

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Simulações para equação do transporte unidimensional utilizando o método de Nyström

Debora Dalmolin¹

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Fabio Souto de Azevedo²

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Esequia Sauter³

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Resumo. Neste trabalho resolvemos numericamente a equação de transporte estacionária em um meio partipativo com fontes internas, fronteira semi-reflectiva e domínio unidimensional. Implementamos o método de Nyström para resolver a formulação integral desta equação de transporte, isto é, quando ela está escrita na forma de uma equação de Fredholm do segundo tipo. Depois de removermos as singularidades dos operadores, testamos algumas quadraturas numéricas, tais como as regras de Boole e Gauss-Legendre. Comparamos nossos resultados numéricos com aqueles que podem ser encontrados na literatura.

Palavras-chave. Equação de transporte unidimensional, Formulação integral, Método de Nyström

1 Introdução

A equação do transporte descreve a distribuição de partículas, tais como nêutrons, fótons, moléculas ou ondas eletromagnéticas, considerando o movimento e a interação com o meio. O estudo de reatores nucleares, transporte de radiação, dinâmica de gases rarefeitos e resfriamento de vidro são alguns exemplos de aplicações da equação transporte.

Essa equação integro-diferencial é uma versão linear da equação inicialmente desenvolvida por Ludwig Boltzmann em 1872 no contexto de teoria cinética dos gases [4]. Em geral, a equação depende de sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma de energia e uma variável temporal [6]. A complexividade das condições de contorno e o número de variáveis que definem o problema impossibilitam o cálculo de soluções

¹deborasdalmolin@hotmail.com

²fabio.azevedo@ufrgs.br

³esequia.sauter@ufrgs.br

analíticas, exceto em casos bem particulares. Assim, o uso de abordagens numéricas se fazem necessárias para o cálculo de soluções.

Os métodos integrais são exemplos de métodos determinísticos, que transformam a equação do transporte integro-diferencial em uma equação de Fredholm do segundo tipo. Dentre os métodos integrais destacamos aqui o método de Nyström, introduzido por Evert Johannes Nyström em 1930. A ideia do método de Nyström é substituir o operador integral por um esquema numérico de quadratura e produzir um sistema de equações algébricas a serem resolvidas.

O método de Nyström está bem estabelecido para solução de equações integrais e permite uma combinação entre eficiência e precisão. Alguns resultados já foram publicados utilizando essa metodologia em geometria unidimensional [5] e bidimensional [3]. Neste trabalho, consideramos equação de transporte linear de nêutrons em geometria cartesiana unidimensional em um meio homogêneo para o caso estacionário, com simetria e espalhamento isotrópico, isto é:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t \Psi(x, \mu) = \sigma_s \Phi(x) + S(x), \quad (1)$$

onde

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu', \quad (2)$$

é o fluxo escalar, $0 \leq x \leq L$ é a variável espacial, μ é o cosseno do ângulo formado entre a direção de propagação e o eixo x e $S(x)$ é o termo fonte. A seção macroscópica total e a seção de choque de espalhamento são não negativos e denotados, respectivamente, por σ_t e σ_s . As condições de contorno são semi-reflectivas e dadas por:

$$\begin{aligned} \Psi(0, \mu) &= \rho_0(\mu) \Psi(0, -\mu) + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu), \quad \mu > 0 \\ \Psi(L, \mu) &= \rho_L(\mu) \Psi(L, -\mu) + (1 - \rho_L(\mu)) B_L(\mu), \quad \mu < 0 \end{aligned} \quad (3)$$

onde $B_0(\mu)$ e $B_L(\mu)$ representam as contribuições da fronteira, $0 \leq \rho_0 \leq 1$ e $0 \leq \rho_L \leq 1$ são os coeficientes de reflexão.

Aplicando o método das características [9] na equação (1), onde tomamos o lado direito como $Q(x) = \sigma_s \Phi(x) + S(x)$ e utilizando as condições de contorno (3), obtemos a seguinte representação funcional para o fluxo escalar $\Phi(x)$:

$$\Phi(x)(x) = (L_g Q)(x) + (L_b B)(x), \quad (4)$$

onde L_g é o operador integral dado por:

$$L_g Q(x) = \int_0^L k(x, s) Q(s) ds, \quad (5)$$

e o núcleo $k(x, s)$ é expresso, da seguinte forma:

$$k(x, s) = \int_0^1 \frac{1}{2\mu} \left[\frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{\sigma_t(s+x)}{\mu}} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{\sigma_t(-s+2L+x)}{\mu}}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2\sigma_t L}{\mu}}} + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{\sigma_t(2L+s-x)}{\mu}} + \rho_L(-\mu)e^{-\frac{\sigma_t(2L-s-x)}{\mu}}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2\sigma_t L}{\mu}}} + e^{-\frac{\sigma_t |s-x|}{\mu}} \right] d\mu. \quad (6)$$

