

DESENVOLVIMENTO DE UM APLICATIVO COMPUTACIONAL PARA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES MULTIGRUPOS DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL

Lisa S. Enomoto – lisaenomoto@iprj.uerj.br Hermes Alves Filho – halves@iprj.uerj.br Ricardo C. Barros – ricardob@iprj.uerj.br Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico – Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo. Neste trabalho apresentamos um aplicativo computacional desenvolvido na plataforma MATLAB para Windows para a modelagem da equação da difusão de nêutrons estacionária na formulação multigrupos de energia em geometria unidimensional. Neste código computacional estão disponibilizados um método analítico/direto e o método numérico clássico de diferenças finitas. Para ilustrar a aplicabilidade dos métodos implementados neste aplicativo, foram gerados resultados numéricos para um problema-modelo.

Palavras-chave: Teoria da difusão de nêutrons, Modelagem computacional determinística, Formulação multigrupo

1. INTRODUÇÃO

O modelo de difusão de nêutrons assume que se o fluxo destas partículas é maior em uma parte do domínio, do que em outra, haverá uma migração de nêutrons para a região onde o fluxo de nêutrons é menor. Essa migração dos nêutrons é modelada matematicamente através da chamada lei de Fick, que é a essência da teoria da difusão (Duderstadt & Hamilton, 1976), (Bell & Glasstone, 1970).

A formulação multigrupo de energia fundamenta-se na discretização da variável energética em grupos contíguos de energia. Estes grupos de energia são classicamente ordenados de forma crescente, indicando energia cinética decrescente das partículas.

Neste trabalho, foi desenvolvido um aplicativo computacional para a obtenção da solução da equação de difusão de nêutrons na formulação multigrupo de energia em geometria unidimensional, regime estacionário e meios não-multiplicativos. O aplicativo oferece dois métodos para obter a solução dessa equação, o método analítico/direto de difusão (Smith, 1979) que gera soluções numéricas completamente livres de erros de truncamento espacial e o método numérico de diferenças finitas. Convencionalmente, podemos aplicar os métodos de diferenças finitas (malha fina) ou os métodos nodais (malha grossa) para a discretização

espacial da equação da difusão considerando problema de fonte fixa. A solução numérica do problema discretizado pode ser resolvido por métodos que usam técnicas iterativas (Wachspress, 1966), (Greenspan; Kelber; Okrent, 1968), (Press; Teukolsky; Vetterling, 1992) ou soluções de forma direta, como propomos no paper. Este tipo de solução se torna viável considerando atualmente a boa arquitetura dos computadores.

Na próxima seção é apresentada a formulação matemática do problema estacionário de difusão de nêutrons na formulação multigrupo de energia em domínios unidimensionais e os dois métodos implementados para a resolução dessa equação. Na seção 3, é descrito o aplicativo computacional que foi desenvolvido na plataforma MATLAB para Windows. Na seção 4, são apresentados os resultados gerados pelo aplicativo computacional para um experimento numérico. Na última seção, uma breve conclusão é apresentada.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Considere a equação da difusão de nêutrons na formulação multigrupo de energia em geometria unidimensional, regime estacionário e em meios não-multiplicativos e suas condições de contorno à esquerda e à direita, respectivamente definidas num domínio unidimensional de comprimento L (Figura 1).

$$-\frac{d}{dx}\left[D_{g}(x)\frac{d}{dx}\phi_{g}(x)\right] + \sigma_{Tg}(x)\phi_{g}(x) = \sum_{g'=1}^{G}\sigma_{sg'\to g}(x)\phi_{g'}(x) + Q_{g}(x), \quad g=1:G,$$
 (1.a)

$$J_g(0) = \gamma_0 I_{0,g} - \alpha_0 \phi_g(0), \ g = 1:G$$
(1.b)

$$J_{g}(h_{N_{R}}) = -\gamma_{L}I_{L,g} + \alpha_{L}\phi_{g}(h_{N_{R}}), \quad g = 1:G,$$
(1.c)

