



22 a 27 de abril de 1990

ANAIS - PROCEEDINGS

**EDEF - UM PROGRAMA PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE
DIFUSÃO PARA MICROCOMPUTADORES**
ALMIR FERNANDES *
JOSÉ RUBENS MAIORINO **

* COORDENADORIA PARA PROJETOS ESPECIAIS
 MINISTÉRIO DA MARINHA
 DEPARTAMENTO DE SISTEMAS NUCLEARES
 DIVISÃO DE ENGENHARIA DE SEGURANÇA NUCLEAR
 CAIXA POSTAL 11256 - PINHEIROS
 CEP 05508 - SÃO PAULO - BRASIL

** COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR - SP
 INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
 DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE REATORES
 DIVISÃO DE FÍSICA DE REATORES
 CAIXA POSTAL 11049 - PINHEIROS
 CEP 05499 - SÃO PAULO - BRASIL

SUMÁRIO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um programa computacional para solução da equação de difusão em duas dimensões (com opção de "buckling" para simular a fuga axial) e dois grupos de energia pelo método dos elementos finitos para microcomputadores compatíveis com IBM-PC. Dentre as características do programa, cumpre destacar a facilidade para modelagem de domínios bidimensionais complexos, a entrada de dados por intermédio de um pré-processador incorporado ao programa e a saída, onde são apresentados graficamente os fluxos dos dois grupos. O programa calcula ainda o fator de multiplicação, o fator de pico e a distribuição de potência.

ABSTRACT

This work presents the development of a program to solve the two-group two-dimensional diffusion equation (with a buckling option to simulate axial leakage) applying the finite element method. It has been developed to microcomputers compatibles to the IBM-PC. Among the facilities of the program, we can mention the simplicity to represent two-dimensional complex domains, the input through a pre-processor and the output in which the fluxes are presented graphically. The program also calculates the multiplication factor, the peaking factor and the power distribution.

1. INTRODUÇÃO

O programa EDEF (Equação de Difusão, Elementos Finitos), soluciona a equação de difusão em geometria bidimensional ($x-y$) em dois grupos de energia em microcomputadores compatíveis com IBM-PC. O mesmo pode ser utilizado para estudo da técnica de elementos finitos (serviu de base para o desenvolvimento do programa ETEFEH para solução da equação de transporte em três dimensões [1]), bem como na solução da equação de difusão com propósitos educacionais.

2. DESENVOLVIMENTO

Seja a equação de difusão em multigrupo, considerando-se apenas espalhamento para energia decrescente ("downscattering"), fonte rápida devida à fissão em vários grupos e sem fonte externa:

$$-\nabla D_g \nabla \phi_g + \Sigma_{tg} \phi_g = \sum_{g'=1}^g \Sigma_{sg'g} \phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'} \phi_{g'} \quad (1)$$

onde ϕ_g é o fluxo do grupo g ; D_g é o coeficiente de difusão do grupo g ; Σ_{tg} é a secção de choque total do grupo g ; $\Sigma_{sg'g}$ é a secção de choque de espalhamento do grupo g' para o grupo g ; $\Sigma_{fg'}$ é a secção de choque de fissão do grupo g' . χ_g é a fração de neutrons de fissão que surgem no grupo g ; k é o fator de multiplicação efetivo; $\nu_{g'}$ é o número de neutrons liberados por fissão ocorrida no grupo g' .