Seja o operador $L_b : (L^\infty[0, 1])^2 \rightarrow C^0[0, L]$ que mapeia a função vetorial $B(\mu) = [B_0(\mu), B_L(\mu)]$ na função definida por:

$$(L_b B)(x) = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\rho_L(-\mu)(1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{\sigma_t L}{\mu}} + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{\sigma_t(x-L)}{\mu}}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2\sigma_t L}{\mu}}} d\mu + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\rho_0(\mu)(1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{\sigma_t L}{\mu}} + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{\sigma_t x}{\mu}}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2\sigma_t L}{\mu}}} d\mu. \quad (7)$$

Observe que tomamos $Q(x) = \sigma_s \Phi(x) + S(x)$ e escrevemos $\Phi(x) = (L_g Q)(x) + (L_b B)(x)$. Substituindo $Q(x)$ em $\Phi(x)$, desde que Ψ possa ser calculado de Φ , resolver o problema (1) - (3) equivale a resolver a seguinte equação integral para $\Phi(x)$:

$$(1 - \sigma_s L_g)\Phi(x) = (L_g S)(x) + (L_b B)(x). \quad (8)$$

A equação (8) pode ser resolvida sempre que o operador $(1 - \sigma_s L_g)$ puder ser invertido (ver [8]). As estimativas para a norma do operador L_g foram calculadas em [1] nos espaços $C^0[0, L]$ e $C^\alpha[0, L]$, para fontes $C^0[0, L]$ e $C^\alpha[0, L]$, respectivamente.

2 Método de Nyström

Nesta seção, apresentamos a implementação numérica para resolver a problema 1 - 3 que é equivalente a resolver a seguinte equação integral para $\Phi(x)$:

$$\Phi(x) = \sigma_s \int_0^L k(x, s)\Phi(s)ds + \int_0^L k(x, s)S(s)ds + (L_b B)(x), \quad (9)$$

onde $k(x, s)$ é expresso em (6).

A equação (9) é uma equação integral linear de Fredholm do segundo tipo que pode ser resolvida numericamente pelo método de Nyström. Primeiramente, lidamos com singularidade na diagonal $x = s$ (quando $x = s$ e μ tende a zero) aplicando a técnica de subtração de singularidades [10] para o operador L_g :

$$(L_g q)(x) = \int_0^L k(x, s)[q(s) - q(x)]ds + \int_0^L k(x, s)q(x)ds. \quad (10)$$

Assim, a equação (9) assume a seguinte forma:

$$\Phi(x) = \sigma_s \int_0^L k(x, s)[\Phi(s) - \Phi(x)]ds + \sigma_s \int_0^L k(x, s)ds\Phi(x) + g(x), \quad (11)$$

onde $g(x)$ representa simultaneamente a contribuição da fonte e da fronteira, isto é, $g(x) = (L_g S)(x) + (L_b B)(x)$ e $L_g S$ tem a remoção de singularidade similar (10).

O primeiro termo da direita da equação (10) é limitado em torno de $x = s$, garantindo um bom desempenho de quadraturas numéricas para esse termo e, o segundo termo terá sua singularidade integrada analiticamente. Reescrevemos a equação (11) como:

$$\Phi(x) = \sigma_s \int_0^L k(x, s)[\Phi(s) - \Phi(x)]ds + \sigma_s R(x)\Phi(x) + g(x),$$

onde $R(x) = \int_0^L k(x, s)ds$.

Aplicando o método de Nyström na equação acima para discretizar o operador integral envolvido, obtemos:

$$\Phi(x) \approx \sigma_s \sum_{j=1, s_j \neq x}^N w_j k(x, s_j)[\Phi(s_j) - \Phi(x)] + \sigma_s R(x)\Phi(x) + g(x), \quad (12)$$

onde $\{w_j\}_{j=1}^N$ são pesos e $\{s_j\}_{j=1}^N$ abscissas de um esquema de quadratura numérica.

2.1 Cálculo do Fluxo Escalar

Avaliando a equação (12) nos pontos que estão na quadratura, podemos escrever para $i = 1, \dots, N$:

$$\Phi(x_i) \approx \sigma_s \sum_{j=1, i \neq j}^N w_j k(x_i, s_j)[\Phi(s_j) - \Phi(x_i)] + \sigma_s R(x_i)\Phi(x_i) + g(x_i). \quad (13)$$

