

CNEN/SP

ipen Instituto de Pesquisas
Energéticas e Nucleares

ACELERAÇÃO DO PROGRAMA NODAL FERM

Horácio Nakata

PUBLICAÇÃO IPEN 72

SETEMBRO/1985

SÃO PAULO

ISSN 0101-3084

PUBLICAÇÃO IPEN 72

SETEMBRO/1985

ACELERAÇÃO DO PROGRAMA NODAL FERM

Horácio Nakata

DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE REATORES

**CNEN/SP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SÃO PAULO -- BRASIL**

Série PUBLICAÇÃO IPEN

INIS Categories and Descriptors

F51.00

COMPUTER CALCULATIONS
FINITE ELEMENT METHOD

ACELERAÇÃO DO PROGRAMA NODAL FERM

Horácio Nakata

RESUMO

Foram testados três métodos de aceleração para tentar diminuir o número de iterações externas do programa nodal FERM.

Os resultados obtidos indicaram que o método de aceleração por Polinômios de Chebyshev de ordem variável resultam em economia de até 50% no tempo computacional. Por outro lado o método de aceleração por Extrapolação Assintótica da Fonte ou por Rebalanceamento Zonal não resultaram em economia de tempo computacional global, embora alguma aceleração fosse verificada no número de iterações externas.

ACCELERATION OF THE NODAL PROGRAM FERM

ABSTRACT

Acceleration of the nodal program FERM was tried by using three acceleration schemes. Results of the calculations showed the best acceleration with the Tchebyshev method where the savings in the computing time were of the order of 50%. Acceleration with the Asymptotic Source Extrapolation Method and with the Coarse-Mesh Rebalancing Method did not result in any improvement on the global computational time, although a reduction in the number of outer iterations was observed.

1 – INTRODUÇÃO

O programa FERM ("Finite Element Response Matrix")⁽⁴⁾ foi desenvolvido com o objetivo de se obter a distribuição de potência em reatores nucleares com razoável precisão e tempo computacional relativamente curto quando comparado com os programas convencionais de diferenças finitas.

Comprovou-se que a utilização da técnica de elementos finitos dentro do princípio de matriz resposta fornece resultados satisfatórios com erro máximo na potência média do elemento de combustível da ordem de 2% em reatores pressurizados moderados por água leve⁽⁴⁾.

Para se obter tempo computacional bastante reduzido comparado com os programas convencionais foram testadas algumas das técnicas de aceleração conhecidas na literatura com devidas adaptações para o programa FERM:

- Aceleração por Polinômios de Chebyshev;
- Aceleração por Extrapolação Assintótica da Fonte;
- Aceleração por Rebalanceamento Zonal.

Nos parágrafos seguintes são descritos os métodos utilizados no programa FERM e os resultados obtidos.

2 - DESCRIÇÃO DO PROGRAMA FERM

A equação resolvida pelo programa FERM pode ser escrita em forma matricial como:

$$\text{(Equação 1)} \quad \underline{J}^* = \underline{R}^j \cdot \underline{H} \cdot \underline{J}^* + \underline{R}^s \cdot \underline{S}$$

$$\text{(Equação 2)} \quad \underline{\phi} = \underline{M}^j \cdot \underline{H} \cdot \underline{J}^* + \underline{M}^s \cdot \underline{S}$$

onde \underline{J}^* é o vetor das correntes parciais emergentes;

$\underline{\phi}$ é o vetor dos fluxos escalares;

\underline{S} é o vetor das fontes internas;

\underline{R}^j é a matriz resposta para as correntes incidentes;

\underline{R}^s é a matriz resposta para as fontes;

\underline{M}^j e \underline{M}^s são matrizes associadas a \underline{R}^j e \underline{R}^s para a reprodução do fluxo escalar; e

\underline{H} é a matriz de acoplamento entre as malhas grossas.

