

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Solução da Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupo Multirregião Estacionária Unidimensional em Geometria Cartesiana pelo Método da Potência via Fronteiras Fictícias

Rodrigo Zanette¹, Claudio Zen Petersen², Welton Alves de Menezes³
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, IFM, UFPel, Pelotas, RS
Marcelo Schramm⁴
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo. Este trabalho apresenta uma forma alternativa para a solução da equação de difusão de nêutrons multigrupo multirregião estacionária unidimensional em Geometria Cartesiana pelo método da potência via fronteiras fictícias. A ideia principal é subdividir o domínio em R regiões fictícias e resolver a equação de difusão de nêutrons para cada uma dessas regiões, aplicando condições de contorno, continuidade de fluxo escalar e densidade de corrente nas interfaces. O fluxo é reconstruído a cada iteração via interpolação polinomial e as constantes arbitrárias oriundas da solução do problema homogêneo são encontradas pela resolução de um sistema linear via fatoração QR. Os resultados numéricos são comparados com outros presentes na literatura.

Palavras-chave. Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupo, Método da Potência, Fronteiras Fictícias.

1 Introdução

Um dos principais enfoques da pesquisa na área nuclear é o estudo da evolução da população de nêutrons em sistemas nucleares, o que é um grande desafio tanto físico quanto matemático e constitui um problema crucial no estudo e na análise de reatores nucleares [7]. Embora tenha validade limitada o uso da teoria de difusão de nêutrons para cálculos globais em física de reatores é bastante adotado, uma vez que fornece resultados satisfatórios para muitas aplicações nucleares. Esse é um problema de autovalor e é frequentemente assumido que existe apenas uma fonte de nêutrons no reator autossustentável. A determinação do fluxo de nêutrons ou distribuição de energia dentro do núcleo do reator é calculada resolvendo-se a Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupo Multirregião (EDNMM) [3].

¹rodrigozanette@hotmail.com, bolsista Capes

²claudiopetersen@yahoo.com.br

³walvesm@gmail.com.br

⁴marceloschramm@hotmail.com, bolsista Capes

Vários métodos numéricos, analíticos e híbridos foram desenvolvidos ao longo dos anos para resolver a EDNMM. Dentre os métodos numéricos destacam-se, por exemplo, o método nodal [5], método das diferenças finitas [3], método dos elementos finitos [4] e método dos elementos de contorno [2]. Embora cada um dos métodos mencionados tem seus próprios méritos e deficiências, eles encorrem necessariamente na discretização do operador diferencial da equação de difusão para produzir um conjunto de equações algébricas discretas. O que necessariamente requer um grande número de malhas, volumes e elementos, o que acarreta um custo computacional alto. Já com relação aos métodos híbridos-analíticos destacam-se os trabalhos de [6] e [1]. Com relação a [6], para obtenção do fator de multiplicação, a EDNMM é resolvida pela aplicação da Transformada de Laplace resultando num sistema algébrico, na qual o autovalor dominante torna-se um coeficiente de uma matriz a ser determinado via determinante pelo método da bisseção. Embora a ideia seja promissora, à medida que há um aumento do número de regiões necessita-se calcular um determinante de forma simbólica o que torna um trabalho dispendioso já para um problema unidimensional. Com relação ao trabalho [1] a EDNMM é resolvida expandindo-se o fluxo de nêutrons em uma série de potências com truncamento de baixa ordem (quadrática). Para garantir a convergência divide-se o domínio em n intervalos. Cabe ressaltar que o número de incógnitas é maior que o convencional (3 para um problema local unidimensional), o que aumenta ainda mais a ordem do sistema, o que está intimamente relacionado ao aumento do tempo computacional.

A fim de desenvolver métodos que possam prever o comportamento da população de nêutrons no núcleo de um reator nuclear com suficiente precisão, confiabilidade e rapidez, propõe-se a resolução da EDNMM estacionária unidimensional em geometria cartesiana utilizando-se o Método da Potência via Fronteiras Fictícias (MPFF). A ideia principal é, uma vez que o domínio é composto por diferentes materiais, esse deve ser subdividido em subdomínios de materiais homogêneos. Essa equação deve ser resolvida para cada um dos subdomínios separadamente por um método iterativo de fonte e, em seguida, utilizando condições de contorno, continuidade e densidade de corrente nas interfaces determinar as constantes arbitrárias. Enquanto o fluxo de nêutrons é contínuo através da interface, a componente normal de corrente deve estabelecer uma condição de salto. Os resultados numéricos obtidos são comparados com os encontrados na literatura.