onde *G* é o número total de grupos de energia; $\sigma_{T_g}(x)$ é a seção de choque macroscópica total (cm⁻¹) do grupo *g* de energia; $D_g(x)$ é o coeficiente de difusão (cm) do grupo *g* de energia; $\phi_g(x)$ é o fluxo escalar de nêutrons (nêutrons/cm² s) do grupo *g* de energia; $\sigma_{sg'\to g}(x)$ é a seção de choque macroscópica diferencial de espalhamento (cm⁻¹) do grupo *g'* para o grupo *g*; $Q_g(x)$ é uma fonte isotrópica que emite nêutrons (nêutrons/cm³) no grupo *g* de energia; $J_g(0)$ e $J_g(h_{N_g})$ são as correntes totais de nêutrons do grupo *g* de energia nos contornos esquerdo e direito, respectivamente; $I_{0,g}$ e $I_{L,g}$ são definidos como os fluxos isotrópicos de nêutrons do grupo *g* de energia incidentes nos contornos esquerdo e direito, respectivamente; 5 tipos de condição de condição de contorno. O aplicativo computacional desenvolvido oferece 5 tipos de condições de contorno para ambas as extremidades do domínio que são: reflexiva, fluxo nulo, corrente parcial prescrita (JP1), fluxo direcional prescrito (FP1) e fluxo angular prescrito tipo S₂. As condições de contorno tipos JP1, FP1 e S₂ são denominadas condições de contorno híbridas tipo albedo para problemas de difusão de nêutrons e são formas de aproximar a condição de contorno tipo prescrita (Xavier, 2011).

Os valores de $D_g(x)$ foram obtidos a partir da seguinte definição (Duderstadt & Hamilton, 1976):

$$D_g(x) = \frac{1}{3\sigma_{T_g}(x)}, \ g = 1:G.$$
 (2)

A Eq. (1.a) foi resolvida empregando dois métodos: um analítico e um numérico, descritos nas próximas subseções.

2.1 Método analítico/direto de difusão

Considere agora um domínio unidimensional heterogêneo de comprimento total L, com N_R regiões que podem ser constituídas de mesmos materiais ou de materiais distintos, como exemplificado na Figura 1. A região 1 e a região N_R na Figura 1 são constituídas do mesmo material e, portanto, constituem uma única zona material. Como os parâmetros materiais D_g , σ_{Tg} , e $\sigma_{sg'\rightarrow g}$, assim como a fonte externa Q_g , são constantes por grupo de energia no interior de cada região constituinte do domínio, a Eq. (1.a) aparece como

$$-D_{g}\frac{d^{2}}{dx^{2}}\phi_{g}(x) + \sigma_{T_{g}}\phi_{g}(x) = \sum_{g'=1}^{G}\sigma_{sg'\to g}\phi_{g'}(x) + Q_{g}, \ g = 1:G$$
(3)



Figura 1 – Domínio heterogêneo.

A Eq. (3) representa um sistema de *G* equações diferenciais ordinárias de segunda ordem, onde as incógnitas são os *G* fluxos escalares $\phi_g(x)$. A solução geral local para cada um destes fluxos escalares no interior de cada região do domínio é composta pela soma de uma componente homogênea com uma componente particular.

Neste trabalho foram consideradas apenas fontes externas isotrópicas e uniformes no interior de cada região; portanto, a solução particular é constante para cada grupo g de energia no interior de uma dada região. Por esta razão, quando esta componente é substituída na Eq. (3) a expressão obtida aparece como (Silva, 2017)

$$\sum_{g'=1}^{G} (\sigma_{Tg} \delta_{g'g} - \sigma_{sg' \to g}) \phi_{g'}^{p} = Q_{g}, \quad g = 1:G,$$
(4)

onde $\delta_{g'g} = \begin{cases} 1, g' = g \\ 0, g' \neq g \end{cases}$.

A Eq. (4) representa um sistema linear de equações algébricas, onde $\phi_{g'}^p$ é a compoente do vetor das *G* soluções particulares que precisam ser determinadas.

