

CÁLCULO DE HARMÔNICOS ESTÁTICOS DE UM REATOR NUCLEAR COM O CÓDIGO CITATION

Antonio Belchior Junior
João M. L. Moreira

Divisão de Física de Reatores (RTF)
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)
Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN)

RESUMO

O código CITATION resolve a equação de difusão de nêutrons em multigrupos de energia pelo método de diferenças finitas, fornecendo o harmônico fundamental de um reator nuclear, ou seja: o fluxo de nêutrons. Neste trabalho são apresentados dois métodos de correção no termo fonte via fissão que possibilitam a obtenção de harmônicos de alta ordem com o código CITATION. Os dois métodos foram comparados, analisando-se vantagens e desvantagens de cada um. As implementações foram testadas para problemas com solução analítica. Foram também gerados harmônicos bidimensionais para o reator de pesquisa IEA-R1 e para o reator de potência ANGRA-I, sendo os resultados obtidos apresentados na forma de gráficos e tabelas.

ABSTRACT

The CITATION code, which solves the multigroup diffusion equation by the finite difference method, calculates the fundamental λ -mode (harmonic) for nuclear reactors. In this work, two fission source correction methods are attempted to obtain higher λ -modes through the CITATION code. The two methods are compared, their advantages and disadvantages analysed and verified against analytical solutions. Two dimensional harmonic modes are calculated for the IEA-R1 research reactor and for the ANGRA-I power reactor. The results are shown in graphics and tables.

1. Introdução

Grande parte dos problemas em física de reatores podem ser resolvidos pela Equação de Difusão de Nêutrons (EDN) ou a Equação de Transporte de Nêutrons, geralmente utilizando uma aproximação estática, onde a variável tempo é omitida. A eliminação da variável tempo transforma estas equações em problemas de auto-valores, dos quais o harmônico fundamental está estritamente relacionado com o fluxo de nêutrons do sistema, e o seu auto-valor com fator de multiplicação efetivo. Os harmônicos de mais alta ordem têm encontrado diversas aplicações e sua obtenção é um assunto que tem sido abordado por diversos autores [1-5,7-9]. Os harmônicos estáticos são funções representativas do reator, e podem ser utilizados para expandir qualquer função no domínio do reator. Por este motivo, eles têm encontrado aplicações no mapeamento de fluxo neutrônico [1] (interpolando sinais de detetores), na eliminação de efeitos espaciais em medidas de reatividade [2], em teoria de perturbação de alta ordem [3,4], e também no gerenciamento de combustível nuclear [5].

O código CITATION [6] utiliza a representação em diferenças finitas para a EDN e, através do método da potência, o código calcula o harmônico de maior auto-valor contido numa aproximação inicial para o termo fonte da EDN. Para calcular os harmônicos de ordem superior são feitas correções no termo fonte via fissão, eliminando os harmônicos já obtidos anteriormente, devendo portanto estes serem obtidos em ordem decrescente de auto-valores. Neste trabalho são apresentados dois métodos para se aplicar estas correções. Um destes é uma variação do método utilizado por Gandini [3], no qual a correção é feita utilizando a equação de auto-valores e admitindo conhecido o auto-valor do harmônico a ser eliminado do termo fonte. O outro método [7-9], necessita do conhecimento do auto-vetor a ser eliminado e a correção é feita utilizando a relação de ortogonalidade entre os auto-vetores.

2. Formulação do Problema de Auto-Valores

O comportamento do fluxo neutrônico de um reator nuclear é razoavelmente descrito pela Equação de difusão de nêutrons com dependência temporal:

$$\frac{1}{v(E,t)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r,E,t) = [M(r,E,t) - L(r,E,t)] \phi(r,E,t) \quad (1)$$

onde

$v(E,t)$	- é a velocidade dos nêutrons,
$M(r,E,t)$	- é o operador representando produção via fissão,
$L(r,E,t)$	- é o operador representando difusão, absorção e espalhamento,
$\phi(r,E,t)$	- é o fluxo neutrônico,
E	- é a energia dos nêutrons,
r	- é a posição dos nêutrons,
t	- é a variável tempo.

A omissão da dependência temporal na Eq.(1) pode ser compensada mediante a introdução de auto-valores. Existem basicamente dois tipos de problemas de auto-valores que resultam da Eq.(1). O primeiro consiste na equação:

$$[M(r,E) - L(r,E)] \phi_{\omega}(r,E) = \frac{\omega}{v(E)} \phi_{\omega}(r,E) \quad (2)$$

sendo ω o auto-valor e $\phi_{\omega}(r,E)$ a auto-função (" ω -mode").