O trabalho está estruturado da seguinte forma: na seção 2 é apresentada a metodologia utilizada para resolver o problema proposto, na seção 3 é exposto os resultados do método e comparação com resultados presentes na literatura e na seção 4 discute-se as conclusões e trabalhos futuros.

2 Formulação Matemática

Sem perda de generalidade, partindo da EDNMM estacionária unidimensional em Geometria Cartesiana sem fonte externa, que fornece um balanço entre perdas e ganhos de nêutrons, dada por Duderstadt [3]:

$$-D_g^{(r)} \frac{d^2}{dx^2} \phi_g^{(r)}(x) + \Sigma_{Rg}^{(r)} \phi_g^{(r)}(x) = \frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^{(r)} \phi_{g'}^{(r)}(x) + \sum_{g'=1; g' \neq g}^G \Sigma_{sg \rightarrow g'}^{(r)} \phi_{g'}^{(r)}(x), \quad (1)$$

onde $0 \leq x \leq L$; L é o comprimento da placa; r são as regiões; g são os grupos de energia, na qual $g = 1 : G$; $D_g^{(r)}$ é o coeficiente de difusão do grupo g na região r ; $\phi_g^{(r)}(x)$ é o fluxo escalar de nêutrons do grupo g na região r ; $\Sigma_{Rg}^{(r)}$ é a seção de choque macroscópica de remoção do grupo g na região r ; $\Sigma_{fg}^{(r)}$ é a seção de choque macroscópica de fissão do grupo g na região r ; $\Sigma_{sg \rightarrow g'}^{(r)}$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g para o g' na região r ; K_{eff} é o fator de multiplicação efetivo; ν é o número médio de nêutrons liberado por fissão e χ_g é o espectro integrado de fissão do grupo g de energia.

A equação (1) para dois grupos de energia é dada por:

$$\begin{aligned} -D_1^{(r)} \frac{d^2}{dx^2} \phi_1^{(r)}(x) + \Sigma_{R1}^{(r)} \phi_1^{(r)}(x) &= \frac{1}{K_{eff}} \left(\nu \Sigma_{f1}^{(r)} \phi_1^{(r)}(x) + \nu \Sigma_{f2}^{(r)} \phi_2^{(r)}(x) \right) \\ -D_2^{(r)} \frac{d^2}{dx^2} \phi_2^{(r)}(x) + \Sigma_{R2}^{(r)} \phi_2^{(r)}(x) &= \Sigma_{s1 \rightarrow 2}^{(r)} \phi_1^{(r)}(x), \end{aligned} \quad (2)$$

onde $S = \left(\nu \Sigma_{f1}^{(r)} \phi_1^{(r)}(x) + \nu \Sigma_{f2}^{(r)} \phi_2^{(r)}(x) \right)$.

Estas equações estão sujeitas as seguintes condições de contorno, continuidade de fluxo e de densidade corrente nas interfaces das regiões dadas respectivamente por:

$$\alpha \phi_g(x) + \beta \frac{d\phi_g(x)}{dx} = 0, \quad \phi_g^{(r)}(x) = \phi_g^{(r+1)}(x), \quad D_g \frac{d\phi_g^{(r)}(x)}{dx} = D_g \frac{d\phi_g^{(r+1)}(x)}{dx}, \quad (3)$$

onde $g = 1 : G$, $|\alpha| + |\beta| > 0$ e que α e β não sejam simultaneamente 0. Com uma adequada escolha das constantes desta condição de contorno, elas abrangem Dirichlet, Neumann e a condição de distância extrapolada [3]. A equação (2) de autovalor K_{eff} e autovetor $\phi_g^{(r)}(x)$ dominantes é resolvida utilizando o Método da Potência [3]. Tal método procede de forma iterativa que atualiza o fluxo escalar e o K_{eff} a cada nova iteração até que ambos converjam. O método segue os passos a seguir:

1) Estimativa inicial para $\phi_1^{[1]}$, $\phi_2^{[1]}$ e $K_{eff}^{[1]}$;

2) Resolução da equação (2) de forma analítica;

3) Atualização do K_{eff} conforme $K_{eff}^{[i+1]} = K_{eff}^{[i]} \cdot \frac{\int_0^L S^{[i+1]} dx}{\int_0^L S^{[i]} dx}$;

4) Critério de parada da convergência dado por $\frac{|K_{eff}^{[i]} - K_{eff}^{[i-1]}|}{|K_{eff}^{[i]}|} < \epsilon_1$ e $\frac{|S^{[i]} - S^{[i-1]}|}{|S^{[i]}|} < \epsilon_2$.