Considerando apenas dois grupos de energia (rápido e térmico), com fissão nos dois grupos, originando neutrons no grupo rápido, tem-se:

$$-\nabla D_i \nabla \phi_i + \Sigma_{ri} \phi_i = S_i \quad (2)$$

sendo que, para o grupo rápido,

$$\Sigma_{r1} = \Sigma_{t1} - \Sigma_{s11} \quad (3a)$$

$$S = \frac{1}{k} (\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1 + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2) \quad (3b)$$

e, para o grupo térmico,

$$\Sigma_{r2} = \Sigma_{t2} - \Sigma_{s22} \quad (4a)$$

$$S = \Sigma_{s12} \phi_1 \quad (4b)$$

Soluciona-se o problema por meio de uma sequência iterativa, a partir de uma estimativa inicial para o fluxo nos dois grupos de energia e para o fator de multiplicação. O fator de multiplicação é reavaliado a cada nova iteração através de

$$k^{i+1} = \frac{\int d^3r S^{i+1}(r)}{\frac{1}{k^i} \int d^3r S^i(r)} \quad (5)$$

As condições de contorno para este problema são de três tipos:

i) vácuo:

$$\hat{n} \cdot \nabla \phi = -\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_S = -\frac{1}{d} \phi \Big|_S ; S \rightarrow (x,y) \in \delta D ; \quad (6)$$

onde d é a distância extrapolada;

ii) reflexão total:

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_S = 0 ; S \rightarrow (x,y) \in \delta D ; \quad (7)$$

iii) fluxo definido no contorno:

$$\phi \Big|_S = \phi_0 \Big|_S ; S \rightarrow (x,y) \in \delta D . \quad (8)$$

A solução da equação (2) sujeita às condições de contorno acima, será obtida por meio do método de elementos finitos, com a técnica de resíduos ponderados e a aproximação de Galerkin [5,6]. Desta forma, subdividindo o domínio em NE elementos triangulares, admitindo os parâmetros físicos constantes no interior de cada elemento e ainda trabalhando algebricamente com as equações, pode-se escrever a equação (2) acima sob a forma matricial para cada elemento como dado abaixo:

$$\underline{k} \cdot \underline{\phi} = \underline{S} ; \quad (9)$$

onde

$$k_{ij}^e = \frac{D^e [(y_i - y_k)(y_k - y_j) + (x_k - x_i)(x_i - x_k)]}{2\Delta^e} + \frac{(1 + \delta_{ij}) \Sigma_a^e \Delta^e}{24} + \frac{\xi \cdot (1 + \delta_{ij}) D^e d_{ij}}{6} , \quad (10)$$

$$f_i^e = \frac{S^e \Delta^e}{6} , \quad (11)$$

e ainda,

- Σ_a^e = seção de choque de absorção do elemento e ;
- Δ^e = área do elemento e ;
- d_{ij} = distância entre os nós i e j ;
- $\xi = \begin{cases} 0 & , \text{reflexão e fluxo definido} \\ 1/d & , \text{vácuo} \end{cases}$;
- D^e = coeficiente de difusão do elemento e ;
- S^e = valor da fonte no elemento e .

Por meio da topologia do sistema monta-se a matriz dos coeficientes (ou matriz global) a partir da matriz dos elementos. Para finalizar o problema, utiliza-se uma rotina de solução de sistemas lineares do tipo eliminação Gaussiana.

Para simular uma terceira dimensão, foi introduzida neste programa a opção de "buckling" (B). Desta forma, o fluxo de neutrons tridimensional é aproximado por

$$\phi(x,y,z) = \phi(x,y) \cdot \cos Bz \quad (12)$$

Esta aproximação implica em alterações para as equações (3) e (4), resultando respectivamente em:

$$\Sigma_{r1} = \Sigma_{t1} - \Sigma_{s11} + D_1 \cdot B^2 \quad (13)$$

$$\Sigma_{r2} = \Sigma_{t2} - \Sigma_{s22} + D_2 \cdot B^2 \quad (14)$$

O fluxo é ainda normalizado pelo valor da potência (P) do reator (dado de entrada), de tal forma que

$$P = \int_V \gamma \cdot \Sigma_f \cdot \phi \, dV \quad (15)$$

3. APRESENTAÇÃO GRÁFICA DO PROGRAMA

A principal facilidade apresentada pelo programa EDEF de solução da equação de difusão refere-se ao tratamento gráfico que foi dado ao mesmo. Com o objetivo de simplificar a entrada de dados, foram elaboradas telas auto-explicativas que permitem ao usuário utilizar o programa de modo simples e preciso. Este conjunto de telas configura o pré-processador do programa do programa EDEF.

