

**ACELERAÇÃO DE CHEBYSHEV NO CÁLCULO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS
SUPERIORES DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO**

Antonio Belchior Jr.
João M. L. Moreira
Coordenadoria para Projetos Especiais - COPESP
Av. Lineu Prestes, 2242 - Caixa Postal 66113
05389-970 - São Paulo - SP

RESUMO

Este trabalho apresenta a implementação da aceleração de convergência baseada nos polinômios de Chebyshev em uma versão do código CITATION modificada para a obtenção de harmônicos estáticos de ordem superior da equação de difusão. Os resultados obtidos para o reator ANGRA I antes e após a implementação da aceleração de convergência são comparados. Verifica-se que a aceleração implementada reduziu em mais de 50% o número de iterações necessárias para convergir o mesmo problema sem a aceleração.

INTRODUÇÃO

No início do desenvolvimento da Tecnologia de Reatores Nucleares, devido à ausência de computadores, dava-se grande importância aos cálculos analíticos. Grande parte dos cálculos realizados utilizava teoria de perturbação e expansão em auto-funções. Com o desenvolvimento dos computadores, o processamento numérico ganhou importância e o uso de teoria de perturbação e expansão em auto-funções ficou restrito a problemas que demandam grande tempo computacional ou necessitam de processamento em tempo real.

Na COPESP encontra-se em desenvolvimento um sistema de mapeamento em tempo real da distribuição de potência nuclear pela interpolação dos sinais de detectores SPND. Este mapeamento deverá utilizar harmônicos estáticos calculados para um estado de referência do reator.

Harmônicos estáticos bidimensionais haviam sido obtidos [1], com uma versão previamente modificada do código CITATION [2], utilizando um método de correção na fonte de fissão baseado na propriedade de ortogonalidade dos harmônicos estáticos. Este método, no entanto, apresentava uma convergência muito lenta devido à ausência de um processo efetivo de aceleração de convergência. O método de extrapolação de fonte de fissão baseado nos polinômios de Chebyshev [3] é comumente utilizado para aceleração do cálculo do harmônico estático fundamental (fluxo de nêutrons).

Neste trabalho, um método de extrapolação por polinômios de Chebyshev foi aplicado para aceleração de convergência no cálculo de harmônicos estáticos de ordem superior. O método utilizado é apresentado e os resultados obtidos antes e após a implementação da aceleração de convergência são comparados.

OBTENÇÃO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS DE ORDEM SUPERIOR

O método da potência é utilizado na maioria dos programas computacionais para o cálculo do harmônico fundamental da equação de difusão. Neste caso, a escolha de um vetor inicial totalmente positivo garante que este contém um componente do harmônico fundamental. A obtenção de harmônicos de ordem superior com o método da potência é possível com a utilização de algumas técnicas, como por exemplo, a eliminação de harmônicos inferiores. Neste caso, o vetor inicial deve conter um componente do harmônico desejado e os componentes referentes aos harmônicos inferiores ao desejado devem ser eliminados. Um vetor inicializado com valores aleatórios garante que este possua componentes de um grande número de harmônicos estáticos.

Método da Potência. Considerando a equação de difusão na formulação de diferenças finitas, obtém-se o problema de autovalores na forma matricial

$$\underline{L} \underline{\phi}_m = \frac{1}{\lambda_m} \underline{\chi} \underline{F}^T \underline{\phi}_m \quad (1)$$

O método da potência é utilizado para se calcular o harmônico correspondente ao maior autovalor contido em um vetor $\underline{\phi}^{(0)}$ escolhido para iniciar o processo iterativo. Este vetor possui componentes de diversos harmônicos, sendo importante a existência de um componente referente ao harmônico que se deseja obter. O processo iterativo consiste em multiplicar sucessivamente o vetor inicial pela matriz que define o problema de autovalores dividindo o novo vetor obtido por uma estimativa do autovalor, com isto, após um número J suficientemente grande de iterações, quando já se estiver próximo da convergência, o vetor obtido será:

