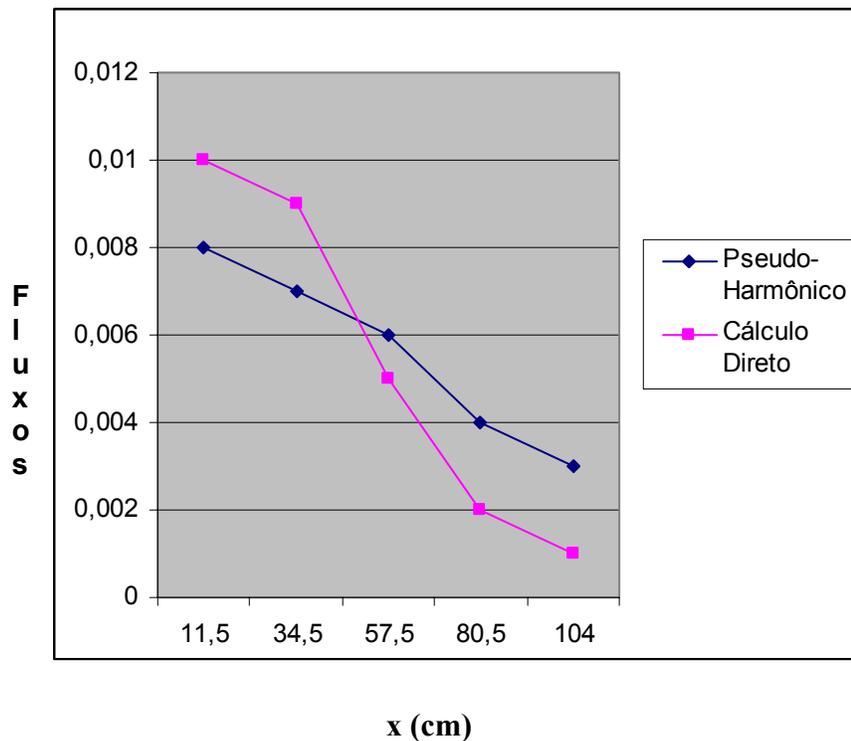


Figura (5.2) – Fluxo de nêutrons para o caso de todas as barras de controle retiradas

O gráfico acima nos mostra o comportamento do fluxo de Nêutrons calculado tanto para o método de cálculo direto, como para o método dos Pseudo-Harmônicos com o processo iterativo. O autovalor, calculado pelo método direto e calculado pelo método dos pseudo-harmônicos iterativo foi 1,00000.

Os critérios de convergência, para todos os casos apresentados, foram 1×10^{-5} , para o fluxo e 1×10^{-6} para o autovalor.

No segundo caso analisado, apenas a barra central é retirada e todas as outras barras permanecem no núcleo. O gráfico abaixo, mostra o comportamento do fluxo de nêutrons ao longo da linha do nodo de maior desvio, que foi de 12%.

