

XXII ENMC
ENCONTRO NACIONAL DE
MODELAGEM COMPUTACIONAL

IX ECTM
ENCONTRO DE CIÊNCIA E
TECNOLOGIA DE MATERIAIS

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

ANÁLISE DA ACELERAÇÃO POR EXTRAPOLAÇÃO DA FONTE DE FISSÃO CONSIDERANDO A TEORIA DE DIFUSÃO DE NEUTRONS EM REATORES NUCLEARES

Andrey Silva Pontes¹ – re.andrey.pontes@gmail.com

Henrique Matheus Ferreira da Silva¹ – ferreirasilva_matheus@hotmail.com

Lenilson Moreira Araújo² – lenilson.moreira1@gmail.com

¹ Universidade Federal do Oeste do Pará, Instituto de Engenharia e Geociências – Santarém, PA, Brazil

² Universidade Federal do Oeste do Pará, Instituto de Ciências da Educação – Santarém, PA, Brazil

Resumo. *Este trabalho tem como objetivo analisar a performance do método de aceleração da fonte de fissão por extrapolação, considerando o problema da difusão de nêutrons em reatores nucleares. Diferentes métodos foram empregados simultaneamente com o esquema de aceleração adotado a fim de resolver o sistema linear de grande porte resultante do processo de discretização da equação da difusão de nêutrons pelo do Método dos Elementos Finitos (MEF) clássico. Tais métodos foram implementados em linguagem de programação de alto nível FORTRAN. O estudo realizado tomou como base os benchmarks EPRI-9 e Homogeneous Reactor, ambos reatores bidimensionais modelados a 2 e 3 grupos de energia, respectivamente. Os resultados obtidos a partir das simulações mostram a eficiência do esquema de aceleração implementado e sugerem um intervalo ainda mais restrito dentro do qual se encontra o valor ótimo do parâmetro de aceleração.*

Palavras chave: *Difusão de Nêutrons, Fonte de Fissão, Aceleração por extrapolação, Modelagem computacional.*

1. INTRODUÇÃO

Os reatores teóricos têm a finalidade de investigar fenômenos e aplicações nas mais diversas áreas da engenharia nuclear e exercem um papel fundamental para a física de nêutrons e reatores, bem como para testes e validações de métodos numéricos. O problema primordial na teoria dos reatores nucleares é determinar a distribuição de nêutrons dentro do reator, pois é esta que determina a taxa na qual variam as reações nucleares que ocorrem dentro dele.

Para isto, podemos utilizar a teoria da difusão de nêutrons (Duderstadt & Hamilton, 1976) para calcularmos circunstâncias necessárias para alcançar a criticalidade. Para fins de se obter o fator de multiplicação efetivo de nêutrons, deve-se resolver a equação da difusão de nêutrons

à multigrupos de energia. Métodos iterativos são empregados visando aceleração do processo de convergência da solução numérica da equação citada para se obter tanto o fator de multiplicação efetivo como o fluxo de nêutrons dentro do reator.

Diante desse contexto, este artigo visa a implementação da aceleração por extrapolação da fonte de fissão. O foco para a análise das simulações é o desempenho e perturbação causados pela aceleração da fonte de fissão em três diferentes métodos para a solução de sistemas de equações gerados pelo problema.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Modelagem da Equação da Difusão de Nêutrons

A equação da difusão de nêutrons é uma equação de derivadas parciais (EDP) do tipo elíptica que descreve a variação de densidade de nêutrons em um volume controle e representa o balanço entre perda e produção de nêutrons no interior desse volume (Roza, 2013). Para o desenvolvimento da análise numérica da equação da difusão de nêutrons utilizamos o Método dos Elementos Finitos (MEF) clássico (Liu & Rincon, 2013). a fim de tratar a dependência espacial do problema, de forma a obter sua solução numérica. A equação da difusão de nêutrons em geometria cartesiana bidimensional, em sua forma multigrupo, é dada por

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot D_g(r) \nabla \Phi_g(r) + \Sigma_{r,g}(r) \Phi_g(r) \\ & = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,g',g}(r) \Phi_{g'}(r) + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(r) \Phi_{g'}(r), \end{aligned} \quad (1)$$

$g = 1, \dots, G,$
 $\forall r = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$

Onde todos os termos são definidos de forma usual como em (Duderstadt & Hamilton, 1976).

