

ESTUDO DO MÉTODO DE SÍNTESE ITERATIVA POR
DEFLAÇÃO NA RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE
DIFUSÃO APLICADA A CÁLCULOS DE REATORES
RÁPIDOS

*Paulo Emílio Gomes dos Reis Filho**

1. INTRODUÇÃO

1.1. ORIGEM DO PROBLEMA

O conhecimento da distribuição do fluxo neutrônico é necessário à determinação das características de funcionamento de um reator nuclear, em particular:

- otimização da distribuição de potência;
- respeito aos critérios de funcionamento do caroço (temperatura nominal da cápsula do combustível, potência linear máxima);
- determinação dos parâmetros de irradiação do caroço (taxas de combustão, dano);
- determinação dos parâmetros característicos de coberturas (ganho de regeneração, potência)

Em regime estacionário, a distribuição de equilíbrio do fluxo neutrônico só depende das variáveis espaço, ângulo e energia sendo a solução da equação de Boltzmann.

1.2. APROXIMAÇÃO TRANSPORTE-DIFUSÃO-DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS

De fato, mostra-se que, em primeira aproximação, a passagem transporte-difusão é válida para reatores de grande dimensão. Nesta condição pode-se escrever que a distribuição de equilíbrio do fluxo neutrônico é a solução de uma equação de difusão, qual seja:

(*) Instituto de Engenharia Nuclear- CNEN

$$\begin{aligned}
- \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left[a(r, E) \frac{\partial \phi(r, E)}{\partial x_i} \right] + b(r, E) \phi(r, E) - \int_{E' > E} c(r, E' \rightarrow E) \phi(r, E') dE' = \\
= \frac{d(r, E)}{\lambda} \int_E e(r, E') \phi(r, E') dE'
\end{aligned}$$

Para resolver esse problema de autovalores, simbolizado daqui por diante

$$A\phi = \frac{1}{\lambda} B\phi ,$$

utilizam-se técnicas clássicas de discretização das variáveis r e E , tendo-se em vista que uma solução contínua em espaço e energia é praticamente impossível.

Primeiramente, divide-se o intervalo útil de energia em um número finito de sub-intervalos (grupos de energia) e supõe-se que as funções a, b, c, d e e são constantes em cada sub-intervalo, isto é, fazem-se médias de modo a conservar as taxas de reação para que o balanço neutrônico seja exato. Estas funções de energia, chamadas secções eficazes macroscópicas equivalentes, são diretamente associadas ao modo fundamental do meio considerado e representam, com dada precisão, o valor médio espacial (cálculo de célula).

Em seguida, em cada grupo de energia, aproximam-se as derivadas espaciais da equação resultante, segundo a técnica de discretização escolhida. Enfim, formula-se um problema matricial que representa numericamente o problema contínuo de autovalores e resolve-se iterativamente o sistema linear de equações de difusão em teoria multigrupo.

2. OBJETIVO-PASSO DADO

Procura-se encontrar nesta pesquisa um método de síntese confiável para substituir o método clássico de diferenças finitas em geometria XYZ (geometria das experiências críticas de reatores rápidos) fazendo-se aparecer uma divisão relativamente fina em energia, isto é, mais fina que a divisão em 6 grupos utilizada nos cálculos de projeto de caroços de potência.

Ora, por uma questão de realismo, o passo dado síntese iterativa por deflação monocinética XYZ síntese iterativa por deflação em espaço e energia, foi realizado em geometria XY em vista de uma posterior generalização XYZ.

3. MÉTODOS EXISTENTES PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

3.1. DIFERENÇAS FINITAS

O método mais utilizado nesses últimos anos tem sido o de diferenças finitas, que necessita a construção de uma malha suficientemente fina, em particular onde o fluxo varia rapidamente, levando frequentemente à memórias de computador proibitivas.

Ora, com a necessidade de conhecer-se precisamente as posições dos pontos quentes de um caroço rápido, tendo-se em conta a posição variável das barras de controle ou os efeitos do "vazio de sódio" sobre a reatividade, o recurso frequente aos cálculos à três dimensões se torna imperativo. Donde a necessidade de métodos mais aproximados, o que nos coloca diante do compromisso de fazer um cálculo econômico mas suficientemente preciso. É por isso que depois de muitos anos numerosos estudos têm sido feitos na pesquisa de novos métodos.