O segundo tipo de problema de auto-valores é expresso por:

$$[L(r,E) - \frac{1}{\lambda} M(r,E)] \phi_{\lambda}(r,E) = 0 \quad ,$$

onde λ é o auto-valor e $\phi_{\lambda}(r,E)$ é a auto-função (" λ -mode").

As auto-funções da Eq.(2) são apropriadas para descrever o comportamento temporal do reator, pois expandindo-se uma distribuição inicial de fluxo em termos de " ω -modes", cada parcela desta expansão evolui exponencialmente com o tempo com um período característico associado ao auto-valor ω . O comportamento assintótico do fluxo neutrônico corresponde ao harmônico fundamental deste problema. As auto-funções da Eq.(3) são menos convenientes para a resolução da evolução temporal do fluxo neutrônico, pois não existe um período característico associado a cada harmônico, entretanto são mais fáceis de serem obtidas numericamente. Os " λ -modes" constituem um conjunto completo e portanto, servem para expandir qualquer função no domínio do reator, tendo grande utilidade em problemas envolvendo a configuração espacial do reator, como por exemplo o cálculo de perturbações, o mapeamento de fluxo neutrônico e o gerenciamento de combustível nuclear.

Neste trabalho dá-se ênfase ao cálculo de " λ -modes" utilizando a representação da Eq.(3) em diferenças finitas e multigrupos de energia, ou seja:

$$L \phi_k = \frac{1}{k} M \phi_k \quad , \quad (4)$$

onde L é a matriz representando espalhamento, difusão e absorção (dimensão $(n.g) \times (n.g)$),
 M é a matriz representando produção via fissão (dimensão $(n.g) \times (n.g)$),
 ϕ_k é o auto-vetor (dimensão $(n.g)$),
 k é o autovalor,
 n é o número de malhas espaciais e
 g é o número de grupos de energia.

O problema, conforme descrito pela Eq.(4) possui no máximo n autovalores não nulos, pois a matriz M tem "rank" n . A eliminação dos auto-valores nulos do espectro de auto-valores é feita reescrevendo a Eq.(4) numa equação para a fonte via fissão. Para isto fatora-se a matriz M em dois fatores, um correspondente ao espectro de fissão, \mathcal{F} de dimensão $((n.g) \times n)$, e outro correspondente a seção de choque de produção, F de dimensão $(n \times (n.g))$, sendo então:

$$M = \mathcal{F} F \quad . \quad (5)$$

Multiplicando ambos os membros da Eq.(4) por $F L^{-1}$ e utilizando a Eq.(5) obtém-se:

$$S_k = \frac{1}{k} Q S_k \quad , \quad (6)$$

sendo $S_k = F \phi_k$ a fonte via fissão, e

$Q = F L^{-1} \mathcal{F}$ a matriz para o novo problema de autovalores (dimensão $n \times n$).

Normalizados convenientemente, os " λ -modes" da Eq.(6) obedecem à relação de ortogonalidade:

$$\langle S_{k_i}^j, S_{k_j}^i \rangle = \delta_{ij} \quad , \quad (7)$$

com \langle , \rangle representando o produto escalar e S_k^j é solução do problema adjunto:

$$S_k^j = \frac{1}{k} Q^T S_k^j \quad . \quad (8)$$

A Eq.(8) está escrita convenientemente para a determinação dos "λ-modes", assunto que será abordado na próxima seção.

3. Cálculo de Harmônicos Estáticos

O cálculo do harmônico fundamental da Eq.(6) é feito pelo método da potência, ou seja: aplica-se sucessivamente a matriz Q a uma escolha inicial de fonte $S^{(0)}$ seguindo o processo iterativo:

$$S^{(i)} = \frac{1}{k^{(i-1)}} Q S^{(i-1)} \quad , \quad (9)$$

sendo o superescrito (i) utilizado para indicar a i-ésima iteração.

A convergência é verificada lembrando que o vetor $S^{(0)}$ pode ser expandido em uma combinação linear de harmônicos do problema, ou seja:

$$S^{(0)} = \sum_{n=0}^{n-1} a_n S_n \quad , \quad (10)$$

sendo S_n o auto-vetor associado a um auto-valor k_n .