O problema apresentado acima pode ser, teoricamente, resolvido por inversão direta de $(\underline{I} - \underline{R}^j \cdot \underline{H})$, porém em casos práticos a dimensão e a complexidade da matriz $\underline{R}^j \cdot \underline{H}$ tornam inviável tal método de solução fazendo-se necessária portanto a solução iterativa cujo algoritmo é apresentado abaixo:

1º PASSO: estimar $\underline{J}^{-(0)}$ e $\underline{S}^{(0)}$

$$\left. \begin{array}{l} 2^\circ \text{ PASSO: } \underline{J}^{+(i)} = \underline{R}^j \cdot \underline{J}^{-(i-1)} + \underline{R}^s \cdot \underline{S}^{(t-1)} \\ 3^\circ \text{ PASSO: } \underline{J}^{-(i)} = \underline{H} \cdot \underline{J}^{+(i)} \end{array} \right\} i = 1, 2, \dots$$

$$4^\circ \text{ PASSO: } \underline{\phi}^{(t)} = \underline{M}^j \cdot \underline{J}^{-(i)} + \underline{M}^s \cdot \underline{S}^{(t-1)}$$

5º PASSO: ajuste de $\underline{S}^{(t)}$ a partir de $\underline{\phi}^{(t)}$

onde

o índice i representa o estágio da iteração interna e o índice t o estágio da iteração externa.

A formulação do programa FERM em dois grupos de energia, grupo rápido e térmico, respectivamente, grupo 1 e grupo 2, no cálculo de fator de multiplicação efetivo descrito pelas Equações 1 e 2 pode ser sucintamente descrita por sistema de equações:

$$\begin{aligned} \text{(Equação 3.a)} & \left\{ \begin{array}{l} \underline{\phi}^1 = \underline{K}_1 \cdot \underline{S}^1 \\ \underline{\phi}^2 = \underline{K}_2 \cdot \underline{S}^2 \end{array} \right. \\ \text{(Equação 3.b)} & \end{aligned}$$

$$\text{onde } \underline{K}_g = \left[\underline{M}_g^j \cdot (\underline{I} - \underline{R}_g^j) \cdot \underline{H}_g \right]^{-1} \cdot \underline{R}_g^s + \underline{M}_g^s, \quad g = 1, 2;$$

$$\underline{S}^1 = \frac{1}{k_{ef}} \left[\underline{F}_1 \cdot \underline{\phi}^1 + \underline{F}_2 \cdot \underline{\phi}^2 \right]$$

$$\underline{S}^2 = \underline{T}_{21} \cdot \underline{\phi}^1$$

\underline{F}_g , $g = 1, 2$, é a matriz de fissão rápida e térmica, respectivamente;

\underline{T}_{21} é a matriz de transferência de grupo.

Definindo

$$\text{(Equação 4)} \quad \underline{Y} = \underline{F}_1 \cdot \underline{\phi}^1 + \underline{F}_2 \cdot \underline{\phi}^2$$

as Equações 3.a e 3.b tornam-se

$$\text{(Equação 5)} \quad \underline{\phi}^1 = \frac{1}{k_{ef}} \underline{K}_1 \cdot \underline{Y}$$

$$\text{(Equação 6)} \quad \underline{\phi}^2 = \frac{1}{k_{ef}} \underline{K}_2 \cdot \underline{T}_{21} \cdot \underline{K}_1 \cdot \underline{Y}$$

e introduzindo as Equações 5 e 6 na Equação 4 tem-se

$$\text{(Equação 7)} \quad \underline{Y} = \frac{1}{k_{ef}} \underline{K} \cdot \underline{Y}$$

onde

$$\underline{K} = \underline{F}_1 \cdot \underline{K}_1 + \underline{F}_2 \cdot \underline{K}_2 \cdot \underline{T}_{21} \cdot \underline{K}_1$$

Portanto as iterações podem ser sucintamente escritas como

$$\underline{Y}^{(t)} = \frac{1}{k_{ef}} \underline{K} \cdot \underline{Y}^{(t-1)}, \quad t = 1, 2, 3, \dots$$

3 – EXTRAPOLAÇÃO ASSINTÓTICA DA FONTE

O método de Extrapolação Assintótica da Fonte⁽⁶⁾ baseia-se na hipótese de que algumas iterações externas já tem sido efetuadas e que $\underline{Y}^{(t)}$ seja composta de harmónica fundamental predominantemente.

