

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

ANÁLISE DA PERFORMANCE DE METODOLOGIAS NUMÉRICAS DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL SLAB NA FORMULAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS

Rafael Barbosa Libotte - rafaellibotte@hotmail.com

Hermes Alves Filho - halves@iprj.uerj.br

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico – Nova Friburgo, RJ, Brazil

Resumo. São abordadas neste trabalho duas estratégias numéricas de solução da equação de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas (S_N), através do MED, c.f., Método Espectral Determinístico, com intuito de avaliar a precisão dos resultados, considerando o tempo de processamento dos problemas simulados em cálculos de blindagem de nêutrons (fonte-fixa). Os problemas foram modelados em sua forma unidimensional, estacionária, considerando meios não-multiplicativos, com espalhamento isotrópico e um grupo de energia. Todos os resultados foram desenvolvidos e obtidos em um aplicativo computacional feito na linguagem JAVA versão 1.8.0_91, e validados utilizando o método de malha fina DD, c.f., Diamond Difference e o método de malha grossa SGF, c.f., spectral Green's function.

Palavras-chave: Teoria de transporte de partículas neutras, Modelagem computacional determinística, Física de reatores nucleares, Ordenadas discretas, Cálculos de fonte-fixa

1. INTRODUÇÃO

Nos dias de hoje, observa-se a necessidade de otimização no desenvolvimento de códigos computacionais, com o intuito de gerar resultados que sejam precisos com um menor custo computacional, uma vez que problemas modelados de forma mais eficiente, apresentam na prática uma maior visibilidade científica. Assim, a modelagem computacional determinística de problemas envolvendo cálculos de blindagem de nêutrons (fonte-fixa) tem sido realizada de forma mais eficaz, considerado um problema de grande impacto na sociedade atual.

A equação que modela o transporte de nêutrons na sua formulação determinística parte da equação linearizada de Boltzmann utilizada em cinética de gases, como descrita em Duderstadt & Hamilton (1976). Esta equação é integro-diferencial e possui algumas hipóteses simplificadoras, considerando que os nêutrons não interagem entre si e suas interações não alteram a estrutura do meio hospedeiro. A variável dependente desta equação, definida como fluxo angular de nêutrons, apresenta 7 variáveis independentes, sendo três espaciais, duas angulares, uma temporal e uma energética.

A solução analítica ou numérica desta equação é de alta complexidade e requer grande capacidade computacional para que se obtenha resultados mais realísticos das simulações. Para isso, algumas formulações devem ser utilizadas. Neste trabalho, são abordados problemas monoenergéticos, unidimensionais nos quais a variável espacial foi tratada com o método de malha fina *DD*, c.f. *Diamond Difference* (Lewis & Miller, 1993) e os métodos nodais (malha grossa), como o *MED*, c.f. Método Espectral Determinístico (Oliva et al., 2018) e o *SGF*, c.f. *spectral Green's function* (Barros et al., 1998), a variável angular foi avaliada fazendo uso do método das ordenadas discretas (S_N) descrita em Lewis & Miller (1993).

Aqui, propomos a investigação de dois esquemas iterativos para o cálculo do fluxo angular de nêutrons, usando o método *MED*, avaliando as performances computacionais de cada um destes esquemas. Além disto, investigamos o tempo de *CPU* na resolução de problemas de blindagem de nêutrons.

As modelagens computacionais das simulações e seus respectivos resultados foram implementados e validados em um aplicativo computacional, construído em linguagem JAVA versão 1.8.0_91. Os resultados gerados pelas duas estratégias numéricas de solução do *MED* foram comparados com os obtidos nos métodos *SGF* e *DD*.

