

ESTUDO COMPARATIVO DOS DIFERENTES ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO UTILIZADOS NO CÓDIGO ANISN¹

COMPARATIVE STUDY OF THE DIFFERENT MODELS OF DISCRETIZATION USED IN THE ANISN CODE

Leonardo Pilau Arzeno²
Gilberto Orengo³

RESUMO

No estudo de transporte de nêutrons e fótons é utilizada a equação de transporte de Boltzmann, na sua forma linearizada e independente do tempo. A solução analítica desta equação só é possível em casos muito específicos. Assim, torna-se necessário implementar soluções numéricas para a maioria dos problemas. No código ANISN/PC, é usado o método das ordenadas discretas, cuja variável energia é discretizada pelo Método de Multi-grupos, a variável angular pela Quadratura Angular e, a variável espacial pelo método das Diferenças Finitas. Neste último, a derivada espacial é tratada, no ANISN, por três esquemas: o step, o diamond e o pesado, e também por combinações destes. A proposta deste trabalho, é testar esses esquemas em dois problemas: cálculo do fluxo, em 4 regiões com 4 materiais diferentes e 1 grupo de energia, sendo a região três o vácuo; e cálculo de autovalores (k_{eff}) para 2 regiões, com 2 materiais diferentes, sendo um dos materiais físsil. Resultados são apresentados para estes testes.

Palavras-chave: Transporte de nêutrons, código ANISN, Criticalidade.

ABSTRACT

In the study of neutrons and photons transport is used the Boltzmann equation, in the linear form and time-independent. The analytical solution of this equation is possible in very few specific cases. Thus, is necessary to implement numerical solutions for the majority of the problems. In ANISN/PC code is used of the discrete ordinates method, whose requires discretization of the angular variable, of the energy dependence and spatial variable. In this last case, the spatial operator ∇ and spatial dependence (\vec{r}) are discretized in finite difference approximation. Three different model are used in ANISN/PC: linear (or diamond)-difference model; step-difference model and weighted-difference model, and combinations of these. The intent of this work is to test these models in two problems: flux calculation in 4 regions with 4 different materials and 1 group of energy,

¹PROBIC/UNIFRA.

²Bolsista PROBIC/UNIFRA – Curso de Física Médica, e-mail: leo01@brturbo.com.

³Prof. Orientador – Curso de Física Médica, e-mail: orengo@unifra.br.

being region three the vacuum; and eigenvalue calculations (Keff) for 2 regions of different materials, being "fissil" one of the materials. We report the numerical results testing the models.

Key words: Neutron transport, ANISN code, eigenvalue calculations.

INTRODUÇÃO

A Teoria de Transporte é o ramo da Física que estuda a evolução da função distribuição de partículas no espaço de fase (espaço \vec{r} ; direção $\hat{\Omega}$; energia E), e foi introduzida, inicialmente, na teoria cinética, por Boltzmann (1872) (BELL e GLASSTONE, 1985). As equações de Boltzmann, em sua forma geral, são um conjunto de equações íntegro-diferenciais não-lineares, mas com suposições como: i) desprezando as colisões entre partículas idênticas (p.ex., nêutron-nêutron); ii) um só tipo de partícula sendo transportada no meio hospedeiro⁴; iii) partículas clássicas, isto é, serão consideradas como *bolinhas rígidas* (todas as relações *quânticas* serão consideradas, implicitamente, nos dados nucleares—as seções de choque) e; iv) a ordem da densidade das partículas transportadas é menor do que a densidade do meio, etc., isso possibilita reduzir estas equações a uma única equação íntegro-diferencial **linear**, que descreverá a função distribuição das partículas transportadas. As suposições usadas para linearizar a equação de Boltzmann são adequadas para descreverem o transporte de partículas sem carga elétrica, tais como nêutrons e fótons, e o movimento de moléculas num meio rarefeito. Assim, a equação de Boltzmann linearizada (PRINJA, 1991) é a equação fundamental (básica) na *teoria de transporte de nêutrons, em meios multiplicativos* (i.e., com material fissil), com aplicações em projeto de reatores nucleares e análise de criticalidade; em *teoria de transferência radiativa*, com aplicações em transferência de radiação por calor e cálculo de atmosferas estelares e planetárias (CHANDRASEKHAR, 1960); e em *blindagem de radiações* (DUDERSTADT e MARTIN, 1979).