Para obter a componente homogênea por zona material, realizamos uma análise espectral admitindo uma solução elementar $\phi_g^h(x)$ dada por

$$\phi_g^h(x) = a_g(v)e^{-\frac{x}{v}}, \ g = 1:G.$$
 (5)

Substituindo a Eq. (5) na parte homogênea da Eq. (3), após alguma manipulação algébrica obtém-se a seguinte expressão:

$$\sum_{g'=1}^{G} \left(\frac{\sigma_{T_g} \delta_{g',g}}{D_g} - \frac{\sigma_{sg' \to g}}{D_g} \right) a_{g'}(\nu) = \frac{1}{\nu^2} a_g(\nu), \quad g = 1:G.$$
(6)

A Eq. (6) representa um problema de autovalor que admite G autovalores positivos associados a G autovetores de dimensão G. Para se obter o parâmetro v, é extraída a raiz quadrada do inverso de cada autovalor gerado. Portanto, os 2G parâmetros v aparecerão aos pares \pm , i.e., serão simétricos em relação à origem. Assim, a componente homogênea da solução geral local é determinada a partir de uma combinação linear utilizando as componentes dos 2G vetores e os 2G valores correspondentes de v da seguinte forma:

$$\phi_g^h(x) = \sum_{g'=1}^{2G} C_{\ell,r} a_g(v_\ell) e^{-\frac{x}{v_\ell}}, \quad g = 1:G, \quad x \in [0, h_r],$$
(7)

onde os parâmetros $a_g(v_\ell)$ e v_ℓ dependem da zona material que compõe a região r, e h_r representa a espessura da região r.

Para determinar as 2G constantes $C_{\ell,r}$ por região é necessário utilizar as condições de contorno, dadas pelas Eqs. (1.b) e (1.c), e de interfaces que possibilitem a construção de um sistema com $2GN_R$ equações algébricas em $2GN_R$ incógnitas.

Observa-se que, a partir das condições de contorno, foram estabelecidas 2*G* equações: *G* para o contorno esquerdo e *G* para o contorno direito. Porém, para completar o sistema algébrico de $2GN_R$ incógnitas, precisa-se de mais $2G(N_R - 1)$ equações. Para isso considera-se a continuidade do fluxo escalar e da corrente nas $(N_R - 2)$ interfaces do domínio, podendo assim, escrever

$$\phi_g^+(h_r) = \phi_g^-(0), \ g = 1:G, \ r = 1:N_R - 1$$
(10)

$$J_{g}^{+}(h_{r}) = J_{g}^{-}(0), \quad g = 1:G, \quad r = 1:N_{R} - 1.$$
(11)

Os superíndices "+" indicam que o fluxo e a corrente estão sendo calculados utilizando os dados e as constantes referentes à região que se localiza à esquerda das interfaces. Já os superíndices "-" indicam que o fluxo e a corrente estão sendo calculados utilizando os dados e as constantes referentes à região que se localiza à direita das interfaces. As equações obtidas a partir da continuidade do fluxo escalar (10) e da continuidade da corrente (11) são suficientes para completar o sistema de equações lineares e algébricas necessário para determinamos as 2G constantes por região. Uma vez calculadas estas constantes, torna-se possível o cálculo do fluxo escalar em qualquer posição x do domínio a partir da Eq.(12). Este cálculo é feito de forma direta sem a necessidade de um processo iterativo (Silva, 2017).

$$\phi_g(x) = \sum_{\ell=1}^{2G} C_{\ell,r} a_g(v_\ell) e^{-\frac{x}{v_\ell}} + \phi_{g',r}^p, \quad g = g' = 1:G, \quad x \in [0, h_r].$$
(12)

2.2 Método de diferenças finitas

Foi utilizado o método de diferenças finitas na configuração canto de malha para a solução numérica de problemas estacionários e unidimensionais de difusão de nêutrons na formulação multigrupo de energia.

Uma dada região foi dividida em NC células espaciais uniformes, como pode ser visto na Figura 2.



Figura 2 – Grade espacial em uma região R do domínio.

Em prosseguimento consideram-se três tipos de fronteiras de células: contorno esquerdo, interfaces interiores e contorno direito.