Através do princípio de ortogonalidade de funções (método de Galerkin) a equação da difusão de nêutrons é transformada em um problema variacional abstrato. Essa forma variacional é discretizada em partições suficientemente pequenas. Estas partições são chamadas de elementos. O fluxo de nêutrons é então estabelecido como sendo uma combinação linear dentro de cada um dos elementos que compõe a malha (Pessoa et al., 2018). Tais procedimentos transformam a EDP em um sistema linear algébrico de grande porte. Os métodos para a resolução desses sistemas serão descritos no item 3, seções 3.1 a 3.3.

2.2 O fator de multiplicação efetivo de nêutrons

O fator de multiplicação efetivo k_{eff} é determinado pela relação do número de fissões de uma geração com o número de fissões da geração anterior. Sendo assim, para que a reação em cadeia continue a se estabelecer a uma taxa constante, por fissão, cada nêutron que colidir com o elemento radioativo deve produzir um outro nêutron, e assim por diante. Tal sistema é chamado de crítico ($k_{eff} = 1$). Para o caso em que o número de nêutrons gerado por meio de fissão for menor que um, de forma que a reação em cadeia reduza com a variação de tempo, trata-se de um sistema subcrítico ($k_{eff} < 1$). Para a situação inversa, no qual o número de

nêutrons da próxima geração for maior que um, a reação tende a aumentar com a variação do tempo, logo, temos um sistema supercrítico ($k_{eff} > 1$).

Graficamente,

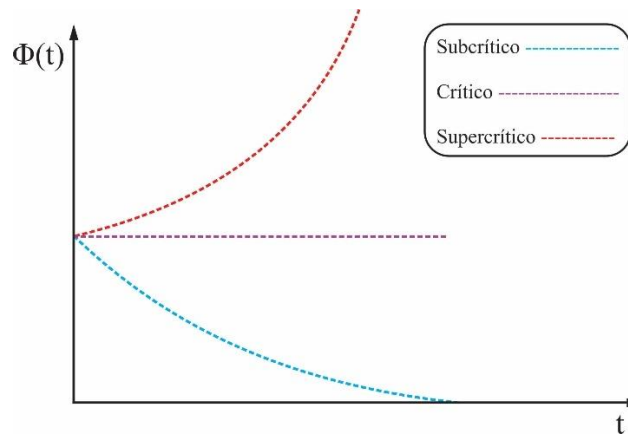


Figura 1- Variação da criticalidade em relação ao tempo para os três sistemas.

A partir de nossa definição física de criticalidade, é evidente que o equilíbrio cauteloso deve ser estabelecido entre a taxa na qual os nêutrons são produzidos no sistema e a taxa em que eles desaparecem, para que haja a autossustentação da reação em cadeia.

O autovalor k_{eff} pode ser obtido por

$$k_{i+1} = k_i \frac{\int F_{i+1} dV}{\int F_i dV} \quad (2)$$

Onde i é o índice de iteração, k_i é o fator de multiplicação efetivo de nêutrons e F_i é a fonte de fissão dada por $F_i = \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(r) \phi_{g'}^i(r)$.

2.3 Problema de iteração para a fonte de fissão

Em geral, a eficiência referente ao cálculo computacional e quantidade de memória para a iteração de fonte busca a convergência em um número coerente de iterações. Porém, em certos casos, a demora em atingir a convergência pode ser uma complicação. A iteração de fonte é crucial para a solução de problemas de autovalores neutrônicos. A taxa no qual há convergência pode ser muito lenta em alguns casos. Devido à importância das iterações de fonte, vários métodos de aceleração foram criados. Por isso, faz-se de suma importância o estudo de métodos que buscam acelerar a convergência, diminuindo o número de iterações necessárias para obter determinado nível de precisão para o k_{eff} e a distribuição de fissão. O método de aceleração utilizado neste trabalho será apresentado no item 3, seção 3.4.