A seguir é descrito de forma sucinta o conteúdo do trabalho. Na seção 2 é apresentada a modelagem matemática das equações S_N usando o método espectro nodal *MED*. Na seção 3 são apresentados os esquemas iterativos para a solução das equações S_N discretizadas na variável espacial. A seção 4 apresenta os resultados numéricos para um problema-modelo. Por fim, na seção 5 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA DA EQUAÇÃO S_N

A equação de transporte de nêutrons, considerando um domínio unidimensional de comprimento H (Figura 1), espalhamento isotrópico, estacionária e um grupo de energia, na formulação de ordenadas discretas, tem a seguinte forma (Lewis & Miller, 1993)

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_T(x) \psi_m(x) = \frac{\sigma_{S0}(x)}{2} \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n + Q(x), \quad m = 1 : N \quad (1)$$

onde, $\sigma_T(x)$ representa a seção de choque macroscópica total, $\sigma_{S0}(x)$ a seção de choque de espalhamento isotrópico e $Q(x)$ uma fonte isotrópica de nêutrons. Os termos μ_m e ω_m representam, as direções discretas da propagação das partículas neutras e os pesos da Quadratura de Gauss-Legendre de ordem N , respectivamente. A variável de interesse a ser estimada nesta equação é o fluxo angular de nêutrons, representado por $\psi_m(x)$.

A Eq. (1) possui condições de contorno prescritas na forma

$$\psi_m(x) = \begin{cases} f_m, & \text{se } x = 0 \text{ e } \mu_m > 0 \\ g_m, & \text{se } x = H \text{ e } \mu_m < 0, \end{cases} \quad m = 1 : N. \quad (2)$$

2.1 Análise espectral das Equações S_N

Considere agora a Eq. (1) em um nodo arbitrário Γ_j (discretização espacial) da grade Γ no domínio unidimensional de comprimento H , onde cada um destes nodos possui um comprimento h_j , como mostrado na Figura 1.

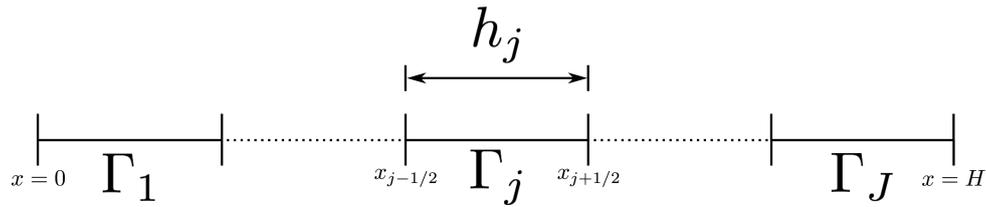


Figura 1- Representação do nodo Γ_j na grade espacial Γ

Assumindo que os parâmetros físico-materiais são constantes no nodo Γ_j arbitrário, a Eq. (1) assume a forma

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_{Tj} \psi_m(x) = \frac{\sigma_{S0j}}{2} \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n + Q_j, \quad m = 1 : N, \quad (3)$$

cuja solução analítica geral intranodal será dada por uma componente homogênea (h) e uma particular (p), como segue

$$\psi_m(x) = \psi_m^h(x) + \psi_m^p, \quad m = 1 : N, \quad (4)$$

onde a fonte Q_j é uniforme no interior do nodo Γ_j . Assim, a solução particular é denotada como

$$\psi_m^p = \frac{Q_j}{\sigma_{aj}}, \quad \sigma_{aj} = \sigma_{Tj} - \sigma_{S0j}. \quad (5)$$

Para obtermos a componente homogênea da Eq.(3), vamos considerar a expressão (de Abreu, 1996)

$$\psi_{m,\vartheta}^h(x) = a_m(\vartheta) e^{\frac{-\sigma_{Tj}(x-\delta)}{\vartheta}}, \quad m = 1 : N, \quad (6)$$

onde

$$\delta = \begin{cases} x_{j-1/2}, & \text{se } \vartheta > 0, \\ x_{j+1/2}, & \text{se } \vartheta < 0. \end{cases} \quad (7)$$

Assim, a exponencial presente na Eq. (6) sempre assumirá valores negativos, resultando numa maior estabilidade computacional dos problemas a serem simulados. Substituindo a Eq. (6) na parte homogênea da Eq. (3), obtêm-se o seguinte problema de autovalor

$$\sum_{n=1}^N \left\{ \left[\frac{\delta_{mn}}{\mu_m} - \frac{c_{0j}\omega_j}{2\mu_m} \right] \right\} a_n(\vartheta) = \frac{1}{\vartheta} a_m(\vartheta), \quad m = 1 : N, \quad (8)$$

onde $c_{0j} = \frac{\sigma_{S0j}}{\sigma_{Tj}}$ e δ_{mn} é o Delta de Krönerker.