A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

A equação de transporte de nêutrons unidimensional, em coordenadas cartesianas (DUDERSTADT e MARTIN, 1979; STAMM'LER e ABBATE, 1983; CHANDRASEKHAR, 1960), para uma única região, em estado esta-

⁴Meio hospedeiro é o meio no qual as partículas se movimentam. Para simplificar, usaremos simplesmente *meio* para nos referirmos a *meio hospedeiro*.

cionário e com simetria azimutal, é dada por

$$\begin{aligned}
 \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, E, \mu) + \Sigma_t(E) \psi(x, E, \mu) &= 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 \Sigma_s(\mu_o, E' \rightarrow E) \psi(x, E', \mu') d\mu' dE' \\
 &+ \chi(E) \int_0^\infty \frac{\nu(E')}{2k_{eff}} \Sigma_f(E') \int_{-1}^1 \psi(x, E', \mu') d\mu' dE' \\
 &+ S(x, E, \mu), \tag{1}
 \end{aligned}$$

sujeita às condições de contorno

$$\psi(0, E, \mu) = f(E, \mu), \quad \mu > 0 \tag{1a}$$

$$\psi(a, E, \mu) = g(E, \mu), \quad \mu < 0, \tag{1b}$$

em que $\psi(x, E, \mu)$ é o fluxo angular na direção definida por μ , na posição x com energia entre E e $E + dE$; $\mu_o \equiv \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' = \cos \gamma$ é o cosseno do ângulo de espalhamento; $\Sigma_t(E)$ é a seção de choque macroscópica total; $\Sigma_s(\mu', E' \rightarrow E)$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento; $\Sigma_f(E')$ é a seção de choque macroscópica de fissão; $\chi(E)$ é o espectro de fissão; $\nu(E')$ é o número médio de nêutrons oriundos da fissão; k_{eff} é o fator de multiplicação efetivo; $S(x, E, \mu)$ é o termo de fonte de nêutrons e, $f(E, \mu)$ e $g(E, \mu)$ são os fluxos incidentes nas fronteiras. Como pode ser observado, as seções de choque macroscópicas são consideradas independentes da posição.

A Eq.(1) pode ser aplicada para nêutrons e/ou fótons, dependendo da interpretação física correta da interação entre a partícula e o meio (interpretação fornecida pela seção de choque).

A solução analítica desta equação só é possível em casos muito específicos. Dessa forma, torna-se necessário implementar soluções numéricas para a maioria dos problemas, e o método das ordenadas discretas foi usado para gerar o código ANISN (PARSONS, 1988). O código ANISN será utilizado em nossos cálculos e, a partir deste ponto, descreveremos, brevemente, as aproximações utilizadas no código ANISN/PC-versão do código ANISN para PC.

A DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL ENERGIA – O MÉTODO DE MULTIGRUPOS

A variável energia é tratada pelo método de Multigrupos (LEWIS e MILLER, 1984), isto é, o domínio da variável energia é dividido em intervalos discretos, nem sempre regulares, chamados de grupos de energia. Em cada grupo (intervalo), a dependência com a energia das grandezas é avaliada, tais como as seções de choque dos materiais.

De acordo com uma convenção, os grupos de energia são numerados, sequencialmente, do maior valor de energia para o de menos valor. Esta convenção está de acordo com o processo físico, pois uma partícula ao penetrar num meio, “certamente”, perderá parte, ou totalmente, sua energia por interação com o mesmo.

A DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL ANGULAR

No método das ordenadas discretas, a variável angular $\hat{\Omega}$ e a dependência angular de todas as grandezas físicas envolvidas são tratadas, explicitamente, para poucas direções (i.e., ordenadas ou ângulos). Dessa forma, a integral do termo de espalhamento será tratada por uma quadratura angular (BROCKMANN, 1981).

Assim, considerando estas duas aproximações, a eq.(1) toma a forma

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \psi_{gi}(x) + \Sigma_{t_g} \psi_{gi}(x) = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \sum_{j=1}^N \Sigma_{g'g}^L \omega_j \psi_{g'j}(x) \\ + \frac{X_g}{2k_{eff}} \sum_{g'=1}^G (\nu \Sigma_f)_{g'} \sum_{j=1}^N \omega_j \psi_{g'j}(x) + S_{gi}(x), \end{aligned} \quad (2)$$

a qual fornece um conjunto de GN equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, com as condições de contorno

$$\psi_{gn}(0) = f_{gn}, \quad n = 1 : \frac{N}{2} \Leftrightarrow \mu > 0 \quad (2a)$$

$$\psi_{g(n+N-2)}(a) = g_{gn}, \quad n = 1 : \frac{N}{2} \Leftrightarrow \mu < 0, \quad (2b)$$

em que g representa os grupos de energia e n , a quadratura angular. Falta ainda a discretização espacial, que veremos a seguir.

A DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL - O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

A equação (2) é válida para todos os grupos de energia e direções, mas também pode ser interpretada como uma equação para cada grupo de energia e para cada direção discreta. Dessa forma, para entendermos o uso do método das diferenças finitas, usaremos um único grupo de energia e uma única direção discreta angular. A eq. (2), em uma forma mais compacta, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mu \frac{d\psi(x)}{dx} + \Sigma_t \psi(x) = Q(x), \quad (3)$$

em que $Q(x)$ inclui todos os termos de fontes, inclusive fissões e espalhamento, isto é, todo o lado direito da igualdade da eq. (2). Ao introduzir a aproximação por diferenças finitas, a eq. (3) fica

$$\mu \left(\frac{\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}}{\Delta x} \right) + \Sigma_t \psi = Q \quad i = 1, 2, \dots, JM(\text{intervalos}), \quad (4)$$

na qual μ é o cosseno do ângulo longitudinal, na atual direção, ψ é o fluxo angular numa dada direção (μ) e, para um dado grupo de energia (g), no intervalo espacial i . O $\psi_{i+1/2}$ é o fluxo angular na direção μ e para grupo de energia g para o limite adiante do intervalo i e $\psi_{i-1/2}$ é o fluxo angular na direção μ e para grupo de energia g para o limite anterior do intervalo i , Δx é a largura espacial do intervalo i e Σ_t é a seção de choque média no intervalo i para o grupo de energia g .

Existem dois fluxos desconhecidos na eq. (4), ψ e $\psi_{i+1/2}$, porque $\psi_{i-1/2}$ é conhecido ou pelas condições de contorno ou externamente. Portanto, uma relação entre ψ e $\psi_{i+1/2}$ deve ser definido para resolver a eq. (4) e, ao mesmo tempo, fornecer $\psi_{i-1/2}$ como fluxo de entrada para o próximo intervalo espacial. No código ANISN, três esquemas são usados para obter esta relação. Eles serão descritos a seguir.

LINEAR: este esquema, também conhecido como *diamond*, ψ é um valor médio entre $\psi_{i+1/2}$ e $\psi_{i-1/2}$, isto é:

$$\psi = \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2} + \psi_{i-1/2}).$$

STEP: neste esquema ψ é igual $\psi_{i+1/2}$, isto é:

$$\psi = \psi_{i+1/2}.$$

PESADO: este esquema, ψ é obtido de um valor médio *pesado* entre $\psi_{i+1/2}$ e $\psi_{i-1/2}$, isto é:

$$\psi = \alpha_s \psi_{i+1/2} + (1 - \alpha_s) \psi_{i-1/2}.$$

em que α_s pode assumir valores entre 0,5 e 1,0. Quando $\alpha_s = 0,5$, o modelo torna-se o esquema linear e, quando $\alpha_s = 1,0$, torna-se o step.