Assume-se também que $k_0 > k_1 \geq k_2 \geq \dots \geq k_{N-1} > 0$, onde k_i é o autovalor de \underline{K} .

$$\underline{K} \cdot \underline{\psi}_i = k_i \underline{\psi}_i$$

4

e

$\underline{\psi}_i$, $i = 0, 1, \dots, N-1$, são autofunções correspondentes.

Para as equações de diferenças finitas essa hipótese é provada válida⁽⁵⁾ mas para o método adotado no programa FERM torna-se necessário assumi-la válida por que a prova não é disponível. A positividade de \underline{K}_1 e \underline{K}_2 também deverá ser assumida válida por impossibilidade de prová-la, uma vez que os elementos de \underline{R}_i^j não são estritamente positivos.

Expandindo

$$Y^{(0)} = \sum_{i=0}^{N-1} a_i \underline{\psi}_i$$

e assumindo que a convergência tem sido suficiente para eliminar as harmônicas de ordens superiores, i.é., $k_{ef} \cong k_0$, teremos para a iteração t ,

$$\underline{Y}^{(t)} = \underline{\psi}_0 + a_1 (k$$

$$\text{(Equação 8)} \quad \underline{Y}^{(t)} = \underline{Y}^{(\infty)} + \underline{Y}^1 \sigma^t$$

onde

$\sigma = \lambda_1/k_0$ é a razão de dominância, e

$\underline{Y}^{(\infty)}$ é o modo fundamental a ser determinado.

O autovetor \underline{Y}^1 pode ser estimado por dois estágios sucessivos de iterações externas como

$$\underline{Y}^1 = (\underline{Y}^{(t)} - \underline{Y}^{(t-1)}) / [\sigma^{(t-1)} (\sigma - 1)]$$

tal que a estimativa do modo fundamental é dada por

$$\underline{Y}^{(\infty)} = \underline{Y}^{(t)} + \frac{\bar{\sigma}}{1-\bar{\sigma}} (\underline{Y}^{(t)} - \underline{Y}^{(t-1)}),$$

onde $\bar{\sigma}$ é a estimativa da razão de dominância obtida por verificação do decaimento do erro conforme descrito na referência⁽⁶⁾.

4 - ACELERAÇÃO POR POLINÔMIOS DE CHEBYSHEV

Uma formulação conveniente do método utilizado no programa FERM para a aplicação da técnica de Aceleração por Polinômios de Chebyshev pode ser obtida escrevendo as Equações 3.a e 3.b como

$$\text{(Equação 9)} \quad \begin{bmatrix} \underline{1} & \underline{0} \\ -\underline{K}_2 \cdot \underline{T}_{21} & \underline{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \underline{\phi}^1 \\ \underline{\phi}^2 \end{bmatrix} = \frac{1}{k_{ef}} \begin{bmatrix} \underline{K}_1 \cdot \underline{F}_1 & \underline{K}_1 \cdot \underline{F}_2 \\ \underline{0} & \underline{0} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \underline{\phi}^1 \\ \underline{\phi}^2 \end{bmatrix}$$

ou sucintamente

$$\text{(Equação 10)} \quad \underline{\phi}^{12} = \frac{1}{k_{ef}} \underline{P} \cdot \underline{\phi}^{12}$$

onde

$$\underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{I}} & \underline{\underline{O}} \\ -\underline{\underline{K}}_2 \cdot \underline{\underline{T}}_{21} & \underline{\underline{I}} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}_1 \cdot \underline{\underline{F}}_1 & \underline{\underline{K}}_1 \cdot \underline{\underline{F}}_2 \\ \underline{\underline{O}} & \underline{\underline{O}} \end{bmatrix}; \quad \underline{\underline{\phi}}^{12} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\phi}}^1 \\ \underline{\underline{\phi}}^2 \end{bmatrix}$$

e assume-se que a inversa exista.