A Equação (8) pode ser escrita na forma compacta como

$$Aa(\vartheta) = \frac{1}{\vartheta}a(\vartheta). \quad (9)$$

A matriz quadrada A possui dimensão $N \times N$. Da Eq. (9) são obtidos os autovalores que aparecem aos pares. Uma representação da distribuição destes autovalores ϑ , para um grau arbitrário N da quadratura de Gauss-Legendre, pode ser vista na Figura 2.

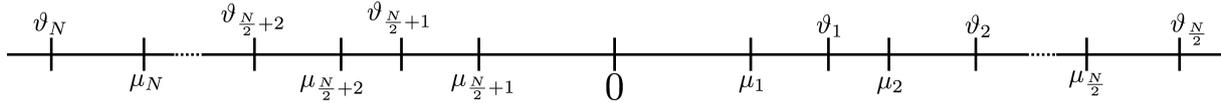


Figura 2- Representação dos autovalores ϑ

Para cada nodo arbitrário Γ_j , obtemos um conjunto linearmente independentes de N auto-funções $\psi_{m,\vartheta}(x)$. Assim, a solução geral intra-nodal pode ser obtida com

$$\psi_m(x) = \sum_{l=1}^N \alpha_l a_m(\vartheta_l) e^{\frac{-\sigma_{Tj}(x-\delta)}{\vartheta_l}} + \frac{Q_j}{\sigma_{aj}}, \quad m = 1 : N, \quad (10)$$

onde α_l é um parâmetro hipotético a ser determinado.

2.2 Método Espectral Determinístico (MED)

Nesta seção, vamos obter uma solução numérica intranodal para Eq. (3) representada pela Eq. (10), usando o *MED*. Este algoritmo computacional é arquitetado a partir do conhecimento dos fluxos incidentes nos contornos dos nodos nas posições $x = x_{j-1/2}$ e $x = x_{j+1/2}$, como visto na Fig. 1. Os valores da estimativa inicial do fluxo angular de nêutrons nos contornos são usados para o cálculo dos valores de α , usando a Eq. (10). Disposto destes valores, são calculados os fluxos angulares emergentes de cada nodo, usando também a Eq. (10). (Oliva et al., 2018)

Uma iteração é feita considerando o cálculo dos fluxos emergentes de todos os nodos da grade espacial partindo da posição $x = 0$ até alcançar a posição $x = H$, usando o procedimento descrito acima. O processo iterativo é realizado até que um critério de parada prescrito seja alcançado. O critério de parada utilizado neste trabalho estabelece que a norma máxima do desvio relativo percentual do vetor fluxo escalar $\vec{\phi}_j^k$, considerando duas iterações sucessivas tem que ser menor que um valor pré-estabelecido ξ (tolerância) e pode ser escrito da forma

$$\max_{j=1:J+1} \left| \frac{\phi_{j-1/2}^i - \phi_{j-1/2}^{i-1}}{\phi_{j-1/2}^{i-1}} \right| \times 100\% < \xi \quad (11)$$

onde i representa a iteração atual.