No código ANISN, estes esquemas foram implementados e também suas combinações. Assim, por exemplo, o esquema linear pode se combinar com o pesado. Na prática, quando o esquema linear gerar um fluxo negativo, o cálculo é feito usando o esquema pesado com um valor "chutado" para α_s . Todos os cálculos subsequentes são testados com um ou outro esquema. A seguir, estes modelos (esquemas) são testados em dois problemas.

RESULTADOS NUMÉRICOS E CONCLUSÕES

Para estudar os esquemas acima descritos, dois problemas serão considerados (ORENGO, 1997). O primeiro calculará o fluxo escalar para uma geometria plana com 4 regiões, com 4 materiais diferentes. O segundo estudará o caso de autovalores de criticalidade, especificamente, o cálculo de k_{eff} , para uma geometria de 2 regiões de materiais diferentes.

PROBLEMA 1: CÁLCULO DE FLUXO ESCALAR DE NÊUTRONS

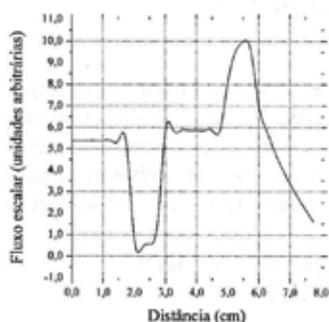
Este primeiro problema foi projetado para ilustrar os diferentes resultados de fluxo neutrônico obtidos com os diferentes esquemas de discretização. É um problema de 1 grupo de energia, geometria plana, com 40 intervalos espaciais de discretização, numa aproximação angular S4. A placa contém quatro regiões de composição diferentes. A tabela 1 mostra as seções de choque dos quatro materiais. Estas seções de choque não têm o objetivo de representar materiais físicos reais. Uma fonte de nêutrons de valor igual a 50 unidades arbitrárias está localizada na região ocupada pelo material 1 e uma segunda fonte de valor igual a 1.0 está localizada na região $5,0 \text{ cm} < x < 6,0 \text{ cm}$. As condições de contorno são reflexão e vácuo, respectivamente, nas fronteiras esquerda e direita.

Tabela 1 - Seções de Choque, em cm^{-1} , para o Problema 1.

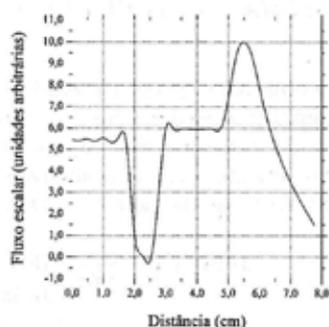
	Material 1	Material 2	Material 3	Material 3
Σ_a	50,0	5,0	0,0	0,1
$\nu\Sigma_f$	0,0	0,0	0,0	0,0
Σ_t	50,0	5,0	0,0	1,0
Σ_s	0,0	0,0	0,0	0,9

Os resultados numéricos são mostrados nas figuras 1 e 2. Nos esquemas linear, pesado e na combinação linear-step, observa-se, que na primeira

região, onde existe oscilação do valor do fluxo, deve se cuidar a definição do tamanho da malha (discretização espacial), quando se usa um destes esquemas para regiões altamente absorvedoras. O único esquema livre de oscilações é o step, aliás, o que dá solução de melhor qualidade.

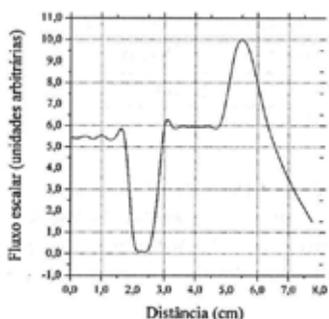


(a) Esquema Step

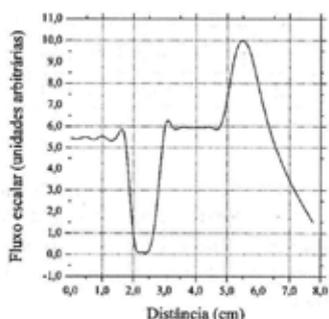


(b) Esquema Linear

Figura 1 - Resultados numéricos para os esquemas Step e Linear.