2.4 Benchmarks

EPRI9 – 2D. O benchmark EPRI-9 2D (Khalil, 1982) trata-se de um reator nuclear teórico definido em duas dimensões que é amplamente utilizado para análise e validação de métodos numéricos. A altura do núcleo ativo é de 120 cm, água refletora superior e inferior com 20 cm

cada, totalizando 160 cm. Os dados nucleares utilizados para o reator EPRI9 - 2D homogeneizado podem ser visualizados no Apêndice A.

Homogeneous Reactor. Para o benchmark Homogeneous (Han, Dulla & Ravetto, 2009), as dimensões consideradas são de $160 \times 140 \text{ cm}^2$. O modelo teste é a 3 grupos de energia, e os dados nucleares estão disponíveis no Apêndice A.

3. METODOLOGIA

O conjunto de técnicas implementadas para resolução dos sistemas de equações gerados pela Eq. (1) corresponde à um método direto, um método iterativo e um método de aceleração polinomial, discretizada pelos métodos das seções 3.1, 3.2 e 3.3, respectivamente. Para a fonte de fissão, diversos métodos podem ser empregados. Aqui, foi utilizado a extrapolação por sobre-relaxação, descrita no item 3.4.

3.1 Método de Sobre-relaxação sucessiva (SOR).

O Método de Sobre-Relaxação Sucessiva (Successive Over-Relaxation - SOR) (Holm, 1959) é um melhoramento do método de Gauss-Seidel para a solução de sistemas de equações lineares, onde o termo ω pode acelerar a convergência para a solução do sistema. A formula de recorrência do método de relaxamento é dada por

$$\varphi_i^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \varphi_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} \varphi_j^{(k)} \right) + (1 - \omega) \varphi_i \quad (3)$$

Quando $\omega = 1$, é precisamente o método de Gauss-Seidel. Se A é uma matriz simétrica positiva definida e $0 < \omega < 2$, então, a técnica SOR converge de qualquer vetor inicial. Pode-se ainda selecionar o fator de relaxamento de tal forma que a taxa de convergência seja consideravelmente superior à obtida pelos métodos de Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel. Para o problema elíptico que estamos tratando, toma-se $\omega \approx 1,45$ como valor ótimo.

3.2 Algoritmo de Crout

O Método direto de Crout é uma variante particular da fatoração LU. Para evitar o armazenamento excessivo de matrizes, a solução é armazenada em b_j (Liu & Rincon, 2013). Considerando o a matriz decomposta na forma da Eq.(4) , deve-se, então, estipular a solução $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$.

$$A\varphi = (U^T D U)\varphi \quad (4)$$

Onde A é a matriz simétrica, U é a matriz triangular superior e D é a matriz dos elementos diagonais.

O algoritmo de Crout pode ser implementado de acordo com a estrutura abaixo

Algoritmo de Crout

```

1: do  $j = 2, 3, \dots, n$ 
2:   do  $i = 2, 3, \dots, j - 1$ 
3:      $A_{ij} \leftarrow A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} A_{ki}A_{kj}$ 
       do  $i = 1, 2, \dots, j - 1$ 
4:        $T \leftarrow A_{ij}$ 
5:        $A_{ij} \leftarrow T / A_{ii}$ 
6:        $A_{jj} \leftarrow A_{jj} - TA_{ij}$ 
7:   end do
8: do  $j = 2, 3, \dots, n$ 
9:    $b_j = b_j - \sum_{i=1}^{j-1} A_{ij}b_i$ 
10: end do
11: do  $j = 1, 2, \dots, n$ 
12:    $b_j \leftarrow b_j / A_{jj}$ 
13: end do
14: do  $j = n, n - 1, \dots, 2$ 
15:   do  $i = 1, 2, \dots, j - 1$ 
16:      $b_i \leftarrow b_i - A_{ij}b_j$ 
17: end do
    
```