As componentes do vetor fluxo escalar $(\vec{\phi}_j^k)$ podem ser escritas considerando a expressão

$$\phi(x_{j-1/2}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \omega_n \psi_n(x_{j-1/2}). \quad (12)$$

3. Estratégias numéricas para a solução do problema discretizado

3.1 Estratégia numérica # 1 (Oliva et al., 2018)

Inicialmente, vamos considerar a representação vista na Figura 3. Aqui, os fluxos representados pelas setas pretas são conhecidos (condições de contorno) e os fluxos representados pelas setas verdes fazem parte da estimativa inicial do processo iterativo

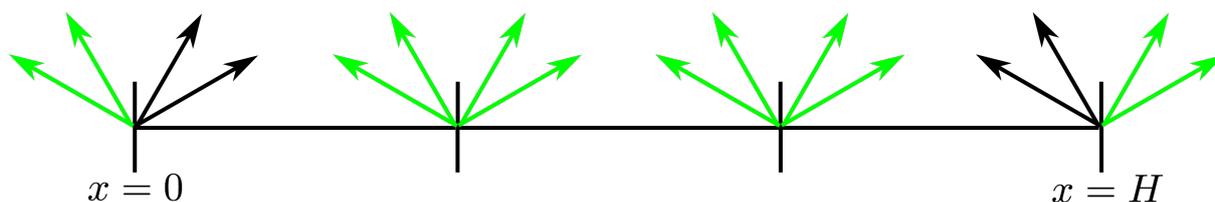


Figura 3- Grade espacial com 3 nodos

Partindo da posição $x = 0$, através dos fluxos incidentes no primeiro nodo (seta preta e seta verde), podemos obter os parâmetros α_l através da Eq. (10) e após este cálculo, estimar os fluxos emergentes também através da Eq. (10), setas em azul, conforme vista na Figura 4 (Oliva et al., 2018). Esta estratégia é realizada até a posição $x = H$, considerando o último nodo da grade espacial, finalizando uma iteração.

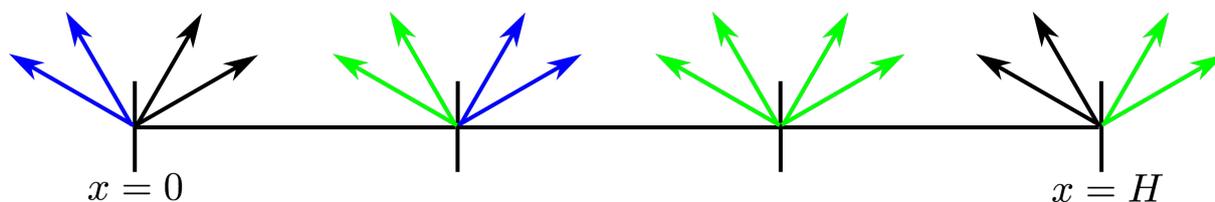


Figura 4- Estratégia numérica # 1

3.2 Estratégia numérica # 2 (Yavuz, 1995)

O início desta metodologia é feito de forma semelhante ao que foi realizado na estratégia numérica # 1, porém, aqui adotamos dois sentidos de varredura para o cálculo dos fluxos emergentes em função dos fluxos incidentes nos nodos. Para compreendermos a dinâmica deste cálculo neste processo iterativo, é preciso que se defina o conceito de varredura na grade de discretização espacial.

Definimos como referência as orientações esquerda (E) e direita (D). Assim, temos dois sentidos de varredura para a solução do problema: $E \rightarrow D$ ($\mu_m > 0$) e $D \rightarrow E$ ($\mu_m < 0$).

Partimos da posição $x = 0$, porém, só calculamos o fluxo emergente (seta azul) no contorno direito do nodo ($E \rightarrow D - \mu_m > 0$). Realizamos este procedimento até alcançarmos o último nodo referente à posição $x = H$, como visto na Figura 5

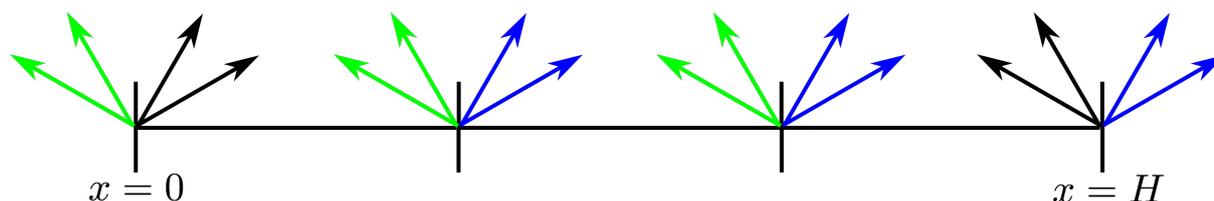


Figura 5- Processo de ida ($\mu_m > 0$)