Considerando a Figura 3, onde representamos a primeira célula de discretização espacial com fronteira esquerda adjacente ao contorno esquerdo do domínio (x = 0),



Figura 3 – Primeira célula do domínio (contorno esquerdo, x = 0).

integramos a Eq. (1.a) na primeira célula fictícia, $x_0 \le x \le x_{3/2}$. Assim, o resultado aparece como

$$J_{\frac{3}{2},g} - J_{0,g} + \frac{h_1}{2}\sigma_{T1,g}\phi_{1,g} = \frac{h_1}{2}\sum_{g'=1}^G \sigma_{s1,g'\to g}\phi_{1,g'} + \frac{h_1}{2}Q_{1,g}, \quad g = 1:G$$
(13)

Fazendo $J_{0,g} = \gamma_0 I_{0,g} - \alpha_0 \phi_{1,g}$ na Eq. (13) e aplicando a fórmula centrada de 3 pontos (Burden & Faires, 1985) para a corrente em $x_{3/2}$ segundo a Lei de Fick, obtém-se a equação de diferença para a primeira célula de discretização espacial que é dada por

$$\left(\frac{D_{1,g}}{h_1} + \frac{h_1}{2}\sigma_{T1,g} + \alpha_0\right)\phi_{1,g} - \frac{D_{1,g}}{h_1}\phi_{2,g} - \frac{h_1}{2}\sum_{g'=1}^G\sigma_{s1,g'\to g}\phi_{1,g'} = \frac{h_1}{2}Q_{1,g} + \gamma_0 I_{0,g}, \ g = 1:G \quad (14)$$

Anais do XXI ENMC – Encontro Nacional de Modelagem Computacional e IX ECTM – Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais. Búzios, RJ – 08 a 11 Outubro 2018 Na Figura 4 representamos duas células interiores de discretização espacial consecutivas, em cujas interfaces devemos obter os fluxos escalares: $\phi_{i-1,g}$, $\phi_{i,g}$ e $\phi_{i+1,g}$. Observamos também na Figura 4 que definimos uma célula fictícia que é formada entre os pontos médios de duas células contíguas.



Figura 4 – Interfaces interiores ao domínio.

Primeiramente integramos a Eq.(1.a) na célula fictícia $x_{i-1/2} \le x \le x_{i+1/2}$ para obter

$$J_{i+1/2,g} - J_{i-1/2,g} + \frac{h_{i-1}}{2} \sigma_{T_{i-1,g}} \phi_{i,g} + \frac{h_{i}}{2} \sigma_{T_{i,g}} \phi_{i,g} = \sum_{g'=1}^{G} \left(\frac{h_{i-1}}{2} \sigma_{si-1,g' \to g} + \frac{h_{i}}{2} \sigma_{si,g' \to g} \right) \phi_{i,g'} + \frac{h_{i-1}}{2} Q_{i-1,g} + \frac{h_{i}}{2} Q_{i,g}, \quad g = 1:G.$$
(15)

Trabalhando com as correntes $J_{i+1/2,g}$ e $J_{i-1/2,g}$ usando as fórmulas de diferença avançada e recuada obtém-se a equação de diferença para as interfaces interiores, que é dada por

$$-\frac{D_{i-1,g}}{h_{i-1}}\phi_{i-1,g} + \left(\frac{D_{i-1,g}}{h_{i-1}} + \frac{D_{i,g}}{h_i} + \frac{h_{i-1}}{2}\sigma_{Ti-1,g} + \frac{h_i}{2}\sigma_{Ti,g}\right)\phi_{i,g} - \frac{D_{i,g}}{h_i}\phi_{i+1,g} + \sum_{j=1}^{G}\left(\frac{h_{i-1}}{2}\sigma_{si-1,g'\to g} + \frac{h_i}{2}\sigma_{si,g'\to g}\right)\phi_{i,g'} = \frac{h_{i-1}}{2}Q_{i-1,g} + \frac{h_i}{2}Q_{i,g}, \qquad g = 1:G.$$
(16)

Considerando a Figura 5 onde representamos a última célula (i = I) de discretização espacial com fronteira direita adjacente ao contorno direito do domínio (x = L),



Figura 5 – Última célula do domínio (contorno direito, x = L).