Após i iterações tem-se:

$$\begin{aligned} S^{(i)} &= \frac{1}{k^{(0)}} \frac{1}{k^{(1)}} \cdots \frac{1}{k^{(i-1)}} Q^i S^{(0)} = \\ &= \frac{1}{k^{(0)}} \frac{1}{k^{(1)}} \cdots \frac{1}{k^{(i-1)}} \sum_{n=0}^{n-1} a_n Q^i S_n \quad . \quad (11) \\ &= \frac{1}{k^{(0)}} \frac{1}{k^{(1)}} \cdots \frac{1}{k^{(i-1)}} \sum_{n=0}^{n-1} a_n k_n^i S_n \end{aligned}$$

Considerando que os harmônicos estejam ordenados em ordem decrescente de auto-valores, após um número suficientemente grande de iterações o termo correspondente ao maior auto-valor será dominante em relação aos demais, e o processo iterativo converge para este harmônico na forma:

$$S^{(i)} = \frac{1}{k^{(0)}} \frac{1}{k^{(1)}} \cdots \frac{1}{k^{(i-1)}} k_0^i S_0 \quad . \quad (12)$$

Para obter harmônicos de ordem mais alta é necessário que o vetor $S^{(0)}$ não contenha componentes de harmônicos inferiores ao desejado, sendo necessário eliminar estes componentes do termo fonte. Para efetuar estas correções utilizou-se dois métodos

diferentes, descritos abaixo.

O primeiro método utilizado necessita do conhecimento do auto-valor correspondente ao harmônico que se quer eliminar do termo fonte, sendo que para isto utiliza-se a matriz de correção:

$$C_i = \left(I - \frac{1}{k_i} Q \right) \quad (13)$$

Aplicando a matriz C_i no termo fonte descrito pela Eq.(10) obtém-se:

$$\begin{aligned} C_i \mathbf{S}^{(0)} &= \sum_{m=0}^{n-1} a_m \left(I - \frac{1}{k_i} Q \right) \mathbf{S}_m \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} a_m \left(1 - \frac{k_m}{k_i} \right) \mathbf{S}_m \end{aligned} \quad (14)$$

Vê-se que na Eq.(14) foi anulado o i -ésimo termo da somatória, o que corresponde ao componente devido ao i -ésimo harmônico.

O outro método de correção utiliza a relação de ortogonalidade entre os harmônicos dada pela Eq.(7). Utilizando esta relação, e conhecendo o harmônico adjunto ao que se quer eliminar, calcula-se o coeficiente a_i da Eq.(10) como:

$$a_i = \langle \mathbf{S}_i^t, \mathbf{S}^{(0)} \rangle \quad (15)$$

O auto-vetor corrigido tem a forma:

$$\mathbf{S}^{(0)} = \mathbf{S}^{(0)} - a_i \mathbf{S}_i = \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n-1} a_m \mathbf{S}_m \quad (16)$$

Neste segundo método é necessário o conhecimento da fonte adjunta, que é calculada através de um processo iterativo análogo e intercalado com o problema direto, ou seja, calcula-se o harmônico direto e depois o adjunto partindo do fundamental para os harmônicos mais altos em ordem decrescente de auto-valores. As correções no termo fonte devem ser efetuadas com uma certa frequência, e não apenas no valor inicial, pois erros de arredondamento e truncamento acabam contaminando o termo fonte com harmônicos já eliminados. No primeiro método, uma correção muito frequente acaba eliminando além do harmônico desejado, os harmônicos com auto-valores próximos, como pode ser visto na Eq.(14).

A análise da convergência do processo iterativo foi feita baseada nos desvios relativos entre duas iterações consecutivas. Entretanto foram excluídos desta análise os pontos cujo valor absoluto do harmônico é menor que 5% do valor absoluto médio, pois em alguns pontos o valor do harmônico é nulo.

Ambos os métodos aqui apresentados são de fácil implementação no código CITATION, pois as mudanças exigidas consistem basicamente em chamar convenientemente as subrotinas existentes no programa fonte original. Estes métodos foram implantados no código CITATION, e foram gerados harmônicos para alguns problemas, que são apresentados na seção seguinte.

4. Resultados Obtidos

O primeiro problema apresentado constitui um reator hipotético com duas regiões, núcleo e refletor, conforme mostrado na Figura 1. O problema foi resolvido em geometria bidimensional X-Y com apenas um grupo de energia, objetivando a comparação dos métodos entre si e também com uma solução analítica aproximada. As seções de choque para este problema encontram-se na Tabela 1.