Entre aqueles que têm sido propostos, dois deles parecem par

ticularmente promissores:

- (i) método de elementos finitos
- (ii) método de síntese

3.2. ELEMENTOS FINITOS

Neste método, o fluxo no interior de uma malha (elemento) do recorte geométrico é representado, por exemplo, através de polinômios de variáveis espaciais, em lugar de ser suposto constante como em diferenças finitas. Assim o fluxo a três dimensões (em cada grupo de energia) no ponto $r = (x, y, z)$ em cada sub-espaço (elemento) de volume V_h formado pela base $W_1(r) \dots W_N(r)$ é dado pela combinação linear:

$$\tilde{\phi}_h(r) = \sum_{i=1}^N \alpha_i W_i(r),$$

sendo α_i os coeficientes a determinar pelo método de Galerkin, e cada $W_i(r)$, polinômio de ordem n_x em X , n_y em Y , e n_z em Z , é associado a um nó i (sobre a superfície do elemento), onde por definição ele vale 1 sendo 0 nos outros nós. Isto permite malhas mais largas, tanto mais largas quanto mais elevado é o grau dos polinômios, necessitando-se em consequência bem menos malhas do que no caso de diferenças finitas.

Esse método, há muito tempo empregado no cálculo de estruturas, foi recentemente adaptado aos cálculos neutrônicos e, mais particularmente no domínio dos reatores térmicos.

No domínio de reatores rápidos, o método de elementos finitos vem sendo validado relativamente ao método referência de diferenças finitas apresentando resultados comparáveis aqueles fornecidos pelo método de síntese Kaplan descrito a seguir.

3.3. SÍNTESE KAPLAN

Neste método, chamado de síntese clássica ou Kaplan, o fato de um reator apresentar, em geral, uma fraca heterogeneidade na direção Z sugeriu a idéia de se dividir o caroço em regiões axiais homogêneas e de combinar as soluções à duas dimensões calculadas nessas regiões para formar a solução à três dimensões, ou seja:

$$\tilde{\phi}^g(x, y, z) = \sum_{\kappa=1}^K \alpha_{\kappa}^g(z) \psi_{\kappa}^g(x, y) \quad (g=1, NG),$$

onde em cada região axial "κ" do reator desprezam-se as derivadas relativas a Z. Resolve-se então um problema de autovalores à duas dimensões em XY e obtém-se a autofunção $\psi_{\kappa}^g(x, y)$ ($g=1, NG$).

Tomam-se as funções $\psi_{\kappa}^g(x, y)$ ($\kappa=1, K$, $g=1, NG$) como funções de base, e as funções $\alpha_{\kappa}^g(z)$ ($\kappa=1, K$, $g=1, NG$), chamadas de síntese, são obtidas pela resolução relativamente simples de equações diferenciais à uma dimensão em Z. Para isso utiliza-se o método de resíduos ponderados, que consiste a considerar um conjunto de K funções de ponderação $W_{\kappa}^g(x, y)$ ($\kappa=1, K$, $g=1, NG$) linearmente independentes. As funções $\alpha_{\kappa}^g(z)$ ($\kappa=1, K$, $g=1, NG$) devem, por um lado, verificar K condições de ortogonalidade:

$$\iint_{(xy)} W_{\kappa}^g(x, y) R^g(x, y, z) dx dy = 0 \quad \left[\begin{array}{l} \kappa=1, K \\ g=1, NG \end{array} \right],$$

e, de outro, satisfazer às condições de contorno compatíveis com aquelas de $\tilde{\phi}^g$ e R^g , o resíduo em cada grupo de energia dado por:

$$R^g(x, y, z) = A \left[\sum_{\kappa=1}^K \alpha_{\kappa}^g(z) \psi_{\kappa}^g(x, y) \right] - \frac{1}{\lambda} B \left[\sum_{\kappa=1}^K \alpha_{\kappa}^g(z) \psi_{\kappa}^g(x, y) \right] \neq 0$$

Obtém-se assim um sistema diferencial para cada grupo " g " com as condições de contorno de K equações, que permite o cálculo das K funções $\alpha_k^g(z)$ e portanto da aproximação $\tilde{\phi}^g(x,y,z)$.