$$\begin{aligned} \underline{\phi}^{(J)} &= \frac{\underline{X}^J}{\prod_{i=1}^J k^{(i)}} \underline{\phi}^{(0)} = \frac{\underline{X}^J}{\prod_{i=1}^J k^{(i)}} \sum_m a_m \underline{\phi}_m = \sum_m a_m \frac{\underline{X}^J}{\prod_{i=1}^J k^{(i)}} \underline{\phi}_m \\ &= \sum_m a_m \frac{\lambda_m^J}{\prod_{i=1}^J k^{(i)}} \underline{\phi}_m \approx a_M \frac{\lambda_M^J}{\prod_{i=1}^J k^{(i)}} \underline{\phi}_M \end{aligned} \quad (2)$$

onde $\underline{X} = \underline{L}^{-1} \underline{\chi} \underline{F}^T$, $k^{(i)}$ é a estimativa do autovalor para a i -ésima iteração, a_m é o coeficiente da expansão e foi assumido que λ_M é o maior dos autovalores λ_m 's correspondente aos autovetores contidos em $\underline{\phi}^{(0)}$.

Eliminação de Harmônicos Inferiores. A representação matricial em diferenças finitas apresentada na Eq. (1) define a equação de autovalores para o cálculo de harmônicos estáticos da equação de difusão (λ -modos). O problema adjunto na forma matricial é definido como:

$$\underline{L}^T \underline{\phi}_n^\dagger = \frac{1}{\lambda_n} \underline{F}^T \underline{\chi}^T \underline{\phi}_n^\dagger \quad (3)$$

Definidos desta maneira, os harmônicos estáticos do problema adjunto obedecem a relação de ortogonalidade com os harmônicos do problema direto definido pelo produto de matrizes:

$$\langle \phi_m, \chi F^T \phi_n \rangle = (\phi_m^\dagger)^T \chi F^T \phi_n = 0, \quad m \neq n. \quad (4)$$

Definindo a fonte de fissão \underline{S} e a função importância de nêutrons \underline{I} como:

$$\underline{S} = F^T \phi \quad e \quad (5)$$

$$\underline{I} = \chi^T \phi^\dagger, \quad (6)$$

as equações de autovalores podem ser reescritas para a fonte de fissão e função importância na forma:

$$\underline{S} = \frac{1}{\lambda} \underline{Q} \underline{S} \quad e \quad (7)$$

$$\underline{I} = \frac{1}{\lambda} \underline{Q}^* \underline{I} \quad (8)$$

onde $\underline{Q} = (L)^{-1} \chi F^T$ e $\underline{Q}^* = \chi^T (L^T)^{-1} F$.

Considerando a Eq. (5) e a Eq. (6), a relação de ortogonalidade da Eq. (4) pode ser reescrita como:

$$\langle \underline{I}_m, \underline{S}_n \rangle = \underline{I}_m^T \underline{S}_n = 0, \quad m \neq n. \quad (9)$$

Baseado na completeza [4,5] do conjunto de auto-funções \underline{S}_n e \underline{I}_n , qualquer vetor $\underline{S}_n^{(0)}$ escolhido para se iniciar o processo iterativo para o cálculo do n-ésimo harmônico pode ser escrito como:

$$\underline{S}_n^{(0)} = \sum_j a_j^{(0)} \underline{S}_j. \quad (10)$$

Calculando o produto $\langle \underline{I}_m, \underline{S}_n^{(0)} \rangle$, e utilizando a relação de ortogonalidade dada pela Eq. (9), obtêm-se:

$$\langle \underline{I}_m, \underline{S}_n^{(0)} \rangle = a_m \langle \underline{I}_m, \underline{S}_m \rangle. \quad (11)$$

Uma vez conhecidos todos os autovetores \underline{I}_j e \underline{S}_j de ordem inferior a n, calculam-se os coeficientes a_j 's através da Eq. (11) e eliminam-se os componentes destes harmônicos da fonte $\underline{S}_n^{(0)}$ obtendo o vetor $\underline{S}_n^{(0)}$ que não possua contribuição de nenhum dos harmônicos inferiores a n pela forma:

$$\underline{S}_n^{(0)} = \underline{S}_n^{(0)} - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{\langle \underline{I}_m, \underline{S}_n^{(0)} \rangle}{\langle \underline{I}_m, \underline{S}_m \rangle} \underline{S}_m. \quad (12)$$