Uma série acoplada de telas surge para o usuário à medida que o mesmo vai definindo suas opções. Desta forma, o usuário encontra opções desde executar um arquivo já previamente armazenado em disco, até fornecer todos os dados neste momento. Após a execução do problema em questão, o programa apresenta o valor do fator de multiplicação, o fluxo médio por região e os gráficos com os fluxos nos dois grupos de energia. Vale ressaltar que os fluxos são ainda armazenados em um arquivo de saída. O tempo de processamento é da ordem de alguns minutos para os problemas estudados.

4. TESTES COM O PROGRAMA EDEF

PROBLEMA NÚMERO UM

O domínio deste problema é um quadrado com 1 cm de lado, duas faces refletidas e duas faces com fluxo definido e igual a zero. O valor do coeficiente de difusão é 1 cm enquanto que a seção de choque de absorção vale 0 (zero) cm⁻¹.

Este problema foi obtido na referência [2], onde é apresentado o resultado analítico e uma solução obtida por diferenças finitas. Nota-se que, como $\Sigma_a = 0$, a equação de difusão se reduz à equação de condução de calor em estado estacionário. Da comparação dos resultados, nota-se que, a menos da origem (0,0), os resultados obtidos pela técnica de elementos finitos encontram-se mais próximos do resultado analítico do que os resultados obtidos pela técnica de diferenças finitas. A seguir, apresenta-se uma tabela com os resultados obtidos pelas duas técnicas numéricas em comparação com a solução analítica:

TABELA 1 – FLUXOS PARA O PROBLEMA 1

Posição	diferenças finitas	analítico	elementos finitos	$\Delta_{df}(\%)$	$\Delta_{ef}(\%)$
(0,0 ; 0,0)	0,2906	0,2947	0,3013	1,39	2,24
(0,0 ; 0,25)	0,2750	0,2784	0,2805	1,22	0,75
(0,0 ; 0,5)	0,2262	0,2293	0,2292	1,35	0,04
(0,0 ; 0,75)	0,1379	0,1397	0,1392	1,29	0,36
(0,0 ; 1,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(0,25; 0,0)	0,2750	0,2789	0,2805	1,40	0,11
(0,25; 0,25)	0,2605	0,2642	0,2645	1,40	0,11
(0,25; 0,5)	0,2148	0,2178	0,2172	1,30	0,20
(0,25; 0,75)	0,1315	0,1333	0,1327	1,35	0,45
(0,25; 1,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(0,5 ; 0,0)	0,2262	0,2293	0,2292	1,35	0,04
(0,5 ; 0,25)	0,2148	0,2178	0,2172	1,30	0,20
(0,5 ; 0,5)	0,1785	0,1811	0,1801	1,44	0,55
(0,5 ; 0,75)	0,1109	0,1127	0,1117	1,60	0,89
(0,5 ; 1,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(0,75; 0,0)	0,1379	0,1397	0,1392	1,29	0,36
(0,75; 0,25)	0,1315	0,1333	0,1327	1,35	0,45
(0,75; 0,5)	0,1109	0,1127	0,1117	1,60	0,89
(0,75; 0,75)	0,0711	0,0728	0,0715	2,34	1,79
(0,75; 1,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(1,0 ; 0,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(1,0 ; 0,25)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(1,0 ; 0,5)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(1,0 ; 0,75)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00
(1,0 ; 1,0)	0,0000	0,0000	0,0000	0,00	0,00

PROBLEMA NÚMERO DOIS

Este problema recebe a identificação "Benchmark Problem ID.13-A2" na referência [3]. O mesmo consiste em calcular a distribuição de fluxo e o fator de multiplicação para um problema em dois grupos de energia e sete regiões. Na figura 1 abaixo ilustra-se o domínio deste problema, enquanto que na tabela 2 apresentam-se os valores dos parâmetros físicos homogeneizados por zona.