Quanto às funções de ponderação $w_k^g(x,y)$ ninguém conseguiu demonstrar de maneira convincente que uma escolha pudesse dar melhores resultados que outra, salvo em casos particulares. Parece então mais prudente, no estado atual de conhecimentos, utilizar-se em síntese espacial a ponderação de Galerkin, pois, uma vez escolhidas as funções de base linearmente independentes, este método assegura a independência linear das funções de ponderação.

Os resultados de aplicação da síntese Kaplan em modelos de validação mostram desvios sobre a potência relativamente ao modelo referência de diferenças finitas da ordem de (0-1)% nos meios multiplicadores longe das barras de controle, (1-3)% perto destas, e de (3-5)% nas interfaces axiais com os meios fortemente moderadores (refletores de reatores térmicos) e absorvente-moderadores (coberturas de reatores rápidos). De outro lado, na sua utilização nos cálculos de projeto de reatores de potência, confirmam-se esses desvios nos estudos do caroço de partida do reator SUPER-PHENIX 1.

4. SÍNTESE ITERATIVA POR DEFLAÇÃO

4.1. REPAROS SOBRE O MÉTODO DE SÍNTESE KAPLAN

O maior inconveniente do método de síntese Kaplan, ou sua falta de precisão nas vizinhanças de irregularidades (barras de controle e interfaces caroço-cobertura), motivou o desenvolvimento de um método de síntese original, chamado "síntese iterativa por deflação"

O princípio essencial deste método, conservando as vantagens da

síntese Kaplan (memória a tempo de cálculo reduzidos) é o de liberar a utilização de certos vínculos, quais sejam:

- (i) escolha do número de termos;
- (ii) escolha das funções de base;
- (iii) escolha das funções de ponderação

Liberando-se o ponto 1, pode-se aumentar o número de termos necessários ao aumento da precisão de um cálculo de síntese nas vizinhanças das irregularidades, daí a idéia de deflação (calcular um termo a cada vez), ao inverso da síntese Kaplan que não pode construir mais termos que o número de regiões axiais disponíveis. E, liberando-se os pontos 2 e 3, elimina-se o lado arbitrário à toda escolha, donde a idéia de iteração.

A eficiência deste método foi avaliada em problemas representativos à duas dimensões em geometria retangular. Para isso, o fluxo em cada grupo de energia foi expressido por:

$$\tilde{\Phi}^g(x, y) = \sum_{k=1}^K \alpha_k^g(y) \psi_k^g(x) \quad (g=1, NG),$$

onde cada termo da aproximação é calculado separadamente iterando-se sobre as funções α_k^g , ψ_k^g até que o desvio entre as funções α_k^g assim como entre as funções ψ_k^g , seja considerado suficientemente pequeno. Calcula-se então o primeiro termo $\alpha_1^g(y) \psi_1^g(x)$ ($g=1, NG$) empregando-se o método de Galerkin de tal forma a repetir-se um cálculo de síntese alternativamente em Y e em X, utilizando-se como funções de base as funções de síntese resultantes do cálculo precedente. A partir desse primeiro resultado modifica-se o problema inicial de sorte que um novo cálculo de síntese iterativa a um só termo forneça o termo seguinte.

Todos os termos são assim calculados um após o outro por deflação, até que, por exemplo, a norma do último termo seja menor que uma precisão especificada.

Os resultados obtidos para configurações representativas de experiências críticas no plano principal X,Y (desvios sobre a potência relativamente às diferenças finitas da ordem de (0-1)% nos meios multiplicadores perto das barras de controle assim como nas interfaces caroço-cobertura e vizinhanças) encorajaram a generalização do método à três dimensões em geometria XYZ.