Logo as iterações externas podem ser expressas pelo método da potência⁽³⁾ em forma de

$$\underline{\underline{\phi}}^{12}(t) = \frac{1}{k_{ef}} (t-1) \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{\phi}}^{12}(t-1), \quad t = 1, 2, 3, \dots$$

Os autovalores de $\underline{\underline{P}}$ são assumidos $k_1 > k_2 \geq \dots \geq k_N > 0$, e as correspondentes autofunções $\underline{\underline{X}}_i$, $i = 1, 2, \dots, N$, isto é,

$$\underline{\underline{P}} \underline{\underline{X}}_i = k_i \underline{\underline{X}}_i$$

Assume-se que as iterações externas tenham convergido suficientemente tal que $k_{ef} \cong k_1$ após t iterações

O método de Polinômios de Chebyshev conforme demonstrado por Hageman e Pfeifer⁽²⁾ pode ser deduzido escolhendo-se uma solução acelerada como combinação linear de autovetores iterados $\underline{\underline{\phi}}^{12}(t)$ tal que

$$\text{(Equação 11)} \quad \underline{\underline{\phi}}^{12}(t+p) = a_{0p} \underline{\underline{\phi}}^{12}(t) + a_{1p} \underline{\underline{\phi}}^{12}(t+1) + \dots + a_{pp} \underline{\underline{\phi}}^{12}(t+p)$$

$$\text{Expandindo } \underline{\underline{\phi}}^{12}(t) = \sum_{i=1}^N c_i \underline{\underline{X}}_i,$$

normalizado de modo que $c_1 = 1$, a Equação 1 torna-se

$$\text{(Equação 12)} \quad \underline{\underline{\phi}}^{12}(t+p) = \sum_{i=1}^N c_i \sum_{j=0}^p a_{jp} \left(\frac{k_i}{k_1}\right)^j \underline{\underline{X}}_i,$$

$$\text{e se definirmos } P_p(y) = \sum_{j=0}^p a_{jp} y^j$$

a Equação 12 torna-se

$$\text{(Equação 13)} \quad \underline{\underline{\phi}}^{12}(t+p) = P_p(1) \underline{\underline{X}}_1 + \sum_{i=2}^N c_i P_p\left(\frac{k_i}{k_1}\right) \underline{\underline{X}}_i$$

A solução acelerada é obtida escolhendo $P_p(y)$ de modo que $P_p(1) = 1$ e $\max_{0 \leq y \leq \sigma} |P_p(y)|$ seja minimizado, que é a clássica propriedade MINIMAX de Chebyshev.

Os polinômios $P_p(y)$ são portanto os polinômios de Chebyshev expressos como

$$P_p(y) = C_p\left(\frac{2y}{\sigma} - 1\right) / C_p\left(\frac{2}{\sigma} - 1\right)$$

onde

$$C_p(\gamma) = \begin{cases} \cosh(p \cosh^{-1} \gamma), & \gamma \geq 1 \\ \cos(p \cos^{-1} \gamma), & -1 \leq \gamma \leq 1. \end{cases}$$

Utilizando a relação de recorrência para os polinômios de Chebyshev, o esquema de aceleração pode ser dado por seguinte algoritmo:

$$\begin{aligned} \underline{\phi}^{12}(t+p) &= \frac{1}{k_{ef}(t+p-1)} \underline{P} \cdot \dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-1), \\ \dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p) &= \dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-1) + \alpha_p [\underline{\phi}^{12}(t+p) - \dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-1)] + \\ \beta_p [\dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-1) - \dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-2)] \quad k_{ef}(t+p) &= k_{ef}(t+p-1) \frac{|\dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p)|}{|\dot{\underline{\phi}}^{12}(t+p-1)|}, \\ p &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

onde

$$\alpha_1 = 2/(2 - \bar{\sigma}), \quad \beta_1 = 0,$$

$$\alpha_p = \frac{4}{\bar{\sigma}} \left\{ \frac{\cosh\{(p-1)\gamma\}}{\cosh(p\gamma)} \right\}$$