Tabela 1. Seções de Choque Utilizadas para o 1º Problema Apresentado

	D	Σ_a	$\nu\Sigma_f$
núcleo	0,910804	0,00249700	0,00275242
refletor	0,910804	0,00249700	0,00000000

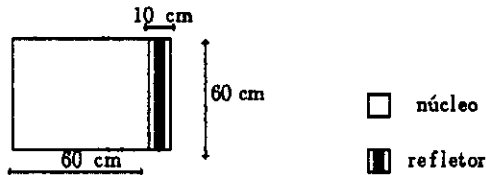
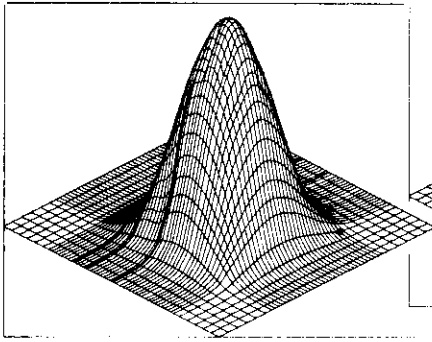


Figura 1. Quadrante Inferior Direito do Reator Utilizado no Problema 1

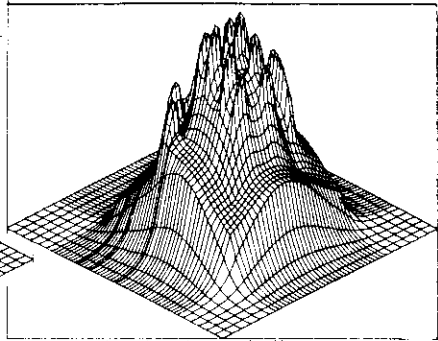
Os cálculos foram feitos utilizando 20 x 20 malhas no núcleo e 10 x 20 malhas no refletor. Os resultados obtidos para ambos os métodos são mostrados na Tabela 2. Nota-se que os resultados obtidos são bons, entretanto com o primeiro método de correção apresentado, obteve-se a convergência para poucos harmônicos, pois ele é muito sensível a erros de arredondamento e truncamento ("round-off"). Este método apresentou bons resultados apenas para problemas unidimensionais onde não é exigido grande número de malhas e as inversões matriciais necessárias são feitas diretamente, eliminando-se grande parte dos erros devido a processos iterativos. O segundo método é menos sensível a erros numéricos de arredondamento e convergiu para os devidos harmônicos com poucas iterações.

O segundo problema executado foi o reator de pesquisa IEA-R1 cuja configuração é dada em [10] (configuração 158). O reator foi calculado com 64 x 64 malhas espaciais e dois grupos de energia. Foram gerados dez harmônicos estáticos utilizando o segundo método apresentado, cujos auto-valores do problema direto e do problema adjunto são apresentados na Tabela 3, e na Figura 2 encontram-se os três primeiros harmônicos.

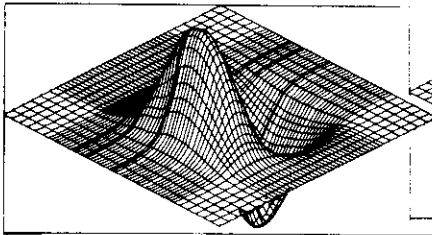
Pela Tabela 3 nota-se uma perfeita concordância entre os auto-valores do problema direto e do problema adjunto. Para este problema obteve-se um bom nível de convergência (10⁻¹ % para os "λ-modes").