4.2. QUALIFICAÇÃO RELATIVAMENTE AO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Agora, procura-se aproximar o fluxo em cada grupo de energia pela combinação linear:

$$\tilde{\phi}^g(x,y,z) = \sum_{\kappa=1}^K \alpha_{\kappa}^g(z) \phi_{\kappa}^g(y) \gamma_{\kappa}^g(x) \quad (g=1,NG)$$

Para qualificar o método de síntese iterativa por deflação relativamente ao método de elementos finitos, considera-se um caroço rápido em conceito heterogêneo (constituído de uma zona fértil interna para favorecer a produção de plutônio) em geometria retangular a três dimensões XYZ (Fig.1).

Para se liberar neste estudo preliminar dos efeitos em energia e limitar o tempo de cálculo dos testes, efetuou-se o cálculo a 1 grupo.

A comparação evidencia uma desvantagem do método de síntese, que apresenta um tempo de cálculo 4 vezes maior sem apresentar a mesma precisão no cálculo do autovalor (desvió de $-50\text{pcm} \approx -50 \times 10^{-5} \Delta\lambda/\lambda$), (Fig. 2), (Tabela I).

Tal fato é explicado por uma lenta convergência do cálculo do fluxo na cobertura axial externa superior, onde ele varia fortemente à partir da interface caroço-cobertura e apresenta valores 50 vezes menores relativamente aqueles obtidos no caroço.

Levando-se em conta que o cálculo a 1 grupo é insuficiente para calcular o fluxo neutrônico de um caroço rápido, conclui-se

deste estudo preliminar de qualificação, que se deve modificar o método de síntese para poder levar em conta a variável energia a fim de que este método fique competitivo com o método de elementos finitos. Logo, o caminho que parece mais promissor é o de separar a variável energia das variáveis de espaço e daí possibilitar-se a divisão a vários grupos de energia.

4.3. PRINCÍPIO DO MÉTODO CLÁSSICO DE SÍNTESE EM ESPAÇO E ENERGIA

O ponto de partida deste método é a obtenção de um conjunto de espectros de base realistas característicos de cada meio físico. Além disso, eles devem ser calculados a partir de critérios físicos simples. Por exemplo, o cálculo de diferenças finitas em teoria multigrupo à uma dimensão pode fornecer espectros de base realistas. Esta escolha é justificada pelo fato que um cálculo à uma dimensão é econômico, mesmo a vários grupos. Logo ele pode servir como ponto de partida para o cálculo de síntese espectral.

Desde que são conhecidos os espectros de base, pode-se combiná-los para formar a solução que se exprime de uma forma contínua por:

$$\tilde{\phi}(r, E) = \sum_{k=1}^K \psi_k(r) \gamma_k(E),$$

onde $r \equiv (x)$ ou (R, Z) ou (x, y) ou $(x, y, z) \dots$, e $\psi_k(r)$ é a função amplitude de cada espectro de base $\gamma_k(E)$.

Ora, um problema multigrupo onde procuram-se NG funções de espaço (fluxo ao nível de cada grupo) reduz-se em geral ao problema de se encontrar K funções $\psi_k(r)$, sendo que K é muito menor que NG (um problema multigrupo a 25 grupos de energia reduz-se a encontrar tantas funções $\psi_k(r)$ quantos são os meios físicos disponíveis, cada um representado pelo seu espectro).

Para isso é então necessário que os K espectros de base contenham as informações sobre as outras (NG-K) funções de espaço

suprimidas se quer-se representar exatamente o fluxo multigrupo . Claro que isto é somente possível em casos particulares (caroços a uma ou duas regiões). Na prática, procura-se aproximar da melhor maneira possível o fluxo neutrônico utilizando-se espectros de base os mais realistas possíveis.

Os resultados obtidos apresentam precisões comparáveis ao cálculo referência em diferenças finitas em teoria multigrupo (desvios de alguns pcm sobre o Keff e, sobre a potência, da ordem de (0-1)% nos meios multiplicadores, (2-3)% nas interfaces caroço-cobertura e (5-10)% na vizinhança destas ao nível das coberturas).

4.4. SÍNTESE ITERATIVA POR DEFLAÇÃO EM ESPAÇO E ENERGIA EM GEOMETRIA RETANGULAR À DUAS DIMENSÕES E A 25 GRUPOS DE ENERGIA.