A aplicação do método da potência ao vetor $\underline{S}_n^{(0)}$ deverá gerar o harmônico estático de maior autovalor contido neste vetor. É importante ressaltar que a eliminação dos componentes dos harmônicos inferiores a n depende não somente destes harmônicos do problema direto, como também dos harmônicos do problema adjunto. Portanto, para se calcular o n-ésimo harmônico, devem ser calculados, alternadamente, todos os harmônicos do problema direto e do problema adjunto desde o harmônico fundamental até o n-ésimo harmônico. Cada novo harmônico do problema direto e do problema adjunto obtido é utilizado, da mesma forma que os demais obtidos

anteriormente, para eliminar o seu componente do vetor inicial para o cálculo do harmônico seguinte.

As correções para o cálculo do problema adjunto são efetuadas semelhantemente à Eq. (12) por:

$$\underline{I}_n^{(0)} = \underline{I}_n^{(0)} - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{\langle \underline{I}_n^{(0)}, \underline{S}_m \rangle}{\langle \underline{I}_m, \underline{S}_m \rangle} \underline{I}_m. \quad (13)$$

Na prática, os processos envolvendo cálculo numérico estão sujeitos a erros de arredondamento e truncamento. Durante o método iterativo da potência, estes erros podem introduzir componentes de harmônicos já eliminados fazendo com que o processo iterativo convirja para estes harmônicos já obtidos. Para impedir a contaminação por estes harmônicos a correção deve ser efetuada com uma certa frequência durante o processo iterativo.

MÉTODO DE ACELERAÇÃO DA CONVERGÊNCIA

A convergência do método da potência está relacionada com a razão de dominância σ , que é definida como a razão inversa entre o maior autovalor contido em $\underline{S}^{(0)}$ e o autovalor imediatamente inferior. Da Eq. (2) pode-se verificar que entre duas iterações consecutivas do método da potência existe a relação:

$$\underline{S}_n^{(i+1)} = \sum_m a_m^{(i+1)} \underline{S}_m = \sum_m \frac{k_m}{k^{(i)}} a_m^{(i)} \underline{S}_m, \quad (14)$$

onde $k^{(i)}$ é a estimativa do maior autovalor k_n . Para um i suficientemente grande pode-se considerar que a convergência tem um comportamento assintótico, dependendo apenas dos dois harmônicos correspondentes aos maiores autovalores, n e n-1, podendo ser expressa na forma:

$$\underline{S}_n^{(i+1)} \approx a_n^{(i+1)} \underline{S}_n + a_{n-1}^{(i+1)} \underline{S}_{n-1}. \quad (15)$$

Considerando que $k^{(i)} \approx k_n$ e $a_n^{(i+1)} = \frac{k_n}{k^{(i)}} a_n^{(i)}$ obtêm-se:

$$\underline{S}_n^{(i+1)} - \underline{S}_n^{(i)} \approx (a_{n-1}^{(i+1)} - a_{n-1}^{(i)}) \underline{S}_{n-1}. \quad (16)$$

de modo que, após uma pequena manipulação algébrica, pode-se escrever:

$$\frac{\| \underline{S}_n^{(i+1)} - \underline{S}_n^{(i)} \|}{\| \underline{S}_n^{(i)} - \underline{S}_n^{(i-1)} \|} \approx \frac{k_{n-1}}{k_n} = \sigma. \quad (17)$$

A Eq. (17) é utilizada para se estimar a razão de dominância, que é necessária no método de aceleração de polinômios de Chebyshev [3,6]. Da Eq. (17) pode-se notar que quanto menor a razão de dominância (maior separação entre os autovalores), maior será a velocidade de convergência do método da potência. Problemas com autovalores muito próximos tendem a convergir mais lentamente do que problemas com autovalores espaçados.