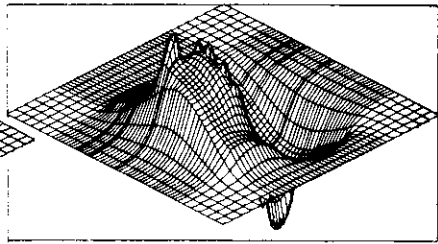
harm. fundamental rápido



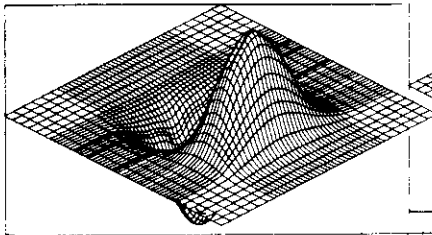
harm. fundamental térmico



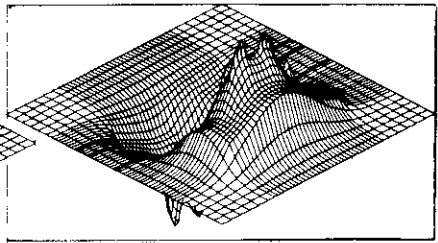
19 harm. rápido



19 harm. térmico



29 harm. rápido



29 harm. térmico

Figura 2. Harmônicos Estáticos para o Reator IEA-R1

Tabela 2. Auto-Valores Obtidos para o 1º Problema Executado

i	k _i				
	analítico	método 1	iter	método 2	iter
0	0,7784	0,7779	11	0,7778	11
1	0,3766	0,3765	12	0,3764	51
2	0,3348	0,3350	**	0,3347	18
3	0,2295	0,2271	73	0,2271	42
4	0,1792	—	—	0,1804	46
5	0,1564	—	—	0,1575	64
6	0,1373	0,1360	**	0,1362	82
7	0,1288	—	—	0,1277	31

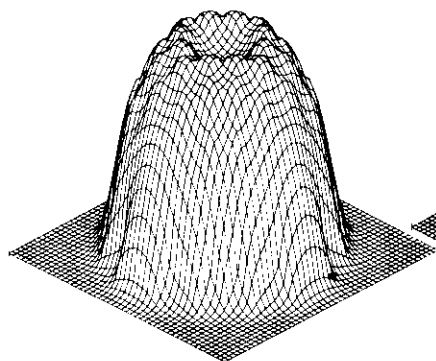
** não obteve-se convergência em 200 iterações
 tolerância para o auto-valor = 10^{-2} %
 tolerância para o harmônico = 10^{-1} %

Tabela 3. Auto-Valores para o Reator de Pesquisa IEA-R1

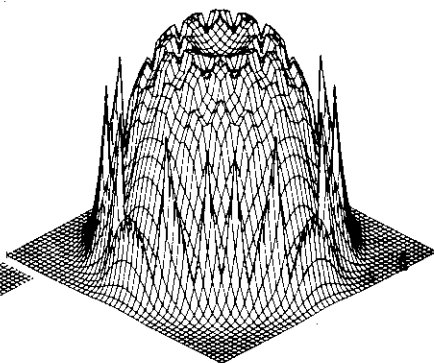
i	k _i			
	direto	iter	adjunto	iter
0	1,01343	19	1,01343	28
1	0,77863	64	0,77864	94
2	0,69783	54	0,69784	33
3	0,53945	***	0,53945	***
4	0,52851	65	0,52852	54
5	0,42488	104	0,42488	64
6	0,37672	144	0,37672	154
7	0,34847	***	0,34846	***
8	0,33922	56	0,33921	38
9	0,25825	***	0,25825	184
10	0,25004	***	—	—

*** não houve convergência em 200 iterações
 tolerâncias iguais às da Tabela 2

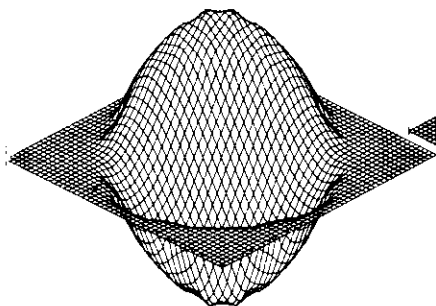
O terceiro problema executado foi o reator de potência Angra-I cuja configuração foi obtida no Capítulo 4 de [11]. O reator foi calculado sem barras de controle e a criticidade foi conseguida ajustando-se a concentração de boro solúvel no moderador. Utilizou-se geometria bidimensional X-Y com 49 x 49 malhas e dois grupos de energia, e os harmônicos foram calculados utilizando o segundo método apresentado. Na Tabela 4 encontram-se os auto-valores obtidos para o cálculo direto e para o cálculo adjunto. Nota-se a necessidade da introdução de um processo de aceleração de convergência para as iterações. Os autovalores são muito próximos e o método da potência não é eficiente para estes casos, proporcionando uma convergência muito lenta. Para a maioria dos harmônicos calculados neste terceiro problema obteve-se uma convergência de 1% após 200 iterações. Três dos harmônicos obtidos encontram-se na Figura 3.