3.3 Algoritmo do Gradiente Conjugado

Sendo um caso particular do método das direções conjugadas, e tendo uma matriz simétrica, positiva e definida, as direções são obtidas pelo gradiente da função. Por meio de sucessivos gradientes, é possível obter a direção que será conjugada, assim, minimizar a função é análoga a solução do sistema. Para implementação, podemos utilizar a estrutura do algoritmo (Cantanhêde, 2017) a seguir

Algoritmo do Gradiente Conjugado

```

1: Escolhe – se  $\varphi_0 \in R^n$ 
2:  $r_0 = A\varphi_0 - b$ 
3:  $d_0 = r_0$ 
4:  $k = 0$ 
5: do while  $d_k \neq 0$ 
6:    $\alpha_k = -r_k^T d_k / (d_k^T A d_k)$ 
7:    $\varphi_{k+1} = \varphi_k + \alpha_k d_k$ 
8:    $r_{k+1} = A\varphi_{k+1} - b$ 
9:    $\beta_k = -r_{k+1}^T A d_k / (d_k^T A d_k)$ 
10:   $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$ 
11:   $k \leftarrow k + 1$ 
12: end do
    
```

3.4 Aceleração por extrapolação da fonte de fissão

Para acelerar a convergência da fonte, o método de extrapolação por sobre-relaxação é usada para melhorar as iterações no fluxo (Lewis & Miller, 1984). A sobre-relaxação aplicada a fonte de fissão causada por nêutrons é descrita por

$$F_{i+1} = \omega_f(\tilde{F}_i - F_i) + F_i \quad (5)$$

Onde, \tilde{F}_i é a fonte de fissão não acelerada, obtida pela Eq.(2), F_i é o termo acelerado e ω_f é o parâmetro de sobre-relaxação para a fonte.

Para extrapolação por sobre relaxamento, temos que $1 \leq \omega < 2$, onde para todo valor maior que 1, temos a sobre-relaxação. Se $\omega = 1$, então

$$F_{i+1} = \tilde{F}_i \quad (6)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Ambos os benchmarks foram resolvidos considerando malhas com três quantidades diferentes de elementos. Para os casos sem aceleração, apresentados nas tabelas 1 e 2, utilizou-se $\omega_f = 1.0$. Já para os casos aceleração, apresentados nas tabelas 2 e 4, utilizou-se os valores 1.4, 1.5 e 1.6 para o parâmetro de extrapolação ω_f . O número total de iterações presente em todas as tabelas refere-se a soma das iterações de fluxo internas e externas.

Tabela 1- Resultados para o benchmark EPRI-9 sem aceleração do termo de fonte de fissão.

Solver						
Número de Elementos	SOR ($\omega = 1.45$)		Crout		Gradiente Conjugado	
	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}
1024	915 [86]	0,92711	195 [21]	0,92711	188 [91]	0,91459
2304	1996 [964]	0,92717	199 [162]	0,92717	186 [596]	0,91202
4096	4337 [7620]	0,92719	196 [763]	0,92719	186 [2296]	0,91061

Tabela 2 - Resultados para o benchmark Homogeneous Reactor sem aceleração do termo de fonte de fissão.

Solver						
Número de Elementos	SOR ($\omega = 1.45$)		Crout		Gradiente Conjugado	
	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}
896	1676 [150]	0,90205	105 [15]	0,90205	190 [76]	0,91424
2016	3549 [1610]	0,90207	105 [136]	0,90207	117 [900]	0,90207
3584	6004 [10813]	0,90208	101 [678]	0,90207	117 [3480]	0,90208

Tabela 3 - Resultados para o benchmark EPRI9-2D com aceleração do termo de fonte de fissão.

