

ST7-B

SOBRE A OCORRÊNCIA DE FLUXOS NEGATIVOS EM PROBLEMAS DE
TRANSPORTE DE RADIAÇÃO GAMA

R.D.M. Garcia
Divisão de Física de Reatores
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
Cidade Universitária, São Paulo

SUMÁRIO

Discute-se
~~Este trabalho discute~~ a ocorrência de fluxos angulares negativos causados por representações polinomiais das secções de choque de espalhamento utilizadas na solução de problemas de transporte de radiação gama no modelo de multigrupos de energia. Foi definido um problema básico, para o qual resultados precisos fornecidos pelo método F_N foram usados como referência para avaliar resultados do método S_N obtidos com e sem o uso da opção "negative flux fix-up". Os resultados indicam que a ocorrência de fluxos angulares negativos afeta sensivelmente os valores calculados pelo método S_N para os albedos de grupo de mais alta energia enquanto que os fatores de transmissão de grupo não são praticamente afetados.

1. Introdução

Cálculos de blindagem de reatores e sistemas nucleares requerem, em geral, a solução da equação linear de transporte [1] no modelo de multigrupos de energia e espalhamento anisotrópico. Recentemente, uma revisão dos métodos de tratamento da anisotropia do espalhamento em problemas de transporte de neutrons foi publicada na literatura [2]. O método mais frequentemente empregado consiste em aproximar a dependência angular das secções de choque de espalhamento por uma série de polinômios de Legendre arbitrariamente truncada após um termo de ordem L . Essa aproximação, utilizada juntamente com a discretização da dependência energética da equação de transporte em multigrupos de energia, pode ocasionar sérios problemas de ordem computacional quando na lei de espalhamento há um acoplamento entre a perda de energia da partícula espalhada e o ângulo de espalhamento, como é o caso, por exemplo, do espalhamento elástico de neutrons [2]. Especificamente, em virtude do truncamento da série acima mencionada, necessário do ponto de vista computacional, algumas secções de choque de transferência entre grupos (especialmente na faixa rápida) podem apresentar valores negativos para certos intervalos do ângulo de espalhamento. Como consequência, ao se resolver a equação de transporte correspondente, fluxos angulares negativos podem ser obtidos.

Algumas formulações alternativas para o tratamento da anisotropia do espalhamento tem sido propostas, incluindo expansões em sub-intervalos de $[-1,1]$ para a dependência angular das secções de choque de espalhamento [3] e tratamentos diretos que usam a forma exata das secções de choque [4]. Todos esses métodos, porém, implicam num acréscimo da carga computacional envolvida na solução da equação de transporte.

Na referência 2, sugere-se, com base em estudos anteriores [5,6] para o caso de neutrons, que o problema de se obter fluxos angulares negativos não é tão grave se os únicos resultados numéricos desejados são quantidades integrais (fluxos totais ou correntes, por exemplo), já que a integração no ângulo atenuaria possíveis oscilações não-físicas encontradas nos fluxos angulares. Dada a importância da anisotropia de espalhamento em cálculos de blindagem em oposição a cálculos de núcleos de reatores, onde frequentemente a correção de transporte (espalhamento linearmente anisotrópico) é suficiente, julgamos de interesse efetuar um estudo para observar a

possível ocorrência de fluxos angulares negativos em problemas de transporte de radiação gama e avaliar sua influência nos resultados integrais mais frequentemente desejados de um cálculo de blindagem, o albedo e o fator de transmissão. Tais fluxos negativos são esperados com base no forte acoplamento energia-ângulo da secção de choque diferencial de Klein-Nishina [7], que descreve o espalhamento Compton de raios gama. Com esse objetivo, definimos a seguir um problema que representa uma situação tipicamente encontrada em cálculos de blindagem de radiação gama.