Ao aplicar o método da potência na equação (2), a cada nova iteração, na expressão da fonte S , surge um novo termo resultante da solução da equação diferencial de 2ª ordem.

Assim quanto mais iterações sejam necessárias para obter a convergência da solução, mais novos termos aparecem. A estrutura dessa solução para cada grupo de energia é dado por:

$$\phi_g(x) = c_1 - c_2 \cosh(\sqrt{ax}) + c_3 x \sinh(\sqrt{ax}) - c_4 x^2 \cosh(\sqrt{ax}) + c_5 x^3 \sinh(\sqrt{ax}) - \dots, \quad (4)$$

onde $a = \frac{\sum^{(r)} Rg}{D_g}$ e as constantes arbitrárias se atualizam a cada iteração.

Procedendo desta maneira a implementação computacional torna-se inviável, devido a necessidade de um grande esforço algébrico. Pensando em uma forma de eliminar este problema, propõe-se que a partir da primeira iteração os pontos sejam interpolados, para assim conseguir um padrão que se repetiria em todas as iterações. Porém, neste processo ocorre um novo problema, quando a placa é muito longa, no processo da interpolação, $(\mathbf{Ax} = \mathbf{B})$, surge uma matriz de Vandermonde que é quase singular. Para eliminar esta singularidade, divide-se o domínio em quantas sub-regiões sejam necessárias (Figura 2a) para que a matriz de inversão não seja singular. Como estas sub-regiões não fazem parte do problema proposto, denominam-se de regiões fictícias, e sua quantidade é representada pela letra R . Cabe ressaltar que, para um problema multirregião, deve-se cuidar para que todas as fronteiras reais coincidam com as fictícias. O próximo passo para eliminar a singularidade é deslocar todas elas para a primeira região fictícia (Figura 2b).

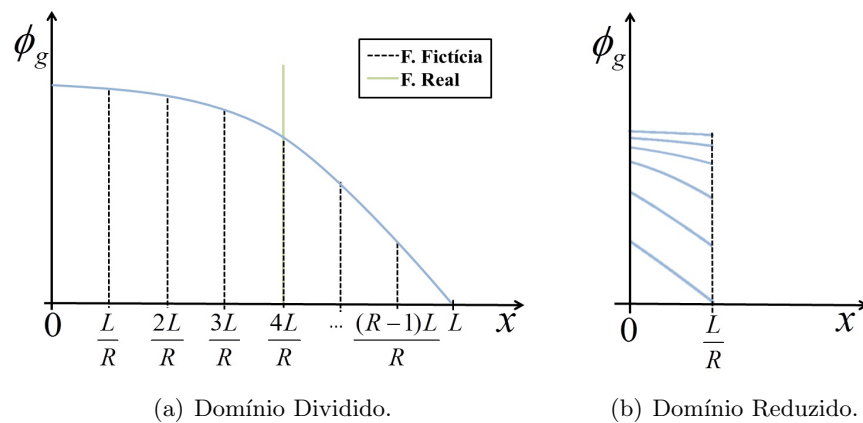


Figura 1: Representação de regiões fictícias.

Com a redução do domínio, pode-se interpolar os pontos para cada uma das regiões fictícias e grupos de energia. Considerando que haja n pontos em cada uma das regiões, a ordem máxima do polinômio deve ser de $(n - 1)$. O fluxo de cada uma das regiões é reconstruído para cada nova iteração da seguinte forma para cada grupo de energia e região R como:

$$\psi_{R,g} = c_1^* + c_2^* x + c_3^* x^2 + \dots + c_n^* x^{n-1}. \quad (5)$$

Com o domínio dividido por regiões, resolve-se a Equação (2) localmente aplicando as condições de contorno, continuidade de fluxo e de densidade corrente nas interfaces dadas por (3) para acoplar as soluções das regiões. Assim obtém-se um sistema de $2R$

incógnitas (provindas da solução homogênea da equação diferencial de segunda ordem) com $2R$ equações, para cada grupo de energia, sendo que as dimensões destas matrizes independem da quantidade de grupos. Uma vez resolvido esse sistema linear via fatoração QR, onde \mathbf{Q} é uma matriz ortogonal e \mathbf{R} é uma matriz triangular superior, obtém-se a nova expressão do fluxo para cada região fictícia e grupo de energia, dado por:

$$\psi_{Rg}^*(x) = c_{1R}e^{\sqrt{ax}} + c_{2R}e^{-\sqrt{ax}} + t_1 + t_2x + t_3x^2 + \dots + t_nx^{n-1}, \quad (6)$$

na qual ψ_{Rg}^* é o novo fluxo para a região fictícia R e grupo de energia g , com t constantes arbitrárias conhecidas.