Para simplificar a notação, definimos $\mathcal{K}_{ij} = k(x_i, s_j)$, $g_i = g(x_i)$ e $R_i = R(x_i)$, sendo Φ_i uma aproximação para $\Phi(x_i)$. Assim, chegamos ao sistema algébrico:

$$\Phi_i = \sigma_s \sum_{j=1, j \neq i}^N w_j \mathcal{K}_{ij}[\Phi_j - \Phi_i] + \sigma_s R_i \Phi_i + g_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (14)$$

que pode ser escrito na forma matricial conforme:

$$\begin{bmatrix} 1 + \sigma_s \sum_{l \neq 1} w_l \mathcal{K}_{1l} - \sigma_s R_1 & -\sigma_s w_2 \mathcal{K}_{12} & \cdots & -\sigma_s w_N \mathcal{K}_{1N} \\ -\sigma_s w_1 \mathcal{K}_{21} & 1 + \sigma_s \sum_{l \neq 2} w_l \mathcal{K}_{2l} - \sigma_s R_2 & \cdots & -\sigma_s w_N \mathcal{K}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\sigma_s w_1 \mathcal{K}_{N1} & -\sigma_s w_2 \mathcal{K}_{N2} & \cdots & 1 + \sigma_s \sum_{l \neq N} w_l \mathcal{K}_{Nl} - \sigma_s R_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix}. \quad (15)$$

O processo descrito acima produz as aproximações do fluxo escalar Φ_i para um conjunto de N pontos que estão na malha de uma quadratura. No entanto, para os pontos que não estão na malha obtemos uma interpolação para o fluxo escalar a partir da equação (12) da seguinte forma:

$$\Phi(x) \approx \frac{\sigma_s \sum_{j=1, s_j \neq x}^N w_j k(x, s_j) \Phi(s_j) + g(x)}{1 + \sigma_s \sum_{j=1, s_j \neq x}^N w_j k(x, s_j) - \sigma_s R(x)}. \quad (16)$$

3 Resultados Numéricos

Os algoritmos que usamos para resolver o problema numérico foram implementados na linguagem de programação C, utilizamos a integração numérica da *GNU Scientific Library*. Também utilizamos algoritmos de precisão múltipla para quadratura numérica no *software Maple 15* para reproduzir alguns resultados obtendo valores de alta qualidade para validar nosso código.

Nas Tabelas 1 - 3 apresentamos as comparações pontuais dos nossos resultados para o fluxo escalar com aqueles publicados por Ganapol [7] usando o método *CASN*, Vargas *et al.* [11] produzido pelo método *LTS_N* com $N = 300$ e Azevedo *et al.* [2] produzido pelo método *GFD*. Essas comparações mostram o bom desempenho do nosso método tanto para domínio pequeno $L = 0.10$ quanto para domínio grande $L = 100$. Na Tabela 1 obtemos com $N = 100$ sete dígitos de precisão comparando com *CASN* e *GFD* e até cinco dígitos com *LTS₃₀₀*. Na Tabela 2 obtemos até sete dígitos comprando com os métodos *CASN*, *LTS₃₀₀* e *GFD* com $N = 800$. Nós observamos aqui a dificuldade de se obter resultados precisos para problemas onde o domínio é grande. Na Tabela 3 comparamos nossos resultados com o método *GFD* e conseguimos uma convergência de seis dígitos significativos, apresentando desempenho melhor que os resultados da literatura.

Table 1: Gauss-Legendre. Comparação entre os valores calculados para o fluxo escalar Φ onde os parâmetros são $\rho_0 = \rho_L = 0$, $B_0 = B_L = 1.0$, $\sigma_t = \sigma_s = 1$, $L = 0.10$ e $S(x) = \exp(-x)$ com os resultados publicados por Ganapol [7] (ver [2]), Vargas *et al.* [11] e Azevedo *et al.* [2].

x	CASN	LTS ₃₀₀	GFD ₄₀₀	N=100	N=200	N=400	N = 800
0.00	2.317444	2.317428	2.317444	2.31744420	2.31744420	2.31744420	2.31744420
0.02	2.373155	2.373237	2.373154	2.37315492	2.37315474	2.37315476	2.37315476
0.04	2.390886	2.390864	2.390886	2.39088641	2.39088647	2.39088647	2.39088646
0.06	2.388975	2.388963	2.388975	2.38897528	2.38897537	2.38897536	2.38897535
0.08	2.368116	2.368189	2.368115	2.36811587	2.36811569	2.36811570	2.36811570
0.10	2.312675	2.312669	2.312675	2.31267537	2.31267537	2.31267537	2.31267537

Table 2: Gauss-Legendre. Comparação entre os valores calculados para o fluxo escalar Φ onde os parâmetros são $\rho_0 = \rho_L = 0$, $B_0 = B_L = 1.0$, $\sigma_t = \sigma_s = 1$, $L = 10$ e $S(x) = \exp(-x)$ com os resultados publicados por Ganapol [7] (ver [2]), Vargas *et al.* [11] e Azevedo *et al.* [2].