2. O Problema Proposto

O problema envolve uma distribuição isotrópica de raios gama de 1 MeV incidente numa das superfícies de uma placa unidimensional de ferro com 10cm de espessura. As secções de choque em multigrupos foram geradas por Renken [8], usando uma estrutura de 19 grupos de energia para tratar o intervalo 50 keV - 1 MeV e uma expansão da dependência angular das secções de choque em polinômios de Legendre $P_\ell(x)$ truncada após o 6º termo. Matematicamente, o problema é formulado pela equação de transporte para os grupos $i=1,2,\dots,19$,

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_i(z, \mu) + \sigma_i \psi_i(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L \sigma_{ij}(\ell) P_\ell(\mu) \phi_{j,\ell}(z), \quad (1)$$

onde σ_i é a secção de choque total para o grupo i e $\sigma_{ij}(\ell) = \sigma_{ij} \beta_{ij}(\ell)$, com $\beta_{ij}(0)=1$, representam os coeficientes da expansão em polinômios de Legendre das secções de choque de transferência entre grupos. O fluxo angular no grupo i é representado por $\psi_i(z, \mu)$ e

$$\phi_{j,\ell}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z, \mu) P_\ell(\mu) d\mu. \quad (2)$$

As condições de contorno são dadas por

$$\psi_i(z=0, \mu) = \delta_{i,1}, \quad \mu > 0, \quad (3)$$

e

$$\psi_i(z=10, -\mu) = 0, \quad \mu > 0. \quad (4)$$

O problema foi solucionado pelo método F_N [9] o qual, basicamente, utiliza uma transformada integral para reduzir a equação (1) e condições de contorno associadas a um sistema de equações inte -

grais singulares e vínculos para os fluxos angulares emergentes, $\psi_i(z=0, -\mu)$ e $\psi_i(z=10, \mu)$, $\mu > 0$. Em seguida, a introdução das aproximações, para $\mu > 0$,

$$\psi_i(z=0, -\mu) = \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} P_{\alpha}(2\mu-1) \quad (5)$$

e

$$\psi_i(z=10, \mu) = \delta_{i,1} \exp(-10\sigma_i/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} P_{\alpha}(2\mu-1) \quad (6)$$

reduz o problema à solução de um sistema linear de equações algébricas para os coeficientes $a_{i,\alpha}$ e $b_{i,\alpha}$. As quantidades de interesse são os albedos de grupo

$$A_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(z=0, -\mu) d\mu \quad (7)$$

e os fatores de transmissão de grupo

$$B_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(z=10, \mu) d\mu \quad (8)$$

às quais, após considerar as aproximações dadas pelas equações (5) e (6), podem ser escritos como

$$A_i^* = a_{i,0} + \frac{1}{3} a_{i,1} \quad (9)$$

e

$$B_i^* = 2\delta_{i,1} E_3(10\sigma_i) + b_{i,0} + \frac{1}{3} b_{i,1} \quad (10)$$

onde $E_3(x)$ denota uma das funções exponenciais-integrais.

O principal atrativo do método F_N para cálculos de blindagem é o fato de fornecer resultados para os fluxos angulares emergentes, albedos e fatores de transmissão em cada grupo, usando apenas os fluxos angulares incidentes fornecidos pelas condições de contorno e os fluxos angulares emergentes estabelecidos previamente para os grupos precedentes. Esta característica do método é interessante, pois frequentemente os fluxos angulares interiores não são de interesse em cálculos de blindagem. Se houver interesse em calcular fluxos interiores o método é capaz de fornecê-los em um segundo passo.

É interessante mencionar também que o método F_N converge mais rapidamente quando há forte absorção e/ou a espessura óptica do material é grande - outra característica importante para aplicação em problemas de penetração profunda.