3 Resultados Numéricos

Para a implementação computacional da metodologia proposta foi utilizado o *software* Scilab em um computador pessoal com 16 GB de memória *Ram*, processador *Core i7* e sistema operacional *Windows*. Realizaram-se 2 casos testes para a comparação dos resultados. A referência de Silva(2012) [8], que utiliza o método nodal de malha grossa e em seguida reconstrói o fluxo empregando a solução analítica da equação de Helmholtz, foi utilizada para comparação do K_{eff} . Para fins de comparação do tempo computacional a referência de Ceolin(2014) [1], que utiliza a expansão do fluxo em série de Taylor e polinômios de baixa ordem, foi implementada e executada utilizando-se o mesmo *software*, mesma configuração de máquina e critério de parada. Cabe ressaltar que em cada metodologia foi utilizado um diferente Δx , pois o objetivo é alcançar a convergência do problema com o menor tempo computacional, independentemente da malha utilizada. Para obtenção dos resultados numéricos apresentados com o MPFF foi utilizado interpolação polinomial de quarto grau e critérios de parada $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-10}$. Além disso, foi considerado dois grupos de energia: rápido ($g = 1$) e térmico ($g = 2$) sem *up-scattering* ($\Sigma_{s21} = 0$).

- **Caso Teste 1.** Dois grupos de energia e uma região.

Para este caso teste tem-se: $-50 \leq x \leq 50$; condições de contorno de fluxo nulo ($\phi(-50) = 0$, $\phi(50) = 0$) e parâmetros nucleares conforme Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros Nucleares Caso Teste 1.

g	D_g	Σ_{Rg}	$\nu\Sigma_{fg}$	$\Sigma_{sg'g}$
1	1,438	0,02935	0,000242	0,0000
2	0,3976	0,1049	0,155618	0,01563

Os autovalores dominantes (K_{eff}) para Caso Teste 1 encontrados são: **MPFF** = **0,7586314** com $\Delta x = 0,5\text{cm}$, Silva(2012) = 0,7586362 e Ceolin(2014) = 0,758630 com $\Delta x = 1\text{cm}$. Pode-se observar uma precisão de 5 casas com a referência adotada para fins de comparação, o que sugere uma excelente concordância para cálculos globais em

física de reatores. Os tempos computacionais para o Caso Teste 1 são: **MPFF = 2,1s** e Ceolin(2014) = 66,3s. Pode-se notar um ganho computacional de aproximadamente 31 vezes com relação a referência adotada para fins de comparação. Como ilustração o fluxo escalar de nêutrons (rápido e térmico) pode ser observado na Figura 2a. Percebe-se a satisfação das condições de contorno e um fluxo máximo no centro do domínio.

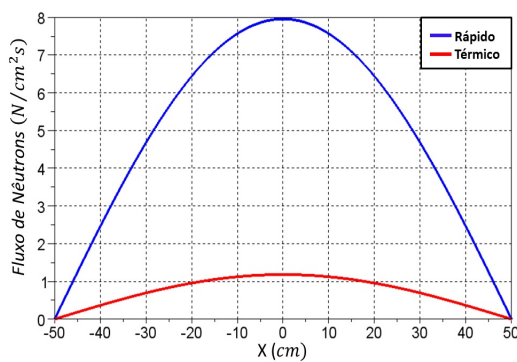
- **Caso Teste 2.** Dois grupos de energia e duas regiões.

Este caso teste é um problema clássico núcleo-refletor, com domínio: $0 \leq x \leq 50$, condições de contorno reflexiva e fluxo zero, $\frac{d}{dx}\phi(0) = 0$ e $\phi(50) = 0$, interface real em $x = 30$ e parâmetros nucleares conforme Tabela 2.