integramos a Eq. (1.a) na última célula fictícia, $x_{I+1/2} \le x \le x_{I+1}$. Assim, o resultado aparece como

$$J_{I+1,g} - J_{I+1/2,g} + \frac{h_I}{2}\sigma_{TN_R,g}\phi_{I+1,g} = \frac{h_I}{2}\sum_{g'=1}^G \sigma_{sN_R,g'\to g}\phi_{I+1,g} + \frac{h_I}{2}Q_{N_R,g}, \ g = 1:G.$$
(17)

Anais do XXI ENMC – Encontro Nacional de Modelagem Computacional e IX ECTM – Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais. Búzios, RJ – 08 a 11 Outubro 2018 Fazendo $J_{I+1,g} = -\gamma_L I_{L,g} + \alpha_L \phi_{I+1,g}$ na equação acima e usando a fórmula centrada de 3 pontos para a para a corrente em $x_{I+1/2}$, obtém-se a equação de diferença para a última célula de discretização espacial que é dada por (Duderstadt & Hamilton, 1976)

$$-\frac{D_{N_{R},g}}{h_{I}}\phi_{I,g} + \left(\frac{D_{N_{R},g}}{h_{I}} + \frac{h_{I}}{2}\sigma_{TN_{R},g} + \alpha_{L}\right)\phi_{I+1,g} + \frac{h_{I}}{2}\sum_{g'=1}^{G}\sigma_{sN_{R},g'\to g}\phi_{I+1,g'} = \frac{h_{I}}{2}Q_{N_{R},g} + \gamma_{L}I_{L,g}, \qquad g=1:G.$$
(18)

Concluindo, usa-se a Eq. (14) para a primeira célula espacial (i=1), a Eq. (16) para as células interiores (i=2:I) e a Eq. (18) para a última célula espacial (i=I) para os G grupos de energia. Estas equações formam um sistema de (I+1)G equações lineares e algébricas em (I+1)G incógnitas, que são os fluxos escalares de nêutrons nos cantos das células de discretização espacial nos G grupos de energia. Esse sistema foi resolvido utilizando a função "mldivide" no MATLAB.

3. APLICATIVO COMPUTACIONAL

Nesta seção é descrito o aplicativo computacional que foi desenvolvido na plataforma MATLAB para Windows, disponível no Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LABTRAN) do Instituto Politécnico.

A Figura 6 representa a janela de entrada do aplicativo computacional. Essa janela é dividida em cinco seções. Na seção "Método", o usuário seleciona o método de resolução que será utilizado para o cálculo dos fluxos escalares: analítico/direto ou diferenças finitas. Na seção "Dados do problema", o usuário insere o nome do arquivo texto no formato .txt que contém os dados das regiões e das zonas materiais que constituem o domínio. Na seção "Condições de contorno" o usuário informa as condições de contorno esquerdo e direito. Em se tratando de condições de contorno do tipo prescritas (JP 1, FP 1 ou S₂), ao clicar o botão "OK" uma tabela de uma linha e G colunas é construída para cada um dos contornos. Por meio destas tabelas, o usuário informa os fluxos isotrópicos de nêutrons para todos os G grupos de energia incidentes no contorno esquerdo ($I_{0,g}, g=1:G$) e os fluxos isotrópicos de nêutrons para todos os G grupos de energia incidentes no contorno direito $(I_{L,g}, g=1:G)$. Na seção "Cálculo do fluxo escalar", é oferecido ao usuário a possibilidade de cálculo do fluxo escalar para qualquer grupo de energia e em qualquer posição do domínio. Além deste recurso, o aplicativo oferece também a saída em formas de tabelas e gráficos, na seção "Tabela e gráfico do fluxo escalar x posição", de acordo com um passo de variação para a posição, definido pelo usuário. Para solicitar a opção de resultado em tabela, além do passo, o usuário precisa informar o grupo de energia em que serão calculados os fluxos. A tabela com as posições e fluxos escalares para este determinado grupo de energia definido pelo usuário é construída em uma janela secundária. A saída em forma de gráfico também solicita ao o usuário a inserção do grupo ou grupos de energia desejados. Para esbocar mais de uma curva em um mesmo sistema de eixos cartesianos, o usuário precisa inserir os grupos de energia desejados no campo "Gerar gráfico para o(s) grupo(s):" separando os valores por um espaço; além disso o usuário pode optar por plotar as G em um mesmo sistema de eixos cartesianos ao selecionar a opção "Todos os grupos" ao lado do botão "Gerar gráfico".