$$\beta_p = (1 - \bar{\sigma}/2) \alpha_p - 1$$

$$\gamma = \cosh^{-1}(2/\bar{\sigma} - 1)$$

$\bar{\sigma}$ é a razão de dominância obtida através do decaimento do erro

$$\bar{\sigma} = \lim \left\{ \frac{\underline{E}^T(t) \cdot \underline{E}(t)}{\underline{E}^T(t-1) \cdot \underline{E}(t)} \right\}^{1/2}$$

onde

$$\underline{E}(t) = \underline{\phi}^{12}(t) - \underline{\phi}^{12}(t-1)$$

5 - ACELERAÇÃO POR REBALANCEAMENTO ZONAL

O esquema de Aceleração por Rebalanceamento Zonal⁽¹⁾ pode ser melhor explicado considerando-se a equação em um grupo de energia em um problema de autovalor:

$$\text{(Equação 14)} \quad \underline{A} \underline{\phi} = \frac{1}{k_{ef}} \underline{F} \underline{\phi}$$

onde \underline{A} é a matriz dos coeficientes do operador de difusão;

\underline{F} é a matriz dos coeficientes de fonte de neutrons.

Escolhe-se um particionamento adequado das zonas em K subdomínios:

$$\underline{\phi}_k = \underline{P}_k \underline{\phi} \quad , \quad k = 1, \dots, K,$$

onde

\underline{P}_k é a matriz permutação apropriada,

e considerando-se que os novos fluxos rebalanceados podem ser expandidos em $\underline{\phi}_k$, temos

$$\underline{\bar{\phi}} = \sum_{k=1}^N f_k \underline{\phi}_k$$

ou seja,

$$\text{(Equação 15)} \quad \underline{\bar{\phi}} = \sum_{k=1}^N f_k \underline{P}_k \underline{\phi} \quad ,$$

onde f_k são os coeficientes a serem determinados.

Inserindo a Equação 15 na Equação 14 pode-se definir um resíduo R ,

$$\text{(Equação 16)} \quad R = \underline{A} \underline{\bar{\phi}} - \frac{1}{k_{ef}} \underline{F} \underline{\bar{\phi}}$$

A Equação 16 acima é resolvida pelo método de resíduos ponderados escolhendo-se as funções de ponderação w_ℓ , $\ell = 1, \dots, K$, definidas como

$$w_\ell = \begin{cases} 1 & \text{dentro do volume } \ell \\ 0 & \text{fora do volume } \ell \end{cases}$$

e integrando sobre todo o volume do núcleo obtém-se

$$\text{(Equação 17)} \quad \langle w_\ell, R \rangle = 0 \quad , \quad \ell = 1, \dots, K$$

O particionamento do núcleo foi convenientemente escolhido como coincidente com cada elemento de combustível no programa FERM.

6 – RESULTADOS OBTIDOS

Os cálculos efetuados com o método de aceleração por Extrapolação Assintótica da Fonte não produziu resultados muito animadores no cálculo do reator de referência⁽⁴⁾, o 2D-IAEA. Na Figura 1 é apresentado um exemplo e verifica-se que não há economia no número de iterações externas.