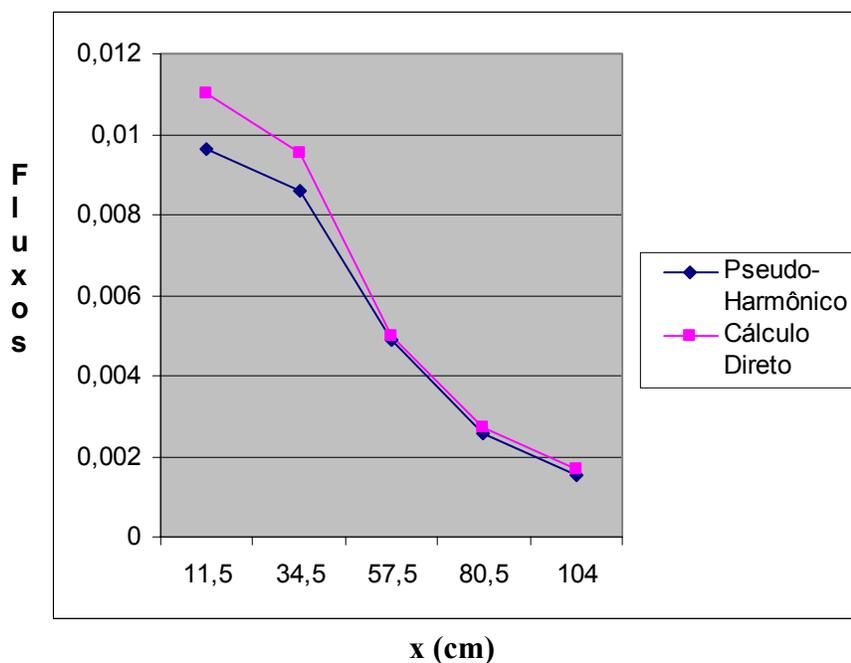


Figura (5.3) – Fluxo de nêutrons para o caso da barra central retirada

Neste gráfico, podemos ver o comportamento do fluxo de Nêutrons calculado com o método do cálculo direto e pelo método dos Pseudo-Harmônicos iterativo, para a linha do nodo que apresentou o maior desvio. O autovalor, calculado pelo método direto foi 1,025537 e calculado pelo método dos pseudo-harmônicos iterativo foi 1,025539. O desvio percentual entre eles é de $-2,30441 \times 10^{-5}$.

No terceiro caso analisado, é causada uma perturbação global no reator, alterando-se a concentração de boro solúvel. O gráfico abaixo, mostra o comportamento do fluxo de nêutrons ao longo da linha do nodo de maior desvio, que foi de 8%.

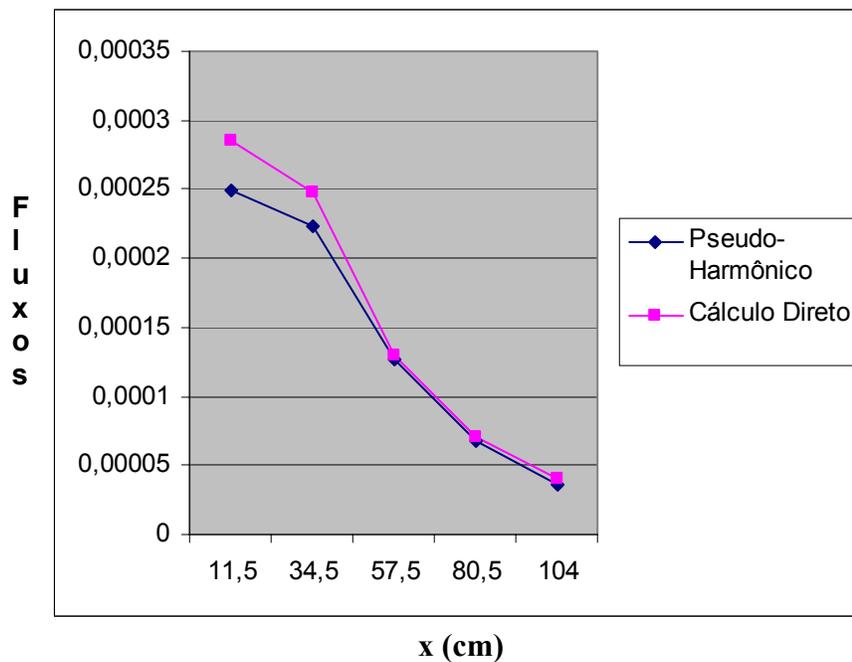


Figura (5.4) – Fluxo de nêutrons para uma perturbação global

Podemos ver o comportamento do fluxo de Nêutrons calculado com o método de cálculo direto em comparação aquele calculado pelo método dos Pseudo-Harmônicos com o processo iterativo. O autovalor, calculado pelo método direto foi 1,014824 e calculado pelo método dos pseudo-harmônicos iterativo foi 1,014920. O desvio percentual entre eles é de -9.6×10^{-5} .