x	CASN	LTS_{300}	GFD_{800}	N=200	N=400	N=800	N = 1600	N = 3200
0	5.306414	5.306007	5.306226	5.3064184	5.3064146	5.3064141	5.3064141	5.3064141
2	9.104506	9.104450	9.104379	9.1045576	9.1045124	9.1045055	9.1045050	9.1045056
4	7.846664	7.846619	7.846563	7.8464516	7.8465711	7.8466881	7.8466589	7.8466648
6	6.145113	6.145074	6.145039	6.1453666	6.1452168	6.1450877	6.1451189	6.1451125
8	4.387136	4.387110	4.387089	4.3870415	4.3871241	4.3871386	4.3871393	4.3871372
10	2.509092	2.509086	2.509068	2.5090873	2.5090914	2.5090919	2.5090920	2.5090920

Table 3: Gauss-Legendre. Comparação entre os valores calculados para o fluxo escalar Φ onde os parâmetros são $\rho_0 = \rho_L = 0$, $B_0 = 1.0$, $B_L = 0$, $\sigma_t = \sigma_s = 1$, $L = 100.0$ e $S(x) = \exp(\frac{-x^2}{4})$ com os resultados publicados por Vargas *et al.* [11] and Azevedo *et al.* [2].

x	LTS_{300}	GFD_{3200}	N=800	N=1600	N=3200	N=6400	N=12800
0	8.42592	8.443685	8.4496545	8.4496350	8.4496325	8.4496322	8.4496322
20	16.9490	16.945922	16.952232	16.951756	16.951746	16.951759	16.951757
40	12.7473	12.746721	12.752013	12.751032	12.751148	12.751131	12.751124
60	8.54702	8.547520	8.5496200	8.5505802	8.5504609	8.5504778	8.5504850
80	4.34782	4.348319	4.3494016	4.3498556	4.3498631	4.3498496	4.3498517
100	0.121203	0.121160	0.12123888	0.12125894	0.12126152	0.12126185	0.12126189

4 Conclusão

Neste trabalho nós apresentamos os resultados numéricos para o problema de transporte unidimensional. O algoritmo foi produzido aplicando o método de Nyström à versão integral da equação de transporte e removendo singularidades dos operadores envolvidos. Fizemos testes com alguns esquemas de quadratura, sendo Gauss-Legendre mais eficientes em todos os nossos experimentos numéricos. O código mostrou-se eficiente visto que a convergência esta assegurada mesmo quando o domínio é grande. Essa metodologia numérica tem a vantagem de permitir resolver o problema para diferentes fontes com apenas uma multiplicação matricial. Também, a técnica pode ser estendida para problemas mais complexos, tais como bidimensional e tridimensional.

Agradecimentos

Debora Dalmolin agradece o suporte pela bolsa de doutorado do CNPq (Brasil).

References

- [1] F. S. de Azevedo, E. Sauter, M. Thompson and M. T. Vilhena. Existence theory and simulations for one-dimensional radiative flows, *Annals of Nuclear Energy*, 38:1115–

- 1124, 2011. DOI: 10.1016/j.anucene.2010.12.014.
- [2] F. S. de Azevedo, E. Sauter, M. Thompson and M. Vilhena. Solution of the radiative heat transfer equation with internal energy sources in a slab by the Green's Functions Decomposition Method for anisotropic scattering, *Progress in Nuclear Energy*, 65:64–69, 2013. DOI: 10.1016/j.pnucene.2013.02.006.
- [3] F. S de Azevedo, E. Sauter, P. H. A. Konzen, M. Thompson, and L. B. Barichello,). Integral formulation and numerical simulations for the neutron transport equation in XY geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 112: 735–747, 2018. DOI: 10.1016/j.anucene.2017.10.017.
- [4] L. Boltzmann. *Lectures on gas theory, english edition annotated by S. Brush*. University of California Press, Berkeley, 1964.
- [5] D. Dalmolin, F. S de Azevedo and E. Sauter. Nyström Method in transport theory. In *Proceeding in: XX Meeting on Nuclear Reactor Physics and Thermal Hydraulics (XX ENFIR)*, Belo Horizonte, MG.Brazil, 2017.
- [6] J. J. Duderstadt, W. R. Martin. *Transport Theory*. New York, 1979.
- [7] B. Ganapol, 2013. Comunicação Privada. (ver [2])
- [8] P. Lax. *Functional Analysis*. Wiley Inter-Science. New York. 2002.
- [9] M. F. Modest. *Radiative heat transfer*. Academic Press, San Diego, 2003.
- [10] W. H. Press , S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007.
- [11] R. Vargas, C. Segatto e M. Vilhena. Solution of the radiative heat transfer equation with internal energy sources in a slab by the Itsn method, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 105:1-7, 2007. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2006.10.009.