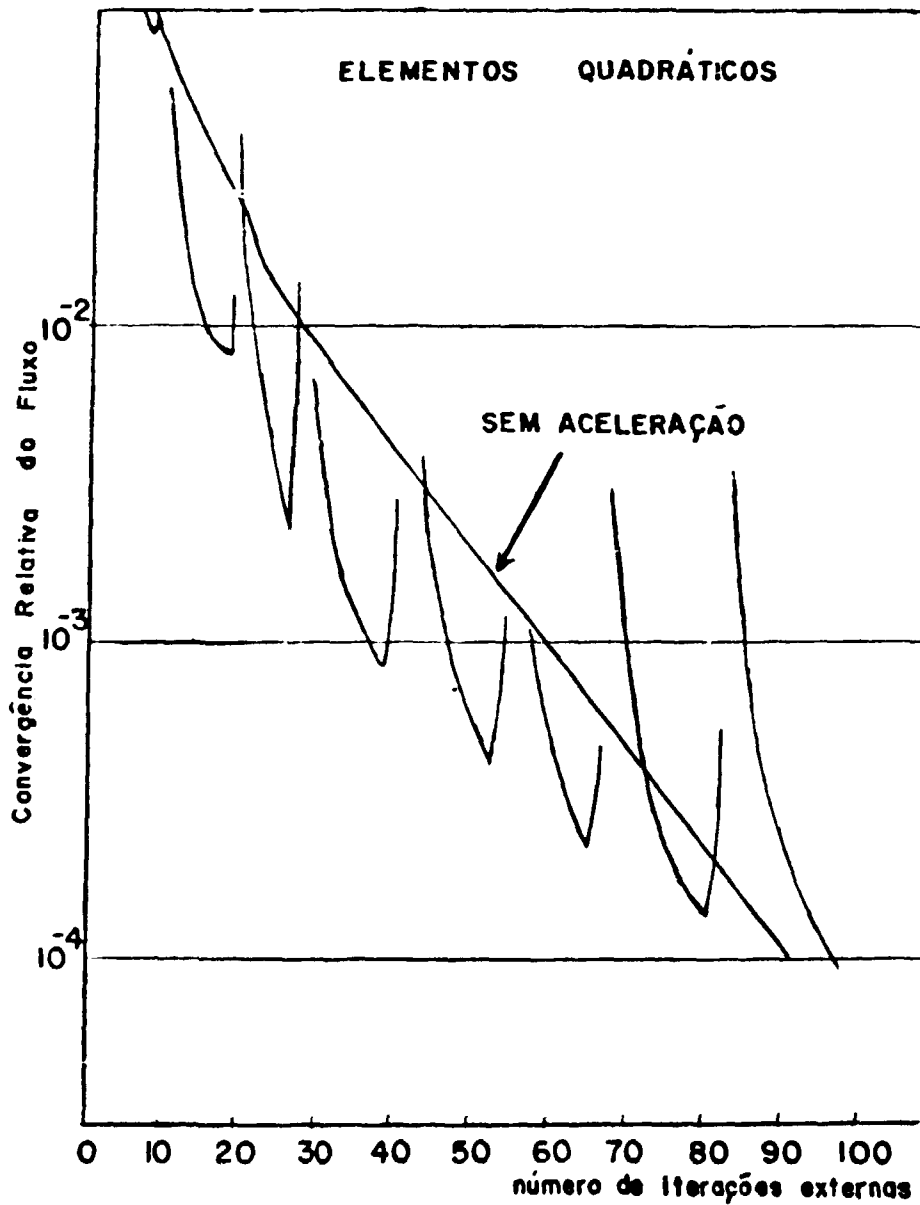
Na Figura 2 é apresentado um exemplo do mesmo reator calculado com o programa FERM acelerado com o esquema de Rebalanceamento Zonal e nota-se também que o número de iterações externas não é diminuído com este método.

Resultados melhores foram obtidos com o cálculo efetuado acelerando o programa FERM com o esquema de aceleração por Polinômios de Chebyshev e verifica-se que efetivamente o número de iterações externas foi reduzido por fator aproximado de dois, resultando em economia substancial de tempo computacional.

7 - CONCLUSÃO

O esquema de aceleração mais apropriado para o programa FERM é o da Aceleração por Polinômios de Chebyshev de ordem variável obtendo-se economia no número de iterações externas resultando em redução no tempo computacional aproximadamente em 50%.

Os esquemas de aceleração por Extrapolação Assintótica da Fonte e por Rebalanceamento Zonal não se mostraram efetivos no processo de aceleração do programa FERM.



Figur. 1 - Comparação entre o programa FERM sem aceleração com o programa FERM acelerado pelo esquema de Extrapolação Assintótica da Fonte.