Para acelerar a convergência do método da potência existem vários métodos [7-11]; alguns destes não são indicados para o cálculo de harmônicos de ordem superior, pois a aceleração da convergência não é feita de forma linear e contamina o cálculo com harmônicos já eliminados. Uma técnica que fornece bons resultados no cálculo de harmônicos de ordem superior é o método de extrapolação baseado nos polinômios de Chebyshev. As iterações definidas pela Eq. (2)

são modificadas pela introdução de dois parâmetros de extrapolação α e β , que têm a forma:

$$\tilde{\Sigma}_n^{(1)} = \frac{\alpha^{(1)}}{k^{(1-1)}} \underline{Q} \tilde{\Sigma}_n^{(1-1)} + (1 - \alpha^{(1)} + \beta^{(1)}) \tilde{\Sigma}_n^{(1-1)} - \beta^{(1)} \tilde{\Sigma}_n^{(1-2)} \quad (18)$$

A expansão de $\tilde{\Sigma}_n^{(1)}$ em termos dos harmônicos fica:

$$\tilde{\Sigma}_n^{(1)} = \sum_{m \geq n} \eta^{(1)}(\gamma_m) a_m^{(0)} \underline{\Sigma}_m \quad (19)$$

onde $\eta^{(1)}(\gamma_m)$ é um polinômio de ordem i em γ_m e $\gamma_m = 2 \frac{k_m}{k_n} - 1$ é definido de modo que $-1 < \gamma_m \leq 1$ para $k_m < k_n$.

Para acelerar a convergência, o polinômio $\eta^{(1)}(\gamma)$ deve ser tal que $|\eta^{(1)}(\gamma)|$ seja minimizado para $-1 < \gamma < 1$. Um polinômio que satisfaz esta condição é o polinômio de Chebyshev

$$T_n(\gamma) = \cos(n \cos^{-1}(\gamma)) \quad (20)$$

Portanto, os coeficientes α e β devem ser da forma:

$$\beta^{(1)} = \frac{T_{1-2}(\gamma_0)}{T_1(\gamma_0)} \quad (21)$$

e

$$\alpha^{(1)} = \frac{4}{\sigma} \frac{T_{1-1}(\gamma_0)}{T_1(\gamma_0)} \quad (22)$$

A técnica de aceleração por polinômios de Chebyshev tem por principal característica minimizar os componentes dos harmônicos com autovalor menor que k_n durante o processo iterativo. Por outro lado, harmônicos com autovalores maior que k_n têm seus componentes aumentados, podendo fazer com que uma pequena parcela destes harmônicos, introduzida por erros de arredondamento e de truncamento, seja bastante aumentada durante a aceleração da convergência. Portanto, é fundamental que quando da aplicação da aceleração da convergência, a eliminação dos componentes de harmônicos inferiores seja feita a cada iteração externa para evitar que haja evolução destes erros de arredondamento e de truncamento, desviando a convergência da direção desejada.

A estimativa da razão de dominância e o grau do polinômio de Chebyshev utilizado são dois fatores muito importantes para a aceleração de convergência. Quanto melhor a estimativa da razão de dominância e quanto maior for o grau do polinômio utilizado, mais eficiente será a aceleração da convergência. Enquanto não houver uma boa estimativa da razão de dominância, é conveniente utilizar um grau baixo do polinômio de Chebyshev. À medida que obtem-se uma melhor convergência da razão de dominância, o grau do polinômio utilizado pode ser aumentado. A combinação ótima destes dois fatores é determinada empiricamente, sendo válida para uma classe de problemas semelhantes.