A seguir, partindo do nodo na posição referente a $x = H$ ($E \rightarrow D - \mu_m < 0$), procedemos os cálculos dos fluxos angulares emergentes (setas azuis) no contorno esquerdo. Repetimos esta metodologia até alcançarmos o nodo referente à posição $x = 0$. Esta estratégia numérica do cálculo dos fluxos emergentes nos nodos, considerando os algoritmos de ida ($\mu_m > 0$) e da volta ($\mu_m < 0$) representa uma iteração para a estratégia # 2. Este procedimento é análogo ao que é realizado pelo método iterativo *SI* (*Source Iteration*) na solução das equações do método *DD*. (Lewis & Miller, 1993)

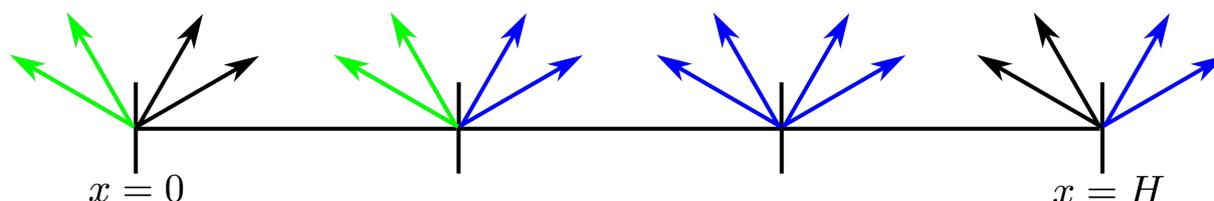


Figura 6- Processo de volta ($\mu_m < 0$)

4. Resultados numéricos

Foram realizadas algumas simulações para um problema-modelo onde foram avaliados os fluxos escalares de nêutrons usando as duas estratégias numéricas propostas neste trabalho. Além disto, implementamos os métodos *DD* (malha fina) e o método espectralnodal *SGF* (malha grossa) para validarmos os resultados obtidos pelo método *MED*. Computamos também os tempos de CPU destas simulações e o número total de iterações.

Com o intuito de se obter a média do tempo de execução dos processos iterativos (estratégias numéricas) foram realizadas várias simulações.

Para a validação dos resultados foi utilizado o problema-modelo representado na Figura 7. (Libotte et al., 2017), que possui 4 regiões, cada uma com 5 cm de espessura, e 4 zonas materiais. Os parâmetros neutrônicos (constantes em cada zona material), os valores das fontes-fixas e as condições de contorno deste problema-modelo também são mostrados na Figura 7. Usamos o grau de quadratura $N = 128$ para as simulações deste problema-modelo.

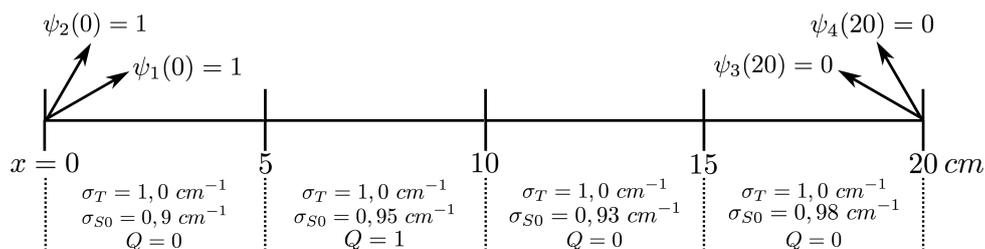


Figura 7- Problema modelo

Na Tabela 1 são mostrados os valores para o fluxo escalar de nêutrons, considerando as duas estratégias numéricas, usando *MED*, bem como os métodos *DD* e *SGF*. Na Tabela 2 são apresentados os valores e as relações do número total de iterações com o tempo total para execução do método.