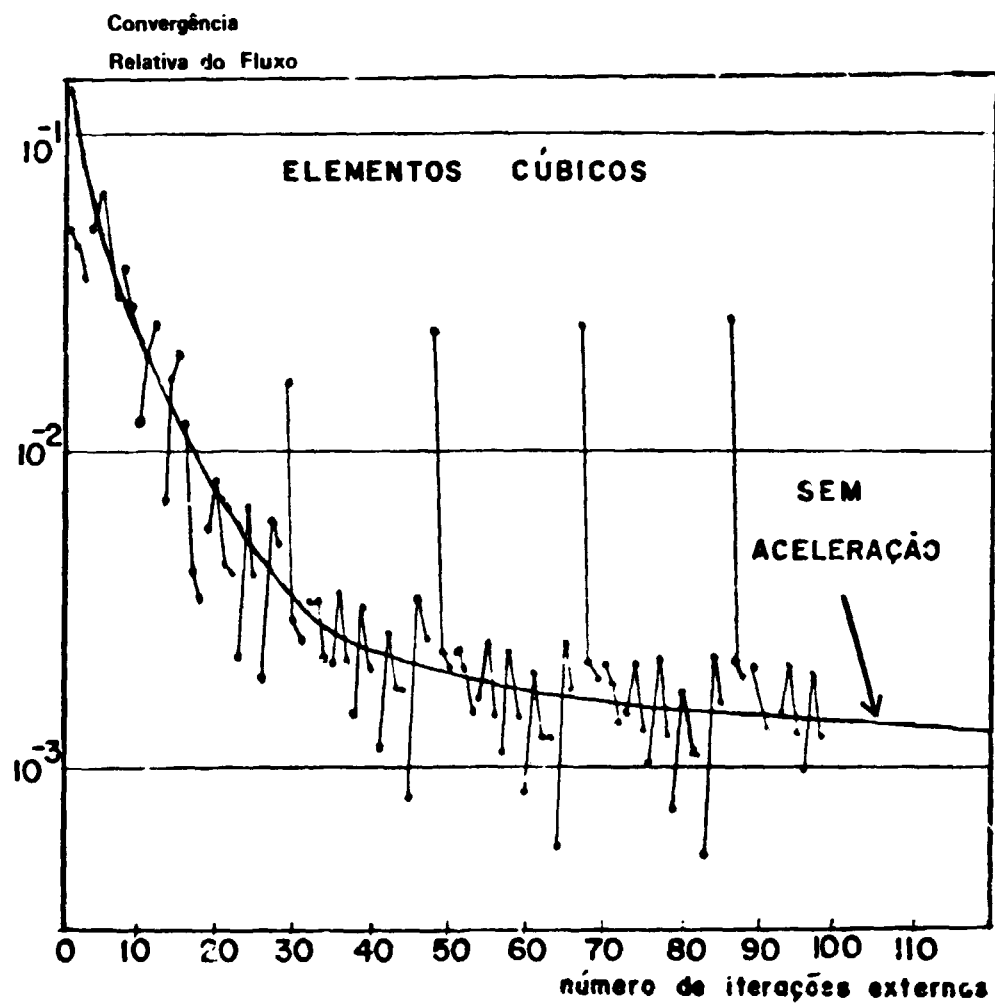


Figura 2 - Comparação entre o programa FERM sem aceleração com o programa FERM acelerado pelo esquema de Relanceamento Zonal.