Esta parte é consagrada à programação e à análise numérica do método de síntese iterativa por deflação em espaço e energia com espectros por meio físico em geometria XY e a 25 grupos. Procura - se aproximar o fluxo neutrônico por:

$$\tilde{\phi}(x,y,E) = \sum_{\kappa=1}^K \alpha_{\kappa}(y) \psi_{\kappa}(x) \gamma_{\kappa}(E),$$

onde $\gamma_{\kappa}(E)$ são espectros de base conhecidos e calculados por diferenças finitas em teoria multigrupo à uma dimensão. As funções de espaço $\alpha_{\kappa}(y)$, $\psi_{\kappa}(x)$ são obtidas iterativamente e por deflação, como no caso monocinético.

Os critérios de otimização adotados para este novo método são a minimização da memória de computador da síntese iterativa por deflação e a possibilidade de discretizar a variável energia segundo a necessidade (a memória e o tempo de cálculo variam muito pouco com o número de grupos ao contrário de um cálculo em teoria multigrupo), o que pode aumentar a precisão de cálculo.

5. RESULTADOS

5.1. MODELOS DE VALIDAÇÃO

Em primeiro lugar calcula-se um sistema caroço-cobertura. Para isso efetua-se um cálculo de diferenças finitas a uma dimensão e a 25 grupos de energia. Os espectros de base, praticamente muito próximos dos espectros médios nos meios considerados, são tomados no centro do caroço e no centro da cobertura (Fig. 3). Em seguida, as funções de espaço são obtidas pela construção de uma função de ponderação descontínua na interface (método dos resíduos ponderados por taxas de reação) de modo a minimizar os desvios (relativamente ao método referência de diferenças finitas) sobre quantidades integrais e locais pela utilização de cada espectro de base.

Depois calcula-se a secção direita principal do caroço em conceito heterogêneo considerado anteriormente. Este modelo apresenta interfaces construídas em forma de escada o que aumenta bastante o número de irregularidades relativamente ao primeiro modelo. Esta escolha é feita para tornar sistemático o cálculo de espectros de base em casos realistas. Para isso, fazem-se cálculos em diferenças finitas utilizando-se cotas escolhidas segundo critérios definidos a priori. (Fig. 4). Enfim, as funções de espaço são obtidas pela generalização da função de ponderação descontínua empregada no modelo anterior.

5.2. QUALIFICAÇÃO DO MÉTODO

A comparação com o método referência de diferenças finitas em teoria multigrupo mostra uma excelente precisão no cálculo do autovvalor (desvio de 2 a 20 pcm) (Fig.5 e 6) e de valores locais de taxas de reação que variam lentamente a partir das interfaces caroço-cobertura, em especial as capturas (desvios de (0-3)%). Por outro lado, para aquelas que variam fortemente quando passamos de um meio a outro, seja por exemplo a fissão U-238 característica das

altas energias, o método apresenta desvios importantes e de sinal contrário em cada metade das coberturas. Isto indica uma compensação de uma parte e de outra dos pontos de realização dos espectros de base nos centros das coberturas, onde os desvios são nulos, para dar bons valores integrais, como por exemplo o autovalor .(Keff) .

Sobre o plano de informática, o novo método de síntese requer memória e tempo de cálculo nitidamente inferiores ao método de referência (fatores 6 e 3 respectivamente), (Tabela II).

6. POSIÇÃO RELATIVAMENTE AO MÉTODO DE SÍNTESE KAPLAN E CONCLUSÕES

Relativamente ao método de síntese Kaplan em geometria XYZ , se bem que a comparação não seja estritamente possível no quadro desse trabalho, realizado em geometria XY, pode-se ainda posicionar a síntese iterativa por deflação em espaço e energia tendo em vista uma generalização.