Os resultados obtidos pelo programa EDEF foram comparados com os fornecidos pela referência [4], considerado padrão. Na tabela 3 apresenta-se uma comparação de

valores de fator de multiplicação.

TABELA 2 – DADOS DO PROBLEMA 2

região	grupo de energia	D (cm)	$\Sigma_T(\text{cm}^{-1})$	$\nu\Sigma_f(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{12}(\text{cm}^{-1})$
1	1	1,31700	0,019673	0,005925	0,010690
	2	0,58153	0,053920	0,098170	-
2	1	1,31440	0,019676	0,005242	0,010690
	2	0,57800	0,051740	0,082280	-
3	1	1,31492	0,019707	0,004820	0,011120
	2	0,57501	0,047170	0,072000	-
4	1	1,31596	0,019610	0,004337	0,011130
	2	0,57107	0,041400	0,059000	-
5	1	1,33014	0,019753	0,005605	0,010160
	2	0,69500	0,162600	0,024240	-
6	1	1,53468	0,010138	0,00	0,009095
	2	0,70205	0,004394	0,00	-
7	1	1,34625	0,037020	0,00	0,036825
	2	0,29682	0,007800	0,00	-

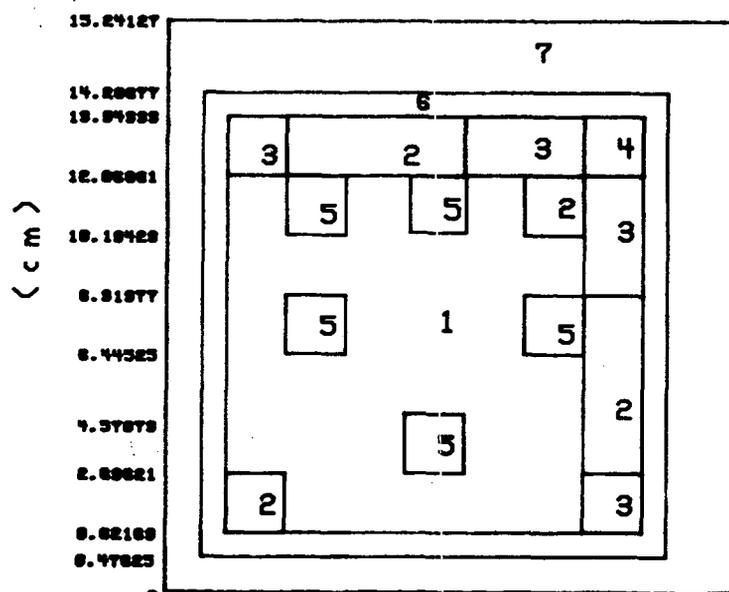


FIGURA 1. DOMÍNIO DO PROBLEMA 2.

TABELA 3 – FATOR DE MULTIPLICAÇÃO DO PROBLEMA 2

Benchmark	EDEF	Erro Relativo
1,087575	1,079419	0,75%

PROBLEMA NÚMERO TRÊS

Este problema recebe a identificação "Reator 2D-IAEA" na referência [4]. O mesmo consiste em calcular a distribuição de fluxo e o fator de multiplicação para um problema em dois grupos de energia e quatro regiões. Na figura 2 abaixo ilustra-se o domínio deste problema, enquanto que na tabela 4 apresentam-se os valores dos parâmetros físicos homogeneizados por zona.

Os resultados obtidos pelo programa EDEF foram comparados com os fornecidos pela referência [4], considerado padrão. Na tabela 5 apresenta-se uma comparação de valores de fator de multiplicação.