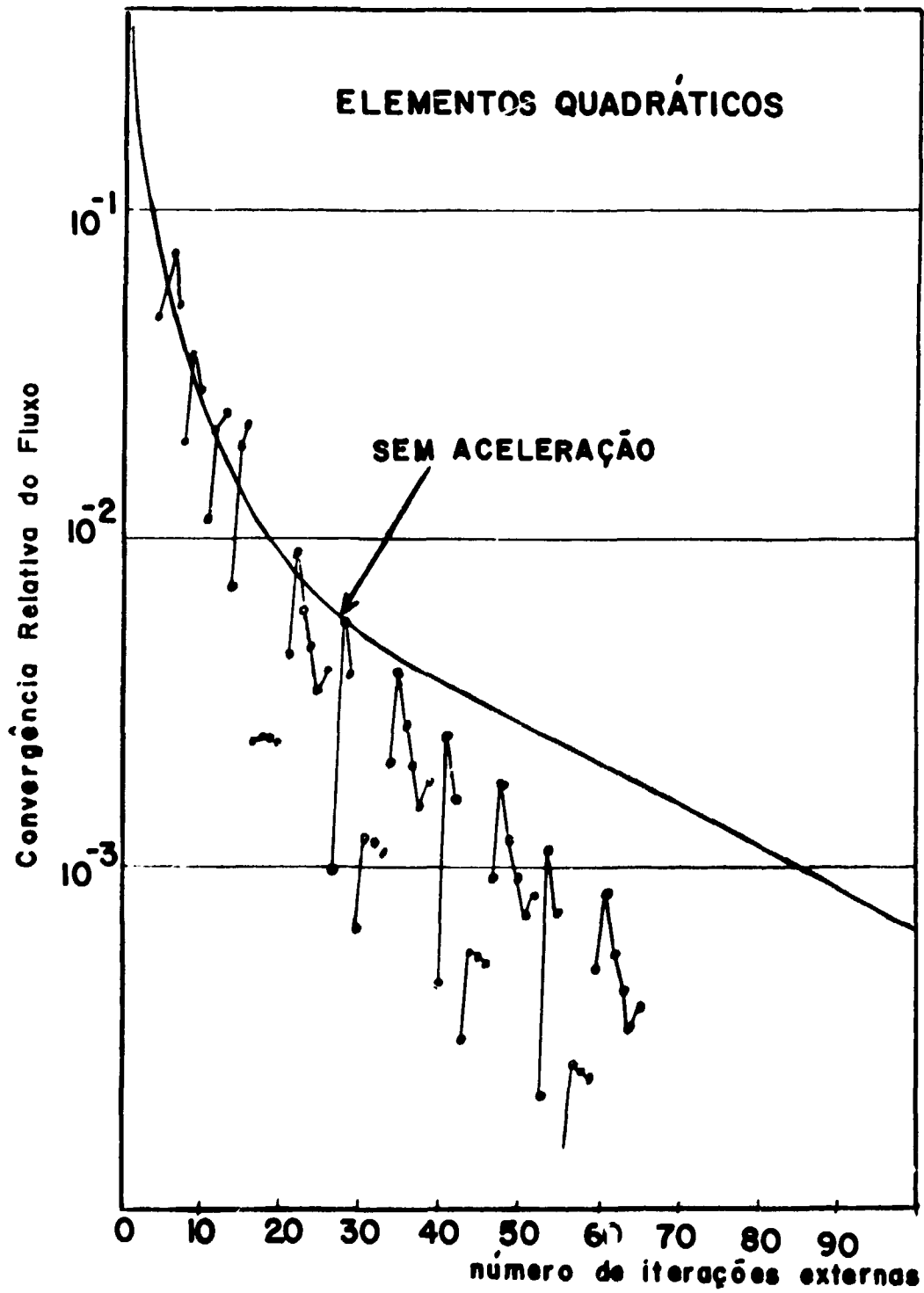


Figura 3 - Comparação entre o programa FERM sem aceleração com o programa FERM acelerado com Polinômios de Chebyshev.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. FROELICH, R. *A theoretical foundation for coarse mesh variational techniques*. San Diego, Calif., Gulf General Atomic, 1967. (GA-7870).
2. HAGEMAN, L. A. & PFEIFER, C. J. *The utilization of the neutron diffusion program PDQ-5*. Pittsburgh, Pa., Bettis Atomic Power Lab., 1965. (WAPD-TM-395).
3. NAKAMURA, S. *Computational methods in engineering and science*. New York, N. Y., John Wiley, 1977.
4. NAKATA, H. & MARTIN, W. R. The finite element response matrix method. *Nucl. Sci. Eng.*, 85:289-305, 1983.
5. WACHSPRESS, E. L. *Iterative solution of elliptic systems*. New Jersey, Prentice-Hall, 1966.
6. WAGNER, M. R. *GAUGE – A two-dimensional few group neutron diffusion triangular mesh*. San Diego, Calif., Gulf Atomic General Atomic, 1968. (GA-8307).