(a) Esquema Pesado



(b) Esquema Linear-Pesado

Figura 2 - Resultados numéricos para os esquemas Pesado e Linear-Pesado.

O esquema Linear-pesado apresentou uma melhora na região 2. Destes resultados, conclui-se que o uso de um esquema ou outro vai depender de

cada problema, mas é necessário uma análise detalhada no critério de escolha de um determinado esquema de discretização e do tamanho da malha espacial. Além da escolha da aproximação angular. Neste trabalho, não foi estudada esta escolha, pois foi usada sempre a aproximação S4.

PROBLEMA 2: CÁLCULO DE AUTOVALORES - K_{EFF}

O objetivo é testar a precisão dos métodos no cálculo de autovalores. Este problema consiste em 1 grupo de energia e duas regiões, com uma aproximação angular S4. As condições de contorno são reflexão e vácuo, respectivamente, para as fronteiras esquerda e direita. As seções de choque são apresentadas na tabela 2. Os resultados para k_{eff} , calculados com os

Tabela 2 - Seções de Choque para o Problema 2.

	Material 1 (cm^{-1})	Material 2 (cm^{-1})
Σ_a	0,5	0,1
$\nu\Sigma_t$	0,6	0,0
Σ_t	1,0	1,0
Σ_s	0,5	0,9

diferentes esquemas são mostrados na tabela 3.

Tabela 3 - Resultados para o autovalor k_{eff} do Problema 2.

Step	Linear	Pesado	Linear-Step	Linear-Pesado
2,447	1,159	1,159	1,159	1,159

Observa-se que o esquema Step apresentou o pior resultado, demonstrando desta forma que a escolha do esquema de discretização da variável espacial e a malha sempre devem ser analisados em cada problema, não podendo ser adotado um esquema indefinidamente, motivado por um resultado específico.

Em resumo, nem todos os esquemas de discretização são infalíveis, e é sempre necessário analisarmos os resultados, isto é, um esquema ótimo para um problema, poderá não ser para outro. Mostrou-se, neste trabalho, a utilidade do código ANISN como uma ferramenta útil para cálculos e simulações em transporte de partículas neutras. Em trabalhos futuros, este código será utilizado na área de Física-médica, no cálculo de blindagem e, também, no cálculo de radiação gama, através de tecido humano, em caso de tratamento de câncer.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BELL, G. I.; GLASSTONE, S. 1985. **Nuclear Reactor Theory**. Malabar, Florida: Krieger Publishing Company.
- BROCKMANN, H. 1981. Treatment of anisotropic scattering in numerical neutron transport theory. **Nuclear Science and Engineering**, v. 77, p. 377-414, 1981.
- CHANDRASEKHAR, S. 1960. **Radiative Transfer**. New York: Dover Publications, Inc.
- DUDERSTADT, J. J.; MARTIN, W. R. 1979. **Transport Theory**. New York: John Wiley & Sons, Inc..
- LEWIS, E. E.; MILLER, J. W. F. 1984. **Computational Methods of Neutron Transport**. New York: John Wiley & Sons, Inc..
- ORENGO, G. 1997. Dissertação de Mestrado, **Estudo do Transporte de Nêutrons em Placas de Ferro**. Santa Maria, RS, Brasil.
- PARSONS, D. K. 1988. **ANISN/PC Manual**. Idaho Falls, Idaho, December.
- PRINJA, A. K. 1991. A family of transport equations in neutron transport theory. **Annals of Nuclear Energy**, v. 18, n. 3, p. 147-154.
- STAMM'LER, R. J. J.; ABBATE, M. J. 1983. **Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design**. London: Academic Press.