RESULTADOS OBTIDOS

Para verificar a eficiência da aceleração de convergência pelo método de Chebyshev foram calculados 11 harmônicos estáticos superiores diretos e adjuntos para o reator ANGRA I [12], cuja representação esquemática é apresentada na Figura 1. Foram utilizadas as versões do código CITATION com e sem a implementação da aceleração de convergência. O critério de convergência utilizado é de 10^{-4} para o autovalor e 10^{-3} para o autovetor. Utilizou-se geometria bidimensional X-Y com 49×49 pontos espaciais e dois grupos de energia de nêutrons. As iterações externas para o cálculo de cada harmônico foram limitadas em 600, caso a convergência não fosse atingida nestas iterações, o cálculo dos harmônicos seguintes era continuado como se este harmônico houvesse convergido. Notou-se que, apenas para os harmônicos calculados utilizando a aceleração de convergência, os critérios de convergência foram sempre atingidos antes que fossem realizadas 600 iterações. Isto pode ser verificado nas Tabelas 1 e 2 para os casos sem e com a aceleração de convergência respectivamente. Os harmônicos diretos do grupo rápido calculados com a aceleração de convergência são apresentados na Figuras 2. Apenas os 9º e o 10º harmônicos diferiram nos casos com e sem aceleração de convergência. Os 9º e o 10º harmônicos gerados sem a aceleração são apresentados na Figura 3.

O reator ANGRA I, por ser um reator de grande porte, possui autovalores muito próximos, o que dificulta a convergência. Além disto, ANGRA I é um reator que possui uma simetria de 1/8 do núcleo, isto acarreta a existência de harmônicos degenerados, ou seja, mais de um harmônico para o mesmo autovalor. Na Tabela 2, verifica-se que os autovalores 1, 6 e 8 são iguais respectivamente aos 2, 7 e 9. Isto indica que estes autovalores são degenerados. Comparando-se estes harmônicos na Figura 1 nota-se que estes são iguais a menos de uma rotação de 90°.

No caso sem a aceleração de convergência os 9º e 10º harmônicos foram assumidos erroneamente como degenerados, pois possuem autovalores muito próximos. Eles, no entanto, não possuem a simetria ou anti-simetria presentes em todos os demais harmônicos. Estes harmônicos são uma combinação linear dos verdadeiros 9º e 10º harmônicos. Isto pode ser verificado nas Figuras 4, onde é apresentado um mapeamento bidimensional do sinal destes harmônicos comparados com os harmônicos obtidos com a aceleração de convergência.

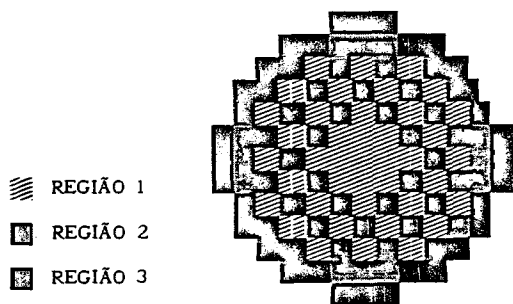
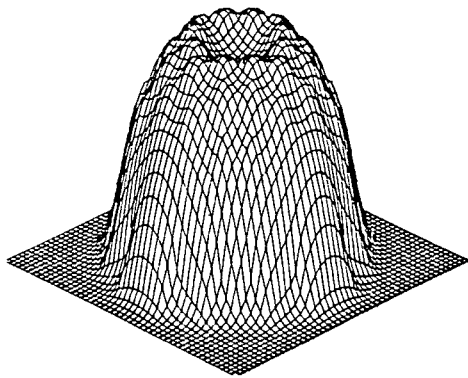


Figura 1 - Representação Esquemática do Reator ANGRA I

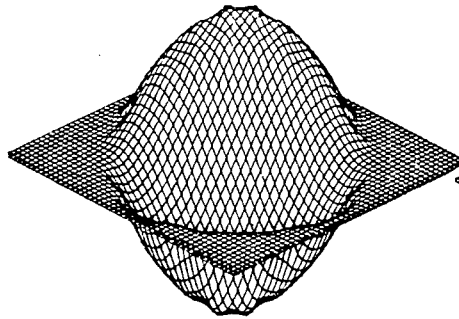
Tabela 1 - Auto-valores para o Reator Angra I Sem Aceleração de Convergência

n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0024424	60	1,0024430	53
1	0,9850838	134	0,9850839	56
2	0,9850844	415	0,9850848	63
3	0,9593797	184	0,9593800	68
4	0,9564614	(a)	0,9564618	70
5	0,9350806	327	0,9350746	54
6	0,9255173	285	0,9255178	62
7	0,9255179	(a)	0,9255180	63
8	0,8958443	(a)	0,8958452	563
9	0,8953477	(a)	0,8956360	(a)
10	0,8950131	239	0,8952914	53