5.6 – EFICIÊNCIA, DESEMPENHO COMPUTACIONAL E CONCLUSÃO

O Método dos Pseudo-Harmônicos, associado a um Processo Iterativo, foi comparado ao Método dos Pseudo-Harmônicos com a formulação forte. Para o caso da barra central retirada, os autovalores do Cálculo Direto, do Método dos Pseudo-Harmônicos associado a um processo Iterativo e do Método dos Pseudo-Harmônicos com a formulação forte foram 0,9750992, 0,9750988 e 0,9750997, respectivamente. O desvio percentual foi de $4,1021467 \times 10^{-7}$, para Método dos Pseudo-Harmônicos associado ao Processo Iterativo e de $-5,1276834 \times 10^{-7}$ para o Método dos Pseudo-Harmônicos com a formulação forte. O tempo computacional foi de 7,78 segundos, para o Método dos Pseudo-Harmônicos associado ao Processo Iterativo e de 7,91 segundos o Método dos Pseudo-Harmônicos com a formulação forte. Portanto, o Método dos Pseudo-Harmônicos associado ao Processo Iterativo é comparável em precisão para o cálculo de autovalor, com o Método dos Pseudo-Harmônicos com a formulação forte.

Conclui-se que foi provada a potencialidade do método tanto para o cálculo de quantidades globais, como o autovalor, quanto para o cálculo do fluxo perturbado de nêutrons.

Recomenda-se a generalização do mesmo para três dimensões, sem a etapa da ortogonalização.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

DE ABREU, M.P., THOMÉ, Z.D., ALVIM, A.C.M., 1989, *Ann. Nucl. Energy*, 16, 213.

DE ABREU, M. P., THOMÉ, Z. D., ALVIM, A. C. M., et al., 1990, “Une Methode Alternative de Pseudo-Harmoniques: Quelques Considérations au Sujet de la Solution Forte du Système Récurrent et des Nouvelles Applications”, E. D. F. *Bulletin de la Direction des Études et Recherches, Série C*, n. 4, pp. 1-16.

ARAGONES, J.M., AHNERT, C., 1986, “Linear Discontinuous Finite Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion Calculations “, *Nuclear Science and Engineering*, 94, 309.

FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F e WAGNER, M.R., 1977, “Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations”, *Atomkernenergie*, 30, 123.

GANDINI, A., 1978, “Implicit and Explicit Higher Order Perturbation Methods for Nuclear Reactor Analysis”, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 67, pp.347-355.

GLASSTONE, S., EDLUND, M.C., 1952, *The Elements of Nuclear Reactor Theory*. 1ed. Princeton, N.J., van nostrand company.

GOMIT, J.M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., 1985, Série A Nucléaires, *Hydraulique, Thermique*.

GOMIT, J M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., 1982, “Utilisation des Harmoniques em Physique des Réacteurs: Méthode Standard et Méthode des Pseudo-Harmoniques”, *Département Physique de Réacteurs, Électricité de France (E.D.F.)*, Report HI 4345-07.

MARTINEZ, A.S., PEREIRA, V.e SILVA, F. C., 1999, “A system for the prediction and determination of the sub-critical multiplication condition”, *Kerntechnik*, v. 64, n. 4, pp. 230-234.

NAKAMURA, S ., 1977, *Computacional Method in Engineering and Science*, 1ed, John Wiley & Sons, New York.

SILVA, F.C ., MARTINEZ , A.S., 2003 , “Aceleração do Método Nodal NEM usando Diferenças Finitas de Malha Grossa “. VI Encontro de Modelagem Computacional , Nova Friburgo/ rj, 1-3 de Dezembro.

SILVA., F. C., WAINTRAUB, THOMÉ , Z.D., et. Al., 1987 , “The Pseudo-Harmonics Perturbation Method : Application to a PWR “, *Ann. Nucl. Energy*, v. 14, n.2,pp.99-10

SILVA, F.C., ROTENBERG, SILVIA, THOMÉ, Z.D., 1985 “Utilização do método dos Pseudo-harmônicos para o cálculo do fluxo perturbado”. V Encontro Nacional de Física de Reatores, Itaipava/rj.

SMITH, K. S., 1986, “Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 17, pp. 303-335.

SUTTON, T. M., ALVES, B. N., 1996, "Diffusion Theory Methods for Spatial Kinetics Calculations", *Progress in Nuclear Energy*, v. 30, n. 2, pp. 119-182.

WACHSPRESS, E. L., 1966, *Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutrons Diffusion Equations of Reactor Physics*. New Jersey, Prentice-hall.