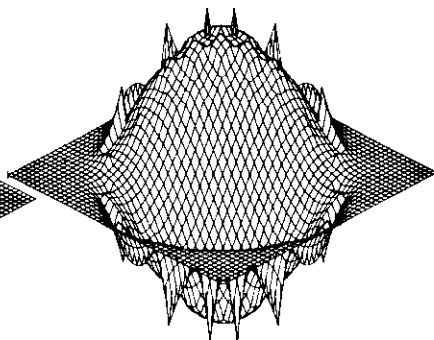
harm. fundamental rápido



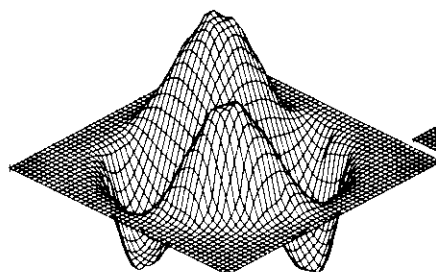
harm. fundamental térmico



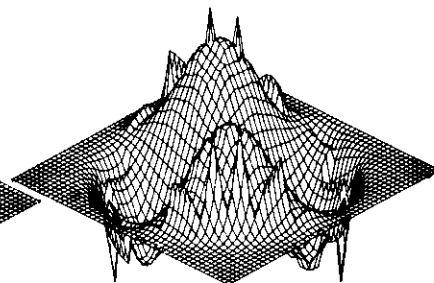
19 harm. rápido



19 harm. térmico



29 harm. rápido



29 harm. térmico

Figura 3. Harmônicos para o Reator Angra I

Tabela 4. Auto-Valores para o Reator de Potência Angra I

i	k _i			
	direto	iter	adjunto	iter
0	1,00244	60	1,00244	53
1	0,98508	***	0,98508	***
2	0,96668	***	0,96829	***
3	0,96306	***	0,96489	***
4	0,95825	***	0,93801	***
5	0,95670	***	0,93641	***
6	0,92549	***	—	—

*** não houve convergência em 200 iterações
tolerâncias iguais às da Tabela 2

5. Conclusão

Os resultados obtidos com o primeiro método de correção apresentado não são satisfatórios, pois só foi possível utilizá-lo para problemas com poucos malhas espaciais e com auto-valores bastante distintos entre si. Casos que geralmente não acontecem na prática. Já com o segundo método foi possível calcular problemas reais como os reatores IEA-R1 e Angra I, entretanto necessita-se ainda introduzir um processo de aceleração de convergência para tornar mais viável a obtenção dos harmônicos. Até o momento calculou-se apenas harmônicos uni e bidimensionais sendo um próximo passo implementar o cálculo de harmônicos tridimensionais com código CITATION.

Estes harmônicos serão utilizados no sistema de mapeamento de fluxo do reator IEA-R1 a ser desenvolvido.

Agradecimentos

Agradecemos à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio dado, sem o qual não seria possível a realização deste trabalho.

Referências

- [1] P. S. W. Chan, "A High Order Method in Flux Mapping" INIS-MF-8473, p 36-41(1981).
- [2] J. M. L. Moreira and J.C.Lee, "Accuracy of the Modal-Local Method for Reactivity Determination", Nucl. Sci. Eng., 98, (1988).
- [3] A. Gandini, "Implicit and Explicit Higher Order Perturbation Methods for Nuclear Reactor Analysis", Nucl. Sci. Eng., 67, 347 (1978)
- [4] R. Saito and S. Katsuraghi, "Higher Order Perturbation Method in Reactor Calculation", J. Nucl. Sci. Technol., 6, 303 (1960)
- [5] A. L. Wight and P. P. Wieb, "Simulation of Darlington Fuelling with Simodex, A Fuel Management Program Based on Modal Expansion Method", INIS-MF-8473, p 16-28
- [6] D. R. Wondy, G. W. Cunningham and T. B. Fowler, "Nuclear Reactor Core Analysis: CITATION". ORNL-TM-2496 Rev 2 (1971)

- [7] D. R. Wondy and T. B. Fowler, "Solving the Uncommon Nuclear Reactor Core Neutronic Problems", Nucl. Sci. Eng., 83, 100 (1983)
- [8] C. H. Adams, "Calculations of Harmonics of the Multigroup, Diffusion Theory, Finite-Difference Equations Using DIF 3D", FRA-TM-119
- [9] "An Iterative Procedure for Calculating The Higher Harmonic of the Diffusion Equation: The MONIC Code". TDAI-94, (1976)
- [10] N. Kosaka, L. C. C. B. Fanaro, M. Yamaguchi; "Cálculo dos Parâmetros Neutrônicos do reator IEA-R1 e Proposta de uma Nova Configuração", Anais do VII ENFIR (a ser publicado)
- [11] Furnas Centrais Elétricas, Final Safety Analysis Report. Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto, Unit 1. s.d.v5ep.