Do ponto de vista de precisão de cálculo, pode-se prever à partir do estudo anteriormente apresentado, que o método de síntese calcule melhor o autovalor assim como outros valores integrais e, no conjunto, os valores locais de taxas de reação que variam lentamente a partir das interfaces, isto é , de de comportamento médio. Por outro lado, para as taxas de reação que variam fortemente nesses locais, o método de síntese Kaplan deve ser mais preciso no sentido radial, pois as funções à duas dimensões em XY são calculadas em diferenças finitas e a solução à três dimensões altera pouco esse cálculo. Porém, no sentido axial , a precisão da síntese iterativa por deflação em espaço e energia pode ser superior graças a uma maior liberdade na escolha das funções de base (espectros) e ao processo iterativo sobre as funções de espaço a elas ligadas.

Sobre o plano de informática, pode-se prever uma síntese iterativa por deflação em espaço e energia muito menos dispendiosa ,

TABELA I
COMPARAÇÃO SÍNTESE ITERATIVA POR DEFLAÇÃO - ELEMENTOS FINITOS, EVO-
LUÇÃO DO AUTOVALOR, TEMPO DE CÁLCULO E MEMÓRIA DE COMPUTADOR SOB O
EFEITO DE MALHA E DA APROXIMAÇÃO DO FLUXO

APROXIMAÇÃO			MALHA			DESVIO DO AUTOVALOR (pcm)	TEMPO DE CÁLCULO (s)	MEMÓ- RIA (K)
X	Y	Z	X	Y	Z			
ELEMENTOS FINITOS								
Parabólica	Parabólica	linear	16	16	9	-576	75	700
"	"	"	"	"	17	-163	162	1020
Parabólica	Parabólica	Parabólica	"	"	9	-49	178	650
"	"	"	"	"	17	—*	360	1200
SÍNTESE ITERATIVA POR DEFLAÇÃO								
13	13	5	31	31	17	-594	180	255
12	12	5	"	"	45	-324	235	260
14	14	6	"	"	65	-245	355	265
9	9	3	58	58	"	-125	338	265
13	13	4	77	77	"	-111	956	290

*Referência= 0.89882

TABELA II
COMPARAÇÃO AO NÍVEL DE INFORMÁTICA DO MÉTODO DE SÍNTESE ITERATIVA
POR DEFLAÇÃO EM ESPAÇO E ENERGIA COM O MÉTODO DE DIFERENÇAS
FINITAS EM TEORIA MULTIGRUPO

MÉTODO	MALHA XY	Nº DE GRUPOS	MEMÓRIA (K)	TEMPO DE CÁLCULO (s)	CUSTO (Cfs)
CAROÇO R1/ COBERTURA UO ₂ Na					
Diferenças Finitas	41x41	25	900	300	18000
Síntese	"	"	150	42	2250
CAROÇO R3 EM CONCEITO HETEROGÊNEO					
Diferenças Finitas	96x96	25	1412	1800	76500
Síntese	"	"	228	660	14190

porque os cálculos das funções de base à duas dimensões e a 25 grupos de energia são já bem caros, em memória de computador e tempo de cálculo, para a síntese Kaplan.

Considerando-se que as taxas de reação às altas energias nas coberturas tem uma importância limitada, pode-se concluir que o método de síntese iterativa por deflação em espaço e energia é competitivo para os cálculos à 3 dimensões e a 25 grupos de energia, em particular para estudos paramétricos, porque sobre o plano de informática ele apresenta nítidas vantagens quando comparado aos métodos que utilizam a teoria multigrupo.

7. OBSERVAÇÃO FINAL

Para maiores detalhes veja-se "Etude de la Méthode de Synthèse Itérative par Déflation dans la Résolution de L'equation de Diffusion Appliquée aux Calculs des Réacteurs a Neutrons Rapides" - Thèse - U.S.M.G. - Paulo Gomes dos Reis (80).