TelaPrincipal Difusão Multigrupo de Energia					
Método Analítico Dados do problema Arquivo .txt: G3.txt Importar dados	Cálculo do fluxo escalar Posição: 1 cm Grupo: 1 OK 0.665668 nêutrons/cm²s Tabela e gráfico do fluxo escalar x posição Passo tabela: 0.5 cm Gerar tabela para o gupo: 1 Gerar tabela				
Condições de contorno Esquerdo: Prescrita FP 1 Direito: Reflexiva	Passo gráfico: 0.01 cm Gerar gráfico para o(s) grupo(s): I Todos os grupos Gerar gráfico				

Figura 6 – Janela de interface do aplicativo computacional.

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção apresentamos um experimento numérico de um problema-modelo de difusão que resolvemos usando o método de diferenças finitas com grade de discretização espacial constituída de 1000 células por região e o método analítico/direto apresentado neste artigo, com o intuito de compararmos a precisão dos resultados.

O problema-modelo que foi utilizado é um domínio unidimensional homogêneo com 5 cm de comprimento dividido em 5 regiões com 1 cm de espessura cada, conforme ilustrado na Figura 7. O problema possui três grupos de energia (G=3) e as seções de choque macroscópicas totais (σ_{T_g} , g=1:3) e as seções de choque macroscópicas de transferência ($\sigma_{sg'\rightarrow g}$, g', g=1:3) estão listadas na Tabela 1. As condições de contorno à esquerda é do tipo prescrita FP 1, e os fluxos isotrópicos de nêutrons para todos os G grupos de energia incidentes nesse contorno possuem valores unitários ($I_{0,g} = 1, g = 1:3$). A condição de contoro à direita é do tipo reflexiva. O problema não possui fontes externas.

Figura 7 – Domínio unidimensional

$\sigma_{Tg}(cm^{-1})$	1	1,1	0,9
$\sigma_{sg' \rightarrow g}(cm^{-1})$	<i>g</i> = 1	<i>g</i> = 2	<i>g</i> = 3
g'=1	0,8	0,1	0,05
<i>g</i> ′ = 2	0	0,85	0,2
g'=3	0	0	0,8

Tabela 1 – Dados materiais do problema-modelo

Anais do XXI ENMC – Encontro Nacional de Modelagem Computacional e IX ECTM – Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais. Búzios, RJ – 08 a 11 Outubro 2018

A Tabela 2 apresenta os fluxos escalares (cm⁻² s⁻¹) em seis posições do domínio para os grupos g = 1:3, obtidos pelos métodos descritos na seção 2.

Posição (cm)	Método analítico/direto de difusão 0,073944 s ^a			Método de diferenças finitas ^b 1902,703699 s ^a		
	<i>g</i> = 1	<i>g</i> = 2	<i>g</i> = 3	<i>g</i> = 1	<i>g</i> = 2	<i>g</i> = 3
0	1,4419990359	1,5069528113	1,9102620267	1,4419990058	1,5069527884	1,9102620588
				$(2,087\times10^{-6}\%)^{\circ}$	$(1,51\times10^{-6}\%)^{c}$	$(1,68 \times 10^{-6}\%)^{\circ}$
1	0,6656676419	0,7310252259	1,5943296693	0,6656676411	0,7310252257	1,5943296721
				$(1,20 \times 10^{-7}\%)$	$(2,73 \times 10^{-8}\%)$	(1,75×10 ⁻⁷ %)
2	0,3091105708	0,3541039432	1,2007027394	0,3091105767	0,3541039491	1,2007027397
				(1,90×10 ⁻⁶ %)	$(1,66 \times 10^{-6}\%)$	(2,49×10 ⁻⁸ %)
3	0,1474806261	0,1754008177	0,8894647910	0,1474806322	0,1754008240	0,8894647946
				(4,13×10 ⁻⁶ %)	$(3,59 \times 10^{-6}\%)$	$(4,04 \times 10^{-7}\%)$
4	0,0788529188	0,0969703117	0,7011444413	0,0788529238	0,0969703172	0,7011444476
				(6,34×10 ⁻⁶ %)	$(5,67 \times 10^{-6}\%)$	(8,98×10 ⁻⁷ %)
5	0,0599503724	0,0749694042	0,6389485378	0,0599503770	0,0749694094	0,6389485451
				(7,67×10 ⁻⁶ %)	(6,93×10 ⁻⁶ %)	(1,14×10 ⁻⁶ %)