3. Resultados e Comparações

Resultados obtidos com o método F_N para os albedos de grupo são comparados na Tabela 1 com resultados do método S_N [8] obtidos com o uso de duas opções de cálculo distintas no código DTF69 [10]: uma das opções é a conhecida como "negative flux fix-up", a qual considera nulo qualquer valor negativo encontrado para o fluxo angular e a outra opção permite fluxos negativos. A existência de diversas opções de cálculo em códigos S_N está relacionada com a possibilidade de ocorrência de fluxos negativos inerentes à técnica de discretização e interpolação adotada no método S_N [1]. Certos esquemas numéricos garantem a positividade do fluxo angular em cálculos S_N , sendo o mais simples o descrito acima, isto é, tomar arbitrariamente como zero qualquer valor negativo encontrado.

A convergência dos resultados do método F_N foi estudada numericamente de modo a garantir uma precisão dentro de ± 1 do último dígito mostrado na Tabela 1; portanto os resultados F_N podem ser considerados como de referência para o presente problema. Observa-se que os resultados do código DTF69 sem utilizar a opção "negative flux fix-up" apresentam boa concordância com os resultados F_N , enquanto que com a utilização da opção "negative flux fix-up" os resultados S_N para os primeiros grupos discordam sensivelmente dos resultados de referência, chegando a apresentar uma diferença de + 296% no grupo 1.

A seguir, na Tabela 2, são comparados resultados dos métodos F_N e S_N para os fatores de transmissão de grupo. Nota-se que os resultados do método S_N com as duas opções estão bem próximos dos resultados de referência (F_N) apesar dos resultados obtidos sem utilizar a opção "negative flux fix-up" apresentarem para todos os grupos melhor concordância com os resultados do método F_N . As discordâncias observadas nos primeiros grupos para os albedos quando a opção "negative flux fix-up" foi empregada não se manifestaram no cálculo dos fatores de transmissão. A razão é que, nos primeiros grupos, os fatores de transmissão são determinados fundamentalmente por raios gama que atravessam a placa sem colidir ou então sofrendo

Tabela 1 - Albedos de grupo A_i^*

Grupo	Método F_N	DTF69 ^a	DTF69 ^b
1	1,5570(-4)	1,5608(-4)	6,1672(-4)
2	1,3607(-3)	1,3612(-5)	1,5699(-3)
3	2,2129(-3)	2,2131(-5)	2,4448(-3)
4	3,5136(-3)	3,5137(-5)	3,7808(-3)
5	5,2552(-3)	5,2552(-5)	5,5582(-3)
6	7,8082(-3)	7,8081(-5)	7,8424(-3)
7	7,3321(-3)	7,3320(-5)	7,3781(-3)
8	1,0003(-2)	1,0003(-2)	9,9918(-3)
9	1,4220(-2)	1,4220(-2)	1,4190(-2)
10	2,1450(-2)	2,1450(-2)	2,1408(-2)
11	3,5287(-2)	3,5286(-2)	3,5224(-2)
12	6,5003(-2)	6,5003(-2)	6,4895(-2)
13	2,2359(-2)	2,2359(-2)	2,2306(-2)
14	1,7355(-2)	1,7355(-2)	1,7320(-2)
15	1,0196(-2)	1,0196(-2)	1,0174(-2)
16	3,0154(-3)	3,0153(-5)	3,0094(-3)
17	7,3692(-4)	7,3692(-4)	7,3547(-4)
18	4,8899(-5)	4,8898(-5)	4,8800(-5)
19	6,0834(-6)	6,0847(-6)	6,0725(-6)

a Sem utilizar a opção "negative flux fix-up".

b Utilizando a opção "negative flux fix-up".

colisões que desviam suas trajetórias de ângulos muito pequenos. Como para pequenos ângulos de espalhamento a representação das secções de choque de espalhamento em série de polinômios de Legendre não apresenta oscilações que atinjam valores negativos elevados os fluxos angulares encontrados são em geral positivos, daí o fato das duas opções de cálculo no método S_N praticamente não diferirem. Quanto aos albedos, que são determinados principalmente por retroespalhamento, a situação é outra, pois a representação das secções de choque de espalhamento apresenta oscilações que atingem valores negativos para grandes ângulos de espalhamento nos primeiros grupos, causando então a ocorrência de fluxos angulares negativos. Insistir na positividade do fluxo angular tem como consequência uma superes-

timação dos albedos nos primeiros grupos.