ω_f	N° de Elementos	Solver					
		SOR ($\omega = 1.45$)		Crout		Gradiente Conjugado	
		Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}
1.4	1024	705 [69]	0,92711	137 [20]	0,92711	142 [69]	0,92711
	2304	1580 [752]	0,92717	134 [167]	0,92717	143 [480]	0,92717
	4096	2844 [4320]	0,92719	135 [760]	0,92719	146 [1952]	0,92719
1.5	1024	636 [59]	0,92711	111 [22]	0,92711	118 [63]	0,92711
	2304	1315 [650]	0,92717	113 [178]	0,92717	118 [439]	0,92717
	4096	2467 [4166]	0,92719	111 [657]	0,92719	118 [1769]	0,92719
1.6	1024	718 [73]	0,92711	134 [15]	0,92711	129 [68]	0,92711
	2304	1616 [820]	0,92717	129 [131]	0,92717	129 [481]	0,92717
	4096	2864 [8648]	0,92719	134 [658]	0,92719	129 [1933]	0,92719

Tabela 4 - Resultados para o benchmark Homogeneous Reactor com aceleração do termo de fonte de fissão.

ω_f	N° de Elementos	Solver					
		SOR ($\omega = 1.45$)		Crout		Gradiente Conjugado	
		Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}	Iterações [tempo (s)]	k_{eff}
1.4	896	1676 [150]	0,90205	80 [13]	0,90205	80 [81]	0,90205
	2016	2865 [1200]	0,90207	80 [120]	0,90207	80 [550]	0,90207
	3584	4794 [8040]	0,90208	81 [660]	0,90207	83 [2575]	0,90208
1.5	896	1311 [123]	0,90205	106 [15]	0,90205	105 [136]	0,90205
	2016	2833 [1238]	0,90207	106 [136]	0,90207	106 [867]	0,90207
	3584	5050 [8820]	0,90208	107 [670]	0,90207	107 [3203]	0,90208
1.6	896	1466 [150]	0,90205	141 [17]	0,90205	143 [145]	0,90205
	2016	2956 [1457]	0,90207	143 [144]	0,90207	143 [1033]	0,90207
	3584	5034 [9180]	0,90208	143 [693]	0,90207	143 [3617]	0,90208

Analisando as tabelas 3 e 4, percebe-se a aceleração de fonte obteve um excelente desempenho em todos os métodos utilizados para resolver o sistema de equações. Em todos os casos, com um número de iterações de fluxo e um tempo computacional consideravelmente menor. A aplicação da aceleração, como podemos ver, não causa perturbação na solução numérica da Eq.(1) nos casos dos métodos SOR e Crout, tornando-a assim, vantajosa para se obter um menor custo computacional. No caso do método dos Gradientes Conjugados, vê-se que em si ele já possuiu uma precisão inferior ao valor de referência da literatura do k_{eff} . Porém, Aplicando-se a aceleração na fonte, é possível se atingir uma precisão semelhante aos métodos SOR e Crout, e, mais uma vez, mostrando o benefício de se utilizar métodos para acelerar a convergência dos resultados.

5. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos apontam $\omega_f = 1.5$ e $\omega_f = 1.4$ como um valor ótimo para os benchmarks EPRI-9 e Homogeneous Reactor, respectivamente. Em geral, comparando os métodos de resolução de sistemas de equações utilizando a aceleração da fonte, temos que os resultados numéricos obtidos são extremamente próximos, entretanto, os métodos do gradiente conjugado e principalmente o SOR, em termos de tempo computacional, têm uma convergência mais lenta sem utilizar o método de aceleração de fonte. Desta forma, com base nas informações obtidas nas simulações numéricas, é possível notar que o que o método de Crout é superior comparado aos outros dois já citados, levando em consideração os resultados obtidos como o número de iterações e principalmente o tempo total necessário a execução das simulações.

Agradecimentos

A.S.P. e L.M.A agradecem ao apoio da UFOPA, ao PET-IEG pelo apoio financeiro, aos companheiros do LABIC, e especialmente ao Prof. Dr. A.A.M.M.