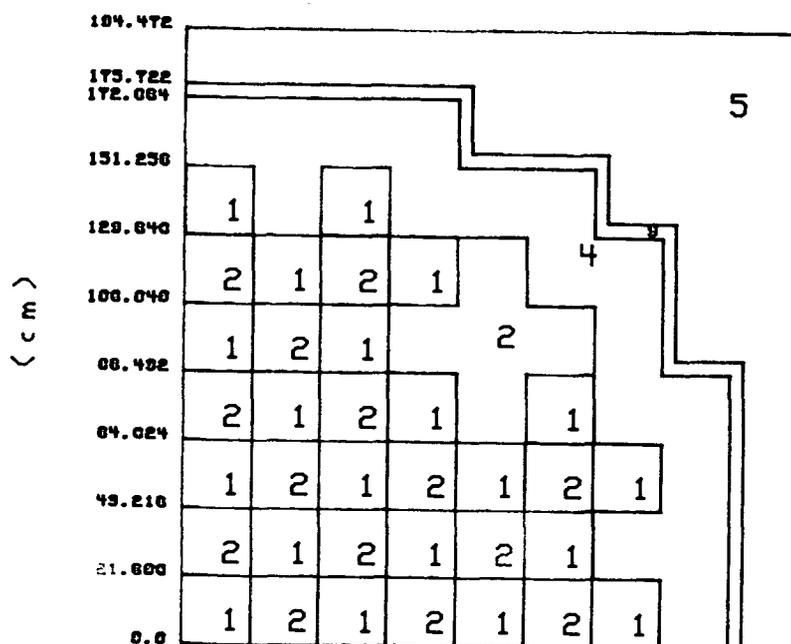


FIGURA 2- DOMÍNIO DO PROBLEMA 3

TABELA 4 – DADOS DO PROBLEMA 3

região	grupo de energia	D (cm)	$\Sigma_r(\text{cm}^{-1})$	$\nu\Sigma_f(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_g^1(\text{cm}^{-1})$
1	1	1,41760	0,025970	0,005360	0,017420
	2	0,37335	0,066690	0,104330	-
2	1	1,41970	0,025760	0,006010	0,016940
	2	0,37300	0,076060	0,124720	-
3	1	1,02130	0,003220	0,00	0,00
	2	0,57501	0,047170	0,00	-
4	1	1,38377	0,025164	0,00	0,024241
	2	0,29745	0,032006	0,00	-
5	1	1,45540	0,029500	0,00	0,029030
	2	0,28994	0,009490	0,00	-

TABELA 5 – FATOR DE MULTIPLICAÇÃO

Ono *	e . r .	Padrão	EDEF	e . r .
1,05009 ¹	1,56%	1,033999	1,052334 ¹	1,78%
1,03506 ²	0,10%		1,034309 ²	0,03%

* Os resultados apresentados sob o nome Ono referem-se aos resultados da referência [4], sendo que:

¹ refere-se ao domínio discretizado em 9x9 intervalos;

² refere-se ao domínio discretizado em 18x18 intervalos.

O resultado adotado como padrão refere-se à solução do problema pelo código CITATION com 170x170 intervalos, conforme referência [3].

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa no Estado de São Paulo) o apoio financeiro, sem o qual não teria sido possível o desenvolvimento do presente trabalho.

Referências

- [1] Fernandes, A., Maiorino, J.R., Solução da equação de transporte em geometria tridimensional pelo método dos elementos finitos e da expansão em harmônicos esféricos, Anais do VII Encontro Nacional de Física de Reatores, Recife, 26-28 abril de 1989, volume 1.

- [2] Torres, L. M. R., Distribuição de temperatura devida à geração de calor em blindagem de reatores nucleares, Rio de Janeiro, 1985 (Dissertação de mestrado, Instituto Militar de Engenharia).
- [3] Numerical Determination of the space, time, angle or energy distribution of particles in an assembly, ANL 7416, Illinois, 1972.
- [4] Ono, S., Aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de difusão em estado estacionário, São Paulo, 1982 (Dissertação de mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).
- [5] Zienkiewicz, O. C., Morgan, K., Finite elements and approximations, John Wiley & Sons, 1982.
- [6] Huebner, K. H., Thornton, E. A., The finite element method for engineers, John Wiley & Sons, 1982.