Tabela 1- Fluxos Escalares ($\# / \text{cm}^2 \cdot \text{s}$) para o caso S_{128}

Método	0 cm	5 cm	10 cm	15 cm	20 cm
Estratégia # 1 ^a	0,97355406	7,06282338	7,69207906	0,97439537	0,07619481
Estratégia # 2 ^a	0,97355424	7,06282650	7,69208259	0,97439693	0,07619492
<i>SGF</i> ^a	0,97355424	7,06282650	7,69208259	0,97439693	0,07619492
<i>DD</i> ^b	0,97345262	7,06233671	7,69152764	0,97378354	0,07611926

^a 1 nodo por região

^b 100 nodos por região

Tabela 2- Tempo de execução (s)

Método	Tempo de 50 execuções	Média de tempo	Iterações	Tempo de Iteração
Estratégia # 1	6,7999931	0,1359999	15	0,0090666
Estratégia # 2	9,461772	0,1892354	15	0,0126156

Nas Figuras 8 e 9 é mostrado o tempo de cada execução realizada na composição dos resultados do problema-modelo apresentado. A linha preta no centro dos gráficos representa a média de tempo de execução das estratégias numéricas usadas e a linha azul representa um desvio padrão em relação à média das execuções.

Estratégia de solução #1

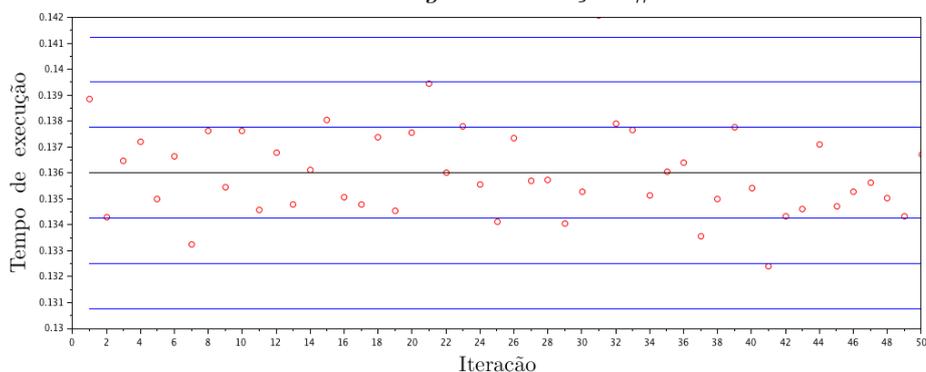


Figura 8- Tempo de cada execução na estratégia # 1

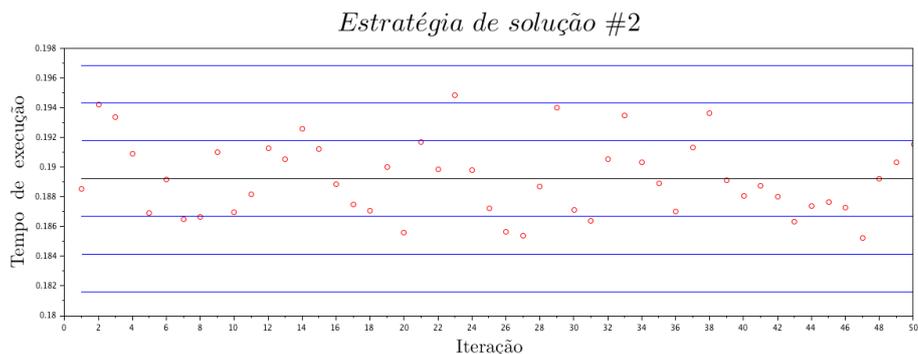


Figura 9- Tempo de cada execução na estratégia # 2

5. Conclusões

Neste trabalho foram apresentadas duas estratégias numéricas para a solução da equação de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas, considerando problemas unidimensionais, monoenergéticos e direcionados a cálculos de blindagem de nêutrons (fonte-fixa), usando o Método Espectral Determinístico (*MED*). Os resultados das simulações para o problema-modelo apresentado foram validados considerando o tradicional método de malha fina *DD* e o método nodal *spectral Green's function (SGF)*.