Tabela 2 - Fatores de transmissão de grupo B_i^*

Grupo	Método F_N	DTF69 ^a	DTF69 ^b
1	3,0755(-3)	3,0718(-3)	3,0717(-3)
2	1,7104(-3)	1,7092(-3)	1,7088(-3)
3	1,3852(-3)	1,3844(-3)	1,3838(-3)
4	1,4811(-3)	1,4802(-3)	1,4795(-3)
5	1,5822(-3)	1,5814(-3)	1,5804(-3)
6	1,6861(-3)	1,6852(-3)	1,6841(-3)
7	1,1797(-3)	1,1791(-3)	1,1782(-3)
8	1,2220(-3)	1,2214(-3)	1,2205(-3)
9	1,2593(-3)	1,2587(-3)	1,2576(-3)
10	1,2876(-3)	1,2870(-3)	1,2859(-3)
11	1,2995(-3)	1,2989(-3)	1,2978(-3)
12	1,2754(-3)	1,2748(-3)	1,2736(-3)
13	7,1754(-4)	7,1716(-4)	7,1656(-4)
14	6,2526(-4)	6,2491(-4)	6,2442(-4)
15	4,3287(-4)	4,3262(-4)	4,3228(-4)
16	1,2458(-4)	1,2451(-4)	1,2441(-4)
17	2,7222(-5)	2,7207(-5)	2,7185(-5)
18	1,8750(-6)	1,8740(-6)	1,8725(-6)
19	2,3489(-7)	2,3478(-7)	2,3459(-7)

a Sem utilizar a opção "negative flux fix-up"

b Utilizando a opção "negative flux fix-up".

4. Conclusões

Pode-se concluir com base nos resultados apresentados que a ocorrência de fluxos negativos em problemas de transporte de radiação gama é um fato que deve ser cuidadosamente analisado em qualquer cálculo de blindagem que utilize o método S_N . Constatada essa ocorrência, um esforço deve ser feito para determinar a sua origem entre secções de choque negativas ou esquemas numéricos inerentes ao método. Em termos práticos, uma varredura nas secções de choque para detetar possíveis valores negativos não deverá representar

uma carga extra de computação intolerável para a maioria dos problemas.

Agradecimentos

O autor agradece a J.H. Renken do Sandia National Laboratories pela geração das secções de choque e por comunicar os resultados do código DTF69 apresentados nas Tabelas 1 e 2 e a C.E. Siewert da North Carolina State University por várias discussões relacionadas a este trabalho.

Referências Bibliográficas

1. DAVISON, B. Neutron transport theory. Oxford University Press, London, 1957.
2. BROCKMANN, H. Nucl. Sci. Eng. 77 : 377-414, 1981.
3. ATTIA, E.A. e A.A. HARMS. Nucl. Sci. Eng. 59 : 319-25, 1976.
4. ODOM, J.P. Neutron transport with highly anisotropic scattering. Dissertação de Ph.D., Kansas State University, 1975.
5. TIMMONS, D.H. Trans. Am. Nucl. Soc. 17 : 553-4, 1973.
6. ODOM, J.P. e J.K. SHULTIS. Nucl. Sci. Eng. 59 : 278-81, 1976..
7. GOLDSTEIN, H. Fundamental aspects of reactor shielding. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1959.
8. RENKEN, J.H. Comunicação pessoal, 1981.
9. GARCIA, R.D.M. e C.E. SIEWERT. J. Comput. Phys. 46 : 237-70, 1982.
10. RENKEN, J.H. e K.G. ADAMS. An improved capability for solution of photon transport by the method of discrete ordinates. SC-RR-69-739. Sandia Laboratories, Albuquerque, N. Mex., Dezembro 1969.
11. SANCHEZ, R. e N.J. Mc CORMICK. Nucl. Sci. Eng. 80 : 481-535, 1982.