Tabela 2 – Fluxos escalares (cm⁻² s⁻¹) para o problema-modelo

a – Tempo de execução do método.

b – Grade de discretização espacial constituída de 1000 células por região.

c – Desvio relativo percentual em relação aos valores gerados pelo método analítico.

Como pode ser observado na Tabela 2, os resultados gerados pelos dois métodos foram semelhantes e o tempo de execução do método de diferenças finitas foi bem superior ao do método analítico/direto de difusão.

A Figura 8 ilustra as 3 curvas dos perfis dos fluxos escalares referentes aos 3 grupos de energia do problema-modelo, gerados pelo método analítico. As curvas geradas com o método de diferenças finitas foram semelhantes aos da Figura 8.



Figura 8 – Posição x fluxos escalares para os 3 grupos de energia

Anais do XXI ENMC – Encontro Nacional de Modelagem Computacional e IX ECTM – Encontro de Ciências e Tecnologia de Materiais. Búzios, RJ – 08 a 11 Outubro 2018

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresentamos duas metodologias para a solução da equação de nêutrons em regime estacionário, unidimensional, multigrupo em energia, aplicadas a problemas de fonte-fixa. Além disso, foi desenvolvido um aplicativo computacional, na linguagem MATLAB, que agilizou as simulações e a rápida interpretação dos seus resultados. Concluímos que o método analítico apresenta a mesma precisão dos resultados do tradicional método de diferenças finitas, centrado na malha, porém, com um tempo de processamento bem menor. Pretendemos no futuro estender esta metodologia para problemas heterogêneos e com geometria cartesiana bidimensional.

Agradecimentos

À Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN), pelo apoio financeiro e ao LABTRAN, por permitir o acesso à plataforma MATLAB.

REFERÊNCIAS

Bell, G. I.; Glasstone, S. (1970), "Nuclear Reactor Theory", 1 ed., Van Nostrand Reinhold Co., New York.

Burden, R. L.; Faires, J. D. (1985), "Numerical Analysis", PWS Publishens, Massachutts.

- Duderstadt, J. J.; Hamilton, L.J. (1976), "Nuclear Reactor Analysis", John Wiley & Sons, New York.
- Greespan, H.; Kelber, C. N.; Okrent, D. (1968), "Computing Methods in Reactor Physics", Gordon and Breach Science Publishers, New York.
- Press, H. W., Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T., et al. (1992), "Numerical Recipes in Fortran", 2 ed., Cambridge University Press, New York.
- Silva, A. S. (2017), "Métodos sintéticos analíticos de solução da equação de transporte de nêutrons na formulação multigrupo de energia com aproximações da teoria da difusão", Monografia, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo.
- Smith, K. S. (1979), "An analytic Nodal Method for Solving the Two-groups, Multidimensional, Static and Transient Neutron Diffusion Equation", M. Sc. Dissertation, Department of Nuclear Engineering, M.I.T., Cambridge, Mass.
- Wachspress, E. L. (1966), "Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics". Prentice-hall, New Jersey.
- Xavier, V. S. (2011), "Condições de contorno híbridas tipo albedo para problemas de difusão de nêutrons", Monografia, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo.

DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL CODE FOR THE SOLUTION OF THE MULTIGROUP NEUTRON DIFFUSION EQUATION IN SLAB GEOMETRY

Abstract. In this work we present a computational code developed in the MATLAB platform for Windows for the computational modeling of the stationary neutron diffusion equation in the energy multi-group formulation in slab geometry. In this computational code are available an analytical method and the classical numerical method of finite difference. To evaluate the applicability of these methods as presented in this paper, numerical results were generated for a model problem.

Keywords: Neutron diffusion theory, Deterministic computational modellig, Multigroup formulation