Os valores obtidos nas simulações para o problema-modelo apresentado mostram que a estratégia numérica # 1 tende a apresentar menores valores para o tempo de execução das simulações em relação à estratégia numérica # 2. Pretendemos a partir destes resultados simular outros problemas-modelo para verificarmos a eficiência destas estratégias numéricas.

No futuro, também pretendemos ampliar o uso destas metodologias para problemas unidimensionais com vários grupos de energia e grau arbitrário de anisotropia para o fenômeno de espalhamento.

O uso da plataforma JAVA no desenvolvimento do aplicativo computacional otimizou a implementação e a visualização dos resultados obtidos para o problema-modelo apresentado neste trabalho.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Laboratório de Modelagem Multi-escala e Transporte de Partículas (LabTran) do IPRJ/UERJ e à Faperj.

REFERÊNCIAS

- Lewis E.E. e Miller W.F.Jr. (1993), *Computational Methods of Neutron Transport*, American Nuclear Society, La Grange Park, Illinois.
- Barros, R.C., Yavuz, M., de Abreu, M.P., M. Mello, J.A. (1998), "Progress in Spectral Nodal Methods Applied to Discrete Ordinates Transport Problems", *Progress in Nuclear Energy*, Vol. 33, pp. 117-154.
- Duderstadt J.J., Hamilton L.J., (1976), "Nuclear Reactor Analysis", John Wiley & Sons, New York.
- Oliva, A.O., Filho, H.A., Martins e Silva, D.J., García Hernández, C. R., (2018). "The spectral nodal method applied to multigroup neutron transport problems in One-Dimensional geometry with Fixed-Source". *Progress in Nuclear Energy*, Vol. 105, pp. 106-113.

- Yavuz, M., (1995), "A One-D Simplified Discrete-Ordinates Method with No Spatial Truncation Error", *Annals on Nuclear Energy*, Vol. 22, pp. 203-2014.
- Libotte, R.B., Filho, H.A., Oliva, A.M., (2017) "Cálculos de Blindagem de Nêutrons Usando um Modelo Unidimensional de Transporte na Formulação de Ordenadas Discretas com Espalhamento Linearmente Anisotrópico e uma Velocidade", *INAC*, Belo Horizonte.
- de Abreu, M. P. (1996), "Métodos Determinísticos Livres de Aproximações Espaciais para a Solução Numérica Dominante de Problemas de Autovalor Multiplicativo na Formulação de Ordenadas Discretas da Teoria do Transporte de Nêutrons". Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

A COMPARISON OF PERFORMANCES WITH DIFFERENT NUMERIC SOLUTION METHODOLOGIES FOR THE NEUTRON TRANSPORT EQUATION IN THE DISCRETE ORDINATES FORMULATION

Abstract. *In this work, two numeric solution strategies for the solution of the neutron transport equation in the discrete ordinates (S_N) are approached, throughout MED, c.f. Método Espectral Determinístico, in order to evaluate the precision of the results, considering the processing time of simulated neutronic shielding (fixer-source) problems calculation. The problems were modeled in it's unidimensional, stationary form, considering non-multiplying media, with isotropic scattering and one energy group. All the results were developed and obtained in a computational application made in the language JAVA version 1.8.0_91, and evaluated using the fine mesh methods DD, c.f. Diamond Difference and the coarse mesh method SGF, c.f. spectral Green's function.*

Keywords: *Neutral particles transport theory, Deterministic computational modelling, Nuclear reactor physics, Discrete ordinates, Fixed-source calculation*