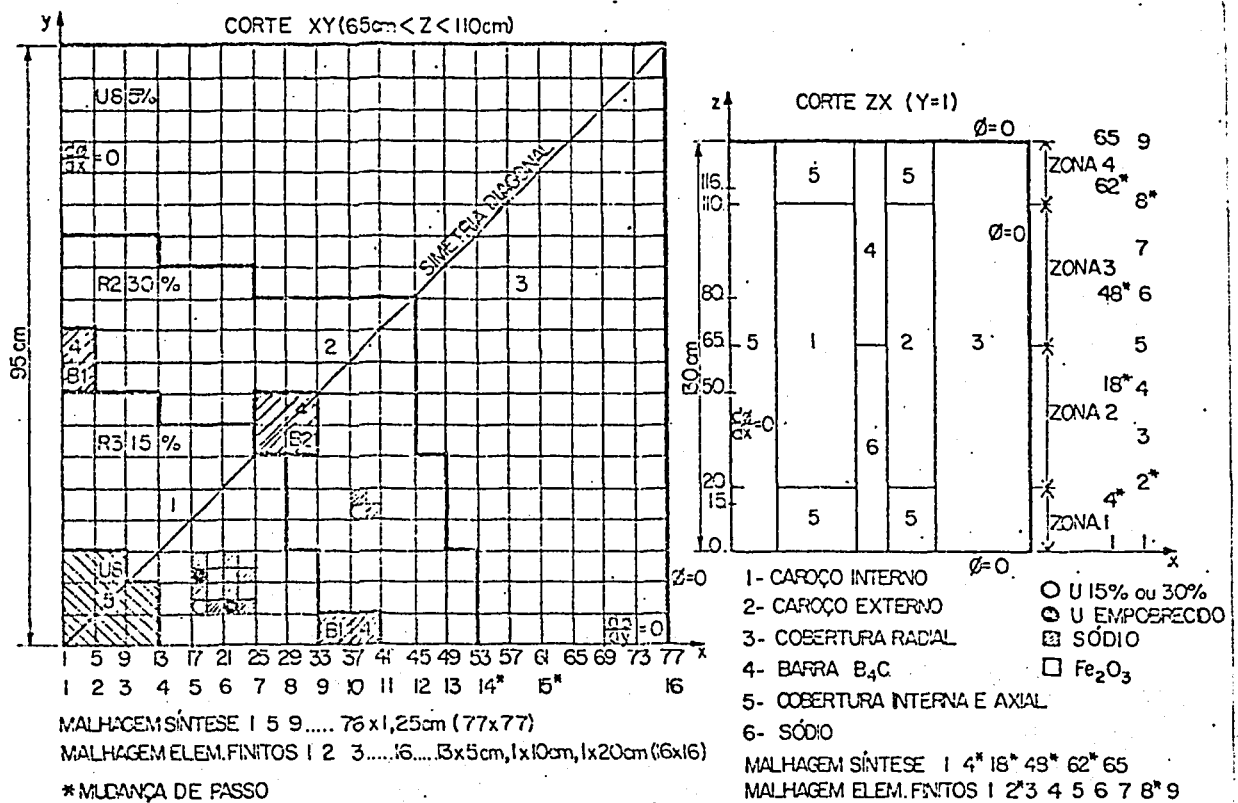


FIG. 1 - "CAROÇO 3" CONCEITO HETEROGÊNEO EM GEOMETRIA XYZ

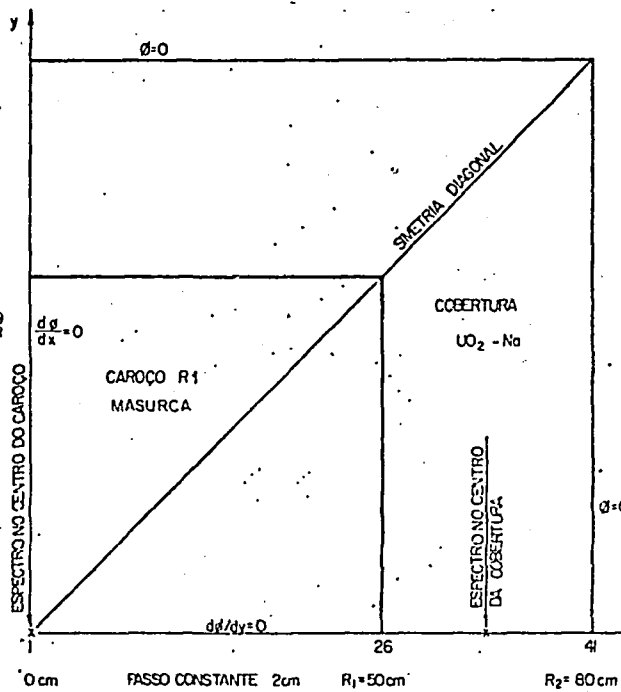
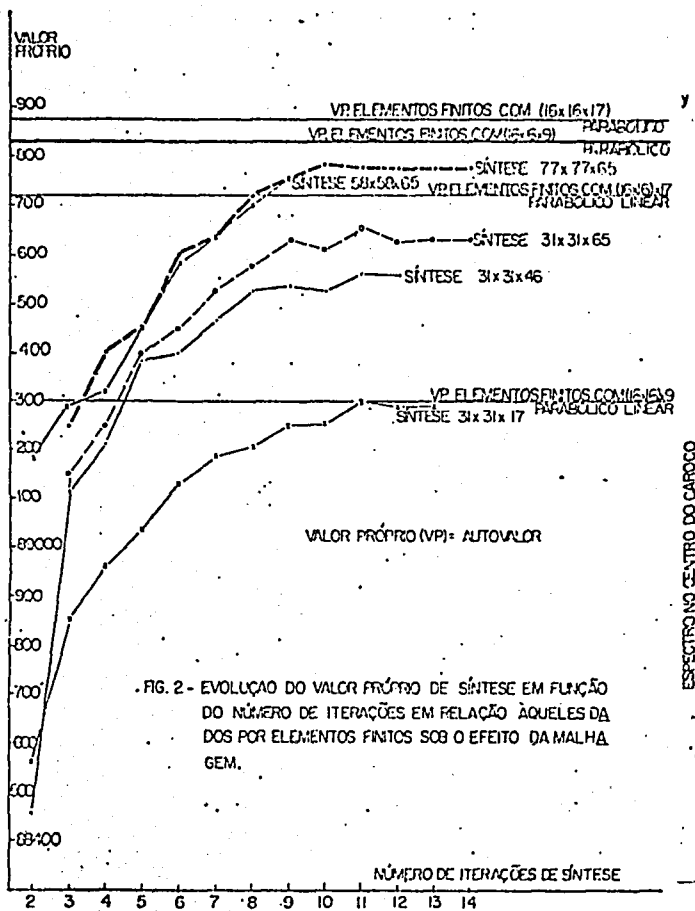