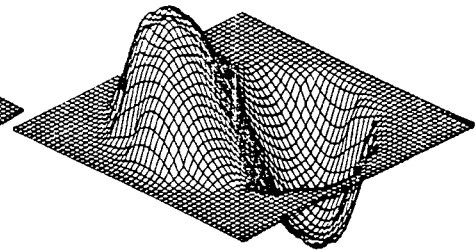
(a) Não houve convergência em 600 iterações



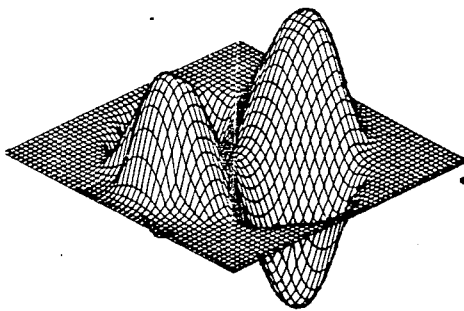
(a) harmônico fundamental direto grupo rápido



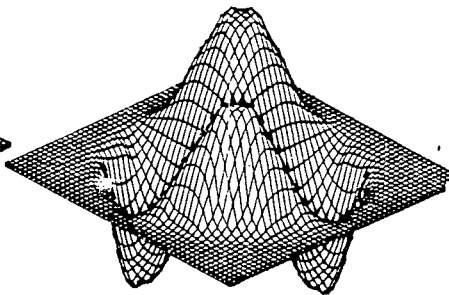
(a) 1º harmônico direto grupo rápido



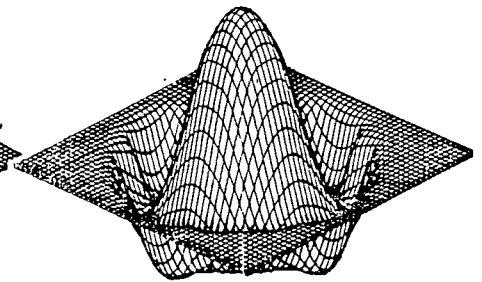
(a) 2º harmônico direto grupo rápido



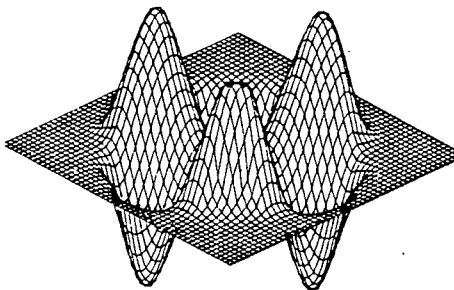
(a) 3º harmônico direto grupo rápido



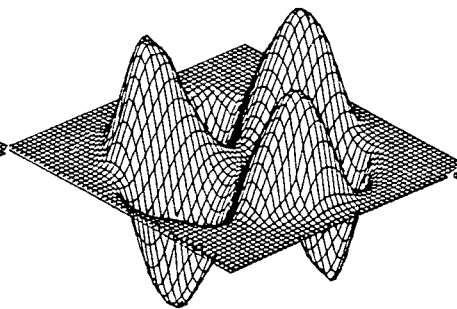
(a) 4º harmônico direto grupo rápido



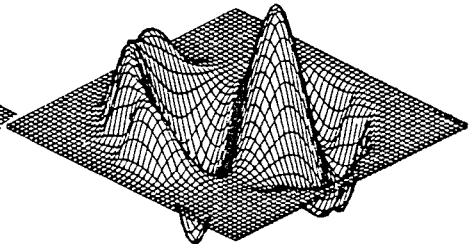
(a) 5º harmônico direto grupo rápido



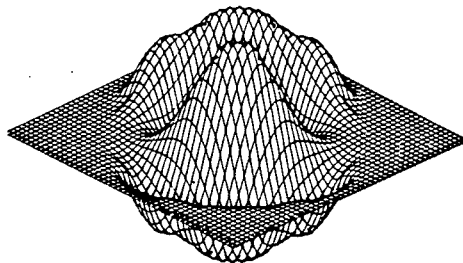
(a) 6º harmônico direto grupo rápido



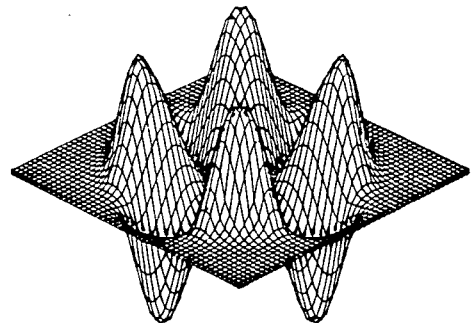
(a) 7º harmônico direto grupo rápido



(a) 8º harmônico direto grupo rápido

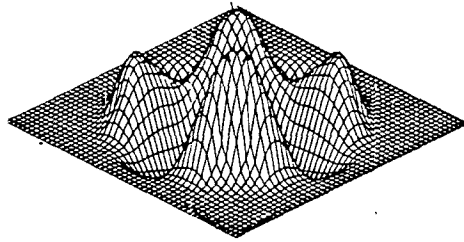


(a) 9º harmônico direto grupo rápido