REFERÊNCIAS

- Cantanhêde, S.V.P., (2017). “*Método dos Gradientes Conjugados Aplicados a Sistemas Lineares*”, Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, Gramado – RS, 2.
- Duderstadt, J.J., & Hamilton, L.J., (1976). “Nuclear Reactor Analysis.”, Department of Nuclear Engineering, The University of Michigan, Ann Arbor, Michigan.
- Han, S., Dulla, S., & Ravetto, P. (2009). “*Computational methods for multidimensional neutron diffusion problems*”. Science and Technology of Nuclear Installations, 7.
- Holm, S. (1959). “Nuclear reactor theory”. Nuclear Physics (Vol. 10), Tokyo Institute of Technology.
- Khalil, H.S., (1982). “The application of Nodal Methods to PWR Analysis.” (PhD thesis). Department of Nuclear Engineering, Massachusetts Institute of Technology.
- Pessoa, P. O., Araujo, L. M., & Silva, F. C. (2018). A strategy for pin power reconstruction based on classic Galerkin variational formulation. *Progress in Nuclear Energy*, 104, 251–263.
- Lewis E.E. & Miller W.F. Jr., (1984). “*Computational Methods of Neutron Transport*”, A Wiley-Interscience publication, 43-95.
- Liu, I-S., Rincon, M.A., (2013). “*Introdução ao Método dos Elementos Finitos – Computação e Análise em Equações Diferenciais Parciais*”, Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro. 140-146.
- Roza, M.P., (2013). “*Solução da Equação da Difusão de Nêutrons pelo método de Diferenças Finitas de Malha Grossa Analítica*”, Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 8-11.

APÊNDICE A

Nesta seção, encontra-se os dados nucleares referentes aos benchmarks (Tabela 4 e 5) implementados nesse artigo.

Tabela 5 – Parâmetros nucleares para o reator EPRI9-2D homogeneizado.

Tipo	Grupo	$\Sigma_{ag}^n (cm^{-1})$	$\Sigma_{sg}^n (cm^{-1})$	$D_g^n (cm)$	$v\Sigma_{fg}^n (cm^{-1})$	χ^g
F1	1	1.2099E-02	2.1126E-02	1.5134E+00	6.0122E-03	1.0
	2	1.6854E-01	0.0	3.9502E-01	2.1883E-01	0.0
F2	1	9.3249E-03	2.1125E-02	1.5133E+00	4.6249E-03	1.0
	2	1.4140E-01	0.0	3.9515E01	1.6453E-01	0.0
Barra/Refletor	1	1.8526E-03	2.1436E-02	1.3509E+00	0.0	0.0
	2	6.0460E-02	0.0	3.4830E01	0.0	0.0

Tabela 6 – Parâmetros nucleares para Homogeneous Reactor.

Grupo	$\Sigma_r^g [cm^{-1}]$	$v\Sigma_f^g [cm^{-1}]$	$D^g [cm]$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+1} [cm^{-1}]$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g+2} [cm^{-1}]$	χ^g ---
1	0.3046E -1	0.1076E -1	2.11	0.2578E -1	0.5164E -3	0.7737
2	0.7060E -2	0.3309E -2	1.29	0.4705E -2	0.0000	0.2193
3	0.6316E -2	0.4366E -2	0.86	0.0000	0.0000	0.0070

ANALYSIS OF ACCELERATION BY EXTRAPOLATION OF THE FISSION SOURCE CONSIDERING THE DIFFUSION NEUTRONS THEORY IN NUCLEAR REACTORS

Abstract. *The aim of this work is to analyze the performance of the fission source acceleration method by extrapolation, considering the problem of neutron diffusion in nuclear reactors. Different solvers were used simultaneously with the adopted acceleration scheme in order to solve the large linear system resulting from the discretization process of the neutron diffusion equation by the classical Finite Element Method (MEF). These methods were implemented in FORTRAN high-level programming language. The study was based on EPRI-9 and Homogeneous Reactor benchmarks, both bidimensional reactors modeled at 2 and 3 energy groups, respectively. The results obtained from the simulations show the efficiency of the implemented acceleration scheme and suggest an even more restricted range within which the optimum value of the acceleration parameter is found.*

Keywords: *Neutron Diffusion, Fission Source, Numerical Methods, Computational Modeling*