FIG. 3 - SISTEMA CAROÇO R1 - COBERTURA $UO_2 - Na$ EM GEOMETRIA XY.

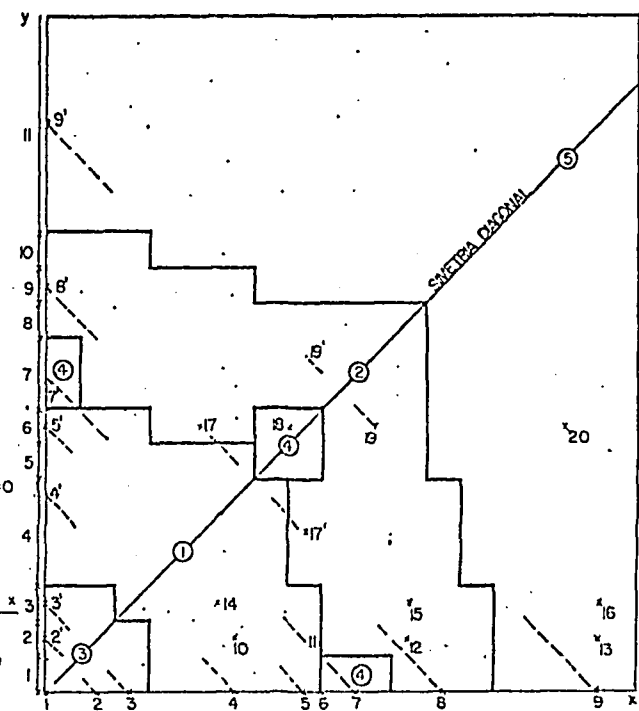


FIG. 4 - POSIÇÕES DE 20 ESPECTROS CALCULADOS À UMA DIMENSÃO E CANDIDATOS A ESPECTROS DE BASE (CAROÇO-3 HETEROGÊNEO).