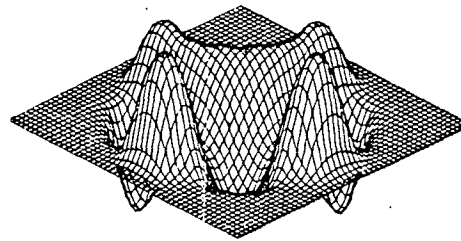


(a) 10º harmônico direto grupo rápido

Figura 2 - Harmônicos Calculados Para o Reator ANGRA I (com aceleração de convergência)

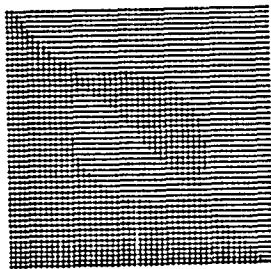


(a) 9º harmônico direto
grupo rápido



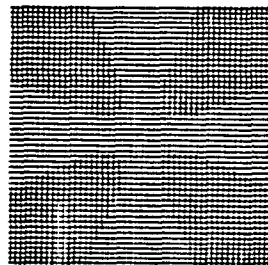
(a) 10º harmônico direto
grupo rápido

Figura 3 - Harmônicos Calculados Para o Reator ANGRA I
(sem aceleração de convergência)



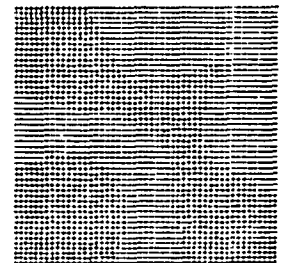
9º harmônico

+



10º harmônico

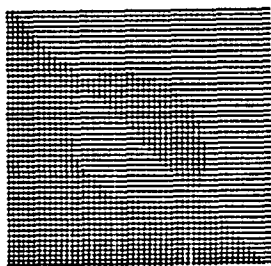
=



9º Harmônico

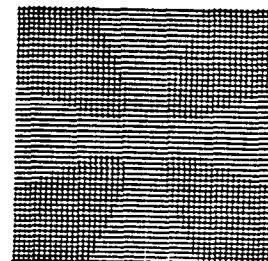
com aceleração de convergência

sem a Aceleração de Convergência



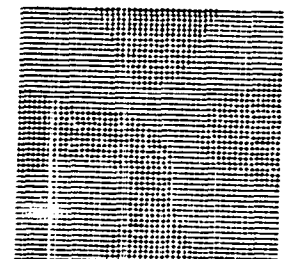
9º harmônico

-



10º Harmônico

=



10º Harmônico

Figura 4 - Mapeamento dos Sinais dos 9º e 10º Harmônicos
Calculados Para o Reator ANGRA I
(com e sem a aceleração de convergência)