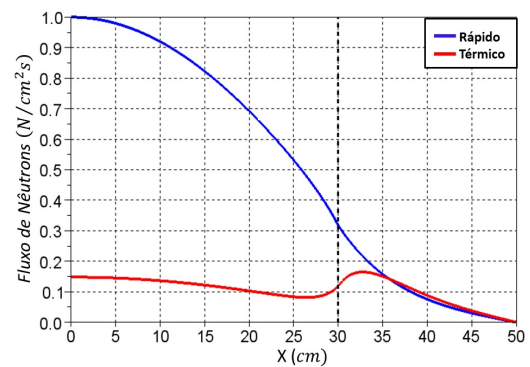
Tabela 2: Parâmetros Nucleares Caso Teste 2.

Região	D_1	D_2	Σ_{R1}	Σ_{R2}	$\nu\Sigma_{f1}$	$\nu\Sigma_{f2}$	Σ_{s12}
1	1,438	0,3976	0,02935	0,10490	0,000242	0,155618	0,01563
2	1,87142	0,283409	0,035411	0,031579	0	0	0,034340

Os autovalores dominantes (K_{eff}) encontrados para Caso Teste 2 são: **MPFF = 0,734919** com $\Delta x = 0,5cm$, Silva(2012) = 0,7346988 e Ceolin(2014)= 0,734476 com $\Delta x = 2cm$. Pode-se observar uma precisão de 3 casas com a referência adotada para fins de comparação, o que sugere uma boa concordância. Os tempos computacionais são **MPFF = 1,8s** e Ceolin(2014) = 7,8s. Pode-se notar um ganho computacional de aproximadamente 4 vezes com relação a referência adotada para fins de comparação. Como ilustração a Figura 2b apresenta o fluxo escalar de nêutrons que está normalizado pelo valor máximo do fluxo rápido, que está na origem, conforme referência adotada. Percebe-se a satisfação das condições de contorno e um pequeno aumento do fluxo térmico logo após a região combustível-refletor ($x = 30cm$), que é devido a contribuição do termo de espalhamento na equação do fluxo térmico.



(a) Caso Teste 1.



(b) Caso Teste 2.

Figura 2: Distribuição do fluxo escalar no domínio.

4 Conclusões

O controle da população de nêutrons em um reator nuclear é fundamental para a eficiência energética e segurança nas operações, por isto a importância deste estudo. O MPFF mostra-se eficiente na solução do problema por apresentar fácil implementação, baixo custo computacional e por possuir resolução analítica em cada região fictícia. A principal ideia desta metodologia é acoplar um método iterativo de fonte com a resolução de um problema de autovalor por métodos clássicos, reconstruindo o fluxo de nêutrons através de uma interpolação polinomial. Nota-se que a metodologia proposta apresenta boa concordância com os resultados da literatura, o que sugere que esta técnica seja promissora para solucionar problemas mais realísticos em física de reatores como, por exemplo, em trabalhos futuros para problemas multidimensionais transientes.

Referências

- [1] C. Ceolin, M. Schramm, B. E. J. Bodmann, M. T. Vilhena and S. de Q. B. Leite. On an analytical evaluation of the flux and dominant eigenvalue problem for the steady state multi-group multi-layer neutron diffusion equation. *Kerntechnik*, 79:430-435, 2014.
- [2] G. Chiba, M. Tsuji and Y. Shimazu. Development of the hierarchical domain decomposition boundary element method for solving the three-dimensional multiregion neutron diffusion equations. 2001. *Journal of Nuclear Science and Technology* , 38[8], pp.664-673.
- [3] J. J. Duderstadt and L. J. Hamilton. Nuclear Reactor Analysis. John Wiley, New York, 1976.
- [4] C. M. Kang and K. F. Hansen. Finite Element Methods for Reactor Analysis. Nuclear Science and Engineering , volume 51, pages 456-495, 1973.
- [5] R. D. Lawrence. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. Progress in Nuclear Energy 17, 271. 1986.
- [6] R. S. M. Lemos. Solução analítica das equações difusivas da teoria geral de perturbação pelo método da Transformada de Laplace , Tese de Doutorado, UFRGS, 2005.
- [7] C. Z. Petersen, C. Ceolin, M. Schramm, M. T. M. B. de Vilhena e B. E. J. Bodmann. Solução da Equação de Difusão de Nêutrons em Geometria Retangular pela Técnica da Diagonalização de Matrizes. In: *Congresso Ibero-Latino-Americana de Métodos Computacionais em Engenharia (XXXI CILAMCE)*,29:2475-2482, Buenos Aires. Argentina, 2010.
- [8] A. C. da Silva, A. S. Martinez and A. da C. Gonçalves. Reconstruction of the Neutron Flux in a Slab Reactor. World Journal of Nuclear Science and Technology, pages 181-186, 2012.