Tabela 2 - Auto-valores para o Reator Angra I
Com Aceleração de Convergência

n	direto	iter	adjunto	iter
0	1,0023971	26	1,0024134	15
1	0,9850841	76	0,9850844	26
2	0,9850827	96	0,9850819	27
3	0,9593776	94	0,9593776	43
4	0,9564586	337	0,9564586	40
5	0,9350697	114	0,9350025	26
6	0,9255136	103	0,9255134	27
7	0,9255135	140	0,9255135	40
8	0,8958398	481	0,8958400	89
9	0,8958399	557	0,8958401	43
10	0,8948154	80	0,8948154	25

-CONCLUSÕES

Foi apresentado um método para cálculo de harmônicos estáticos superiores da equação de difusão baseado na relação de ortogonalidade destes harmônicos. Na ausência de um método eficaz de aceleração de convergência, este método apresentou muitos problemas. Não foi conseguida a convergência de muitos harmônicos, mesmo considerando um limite de 600 iterações externas. Além disto, alguns harmônicos com autovalores muito próximos convergiram como se fossem harmônicos degenerados.

Um método de aceleração de convergência baseado em polinômios de Chebyshev foi introduzido. Este método reduziu em mais de 50% o número de iterações necessárias para se convergir o problema sem utilizar nenhuma aceleração da convergência. Com a implementação deste método foi ainda possível separar os harmônicos que anteriormente convergiam erroneamente como harmônicos degenerados.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio dado na fase inicial deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] - BELCHIOR JR., A.; MOREIRA, J. M. L.; Cálculo de Harmônicos Estáticos de um Reator Nuclear com o Código CITATION; Anais do VII ENFIR: 177-187, Recife, 1989.
- [2] - FOWLER, T. B.; VONDY, D. R.; CUNNINGHAM, G. W.; Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION; ORNL-TM 2496, Rev. 2, Oak Ridge National Laboratory, 1971.
- [3] - NAKAMURA, S.; Computation Methods in Engineering and Science; John Wiley and Sons, New York, 1977.
- [4] - GANDINI, A.; On the Standard Perturbation Theory; Nucl. Sci. Eng., 79: 426-432, 1981.
- [5] - HABETLER, G. J.; MARTINO, M. A.; Existence Theorems and Spectral Theory for Multigroup Diffusion Model; Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, vol XI: 127-188, Providence, Rhode Island, 1961.
- [6] - HAGEMAN, L. A.; Numerical Methods and Techniques Used in the Two Dimensional Neutron Diffusion Program PDQ-5, WAPD-TM-364, Bettis Atomic Power Laboratory, 1963.
- [7] - ALTUS, E.; A global-Local Interactive Method for Fast Convergency of Iterative Finite Difference Solution of PDE; Computers & Structures, 33: 915-921, 1989.
- [8] - ANDRZEJEWSKI, K.; New Iterative Methods for CITATION Code; Proceedings Int. Top. Meet. on Adv. on Math. Meth. for the Sol. of Nucl. Eng. Probl., vol I: 402-409.

- [9] - FERGUSON, D. R.; DERSTINE, K. L.; Optimized Iteration Strategies and Data Management Considerations for Fast Reactor Finite Difference Diffusion Theory Codes; Nucl. Sci. Eng., 64: 593-604, 1977..
- [10] - VONDY, D. R.; FOWLER, T. B.; A Double Error Mode Extrapolation Procedure; Nucl. Sci. Eng., 198-201, 1982.
- [11] - VONDY, D. R.; FOWLER, T. B.; Restrained Acceleration in Iteration; Nucl. Sci. Eng., 65: 415-416, 1978.
- [12] - FSAR - Final Safety Analysis Report; Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto, unid. 1, FURNAS Centrais Elétricas.

ABSTRACT

This work presents the implementation of a Chebyshev polynomial convergence acceleration method in a version of the CITATION code that was modified to obtain higher lambda-modes. The results obtained for the ANGRA I reactor before and after the implementation are compared. The Chebyshev acceleration scheme reduced more than 50% the number of iteration required to converge the same problem without acceleration for all the lambda-modes.