METODO PARA RESOLVER LA ECUACION DE LA DIFUSION DE LOS NEUTRONES UTILIZANDO POLINOMIOS DE INTERPOLACION POR TRAMOS PARA LA CONSTRUCCION DE LOS ESQUEMAS DE DIFERENCIAS

Daniel E. Milian Lorenzo(*)
Arnaldo Gómez Montenegro (**)
(*) Secretaría Ejecutiva para Asuntos Nucleares (SEAN)
(**) Instituto Superior Politénico José Antonio Echeverría (ISPJAE)

RESUMEN
Unos de los usos más importantes de los métodos numéricos en la ingeniería nuclear, está en el cálculo de las propiedades del reactor basado en la resolución de la ecuación de la difusión, la cual es de tipo elíptica. En el trabajo se describe un método para resolver esta ecuación, basado en un esquema local-unidimensional con una función spline bicúbica. Los resultados obtenidos, demuestran que este método es lo suficiente exacto y simple como para ser implementado en códigos de cálculo para los reactores nucleares.

ABSTRACT
One of the most important uses of numerical methods in nuclear engineering is in the calculation of reactor properties based on the multigroup formulation of diffusion theory. The diffusion equation is elliptic. A numerical method to solve this equation, which is based on a splitting scheme with a bicubic spline function is described. Results obtained in test cases indicated that this method may be of sufficient accuracy and simplicity for implementation in nuclear reactor-simulator computer codes.

INTRODUCCION

En el presente trabajo se presenta un método de construcción de esquemas de diferencias, para resolver la ecuación de la difusión de los neutrones. El método se basa en la utilización de polinomios de interpolación por tramos para la aproximación de la función incógnita. El método se creó para resolver los problemas de contorno para la ecuación de la conducción no estacionaria, y ahora se implementa para las ecuaciones elípticas.

Esquema Local-Unidimensional

La ecuación de la difusión de los neutrones en aproximación de un grupo neutrónico en coordenadas cartesianas, se escribe de la siguiente forma,

$$-D(x,y).\Delta\phi(x,y)+\Sigma_a(x,y)\phi(x,y)=\frac{1}{K_{eff}}.\nu\sum\nolimits_f(x,y)\,\phi(x,y); \qquad (1)$$

con las condiciones de fronteras,

$$\phi(x,y).|_{\Gamma}=\mu\,(x,y) \quad ; \qquad (2)$$

Donde $\phi(x,y)$ es la densidad del flujo de neutrones; $D(x,y)$, $\Sigma_a(x,y)$ y $\nu\Sigma_f(x,y)$, es el coeficiente de difusión y las secciones macroscópicas neutrónicas; y K_{eff} es el coeficiente efectivo de multiplicación.

La solución $\phi(x,y)$ es continua en R^*,

$$R^* = R \cup \Gamma = \{0\leq x\leq a \ ; \ 0\leq y\leq b\}$$

Utilizando un esquema local-unidimensional [2], la ecuación (1) se sustituye por ecucaciones unidimensionales, correspondientes a cada dirección X e Y,

$$-D(x,y).\Delta_x\phi(x,y)+\alpha_x(x,y).\Sigma_a(x,y)\phi(x,y) =$$

$$\frac{1}{K_{eff}}.\nu\sum\nolimits_f (x,y)\,\phi(x,y) \quad ; \qquad (3)$$

$$-D(x,y)\Delta_y\phi(x,y)+\Sigma_a(x,y)\phi(x,y) - \alpha_x(x,y)\,\Sigma_a(x,y)\phi(x,y) = 0 \quad ; \qquad (4)$$

donde

$$\Delta_x = \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \Delta_y = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \; ; \qquad (5)$$

$$\alpha_x(x,y) = 1 - \frac{D(x,y)}{\Sigma_a(x,y)} . \frac{\Delta_y\phi(x,y)}{\phi(x,y)} \qquad (6)$$

Como se supone constante en R* a D(x,y), $\Sigma_a(x,y)$ y $\nu\Sigma_f(x,y)$, en adelante los designaremos como D, Σ_a y $\nu\Sigma_f$ respectivamente.

FUNCION SPLINE BICUBICA

Considerando los números enteros M y N, en la región R* se establece la red,

$R^*_h = \{x_0=0<x_1<...<x_M=a \; ; \; y_0=0<y_1<...<y_N=b\}$

con nodos $P_{ij}(x,y)$; i=0,...,M; j=0,...,N, y pasos uniformes

$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ y $\Delta y_j = y_j - y_{j-1}$.

La función spline bicúbica en la región elemental $x_{i-1} \le x \le x_i$, $y_{j-1} \le y \le y_j$, se define como,

$$\varphi_{ij}(x,y) = a^{ij}_{00} + a^{ij}_{10}.(x-x_i) + a^{ij}_{20}.(x-x_i)^2 + a^{ij}_{30}.(x-x_i)^3$$

$$+a^{ij}_{01}.(y-y_j) + a^{ij}_{02}.(y-y_j)^2 + a^{ij}_{03}.(y-y_j)^3 \quad ; \qquad (7)$$

Para la determinación de los coeficientes del polinomio (7), en cada región elemental R_{ij}, se exige el cumplimiento de las siguientes condiciones de interpolación y continuidad,

a) cindiciones de interpolación:

$$\varphi_{ij}(x_i,y_j) = \phi_{ij}(x_i,y_j) \quad ;$$

$$i=1,...,M \quad ; \quad j=1,...N. \qquad (8)$$

b) condiciones de continuidad:

$$\varphi_{ij}(x_i-0,y_j) = \varphi_{i+ij}(x_i+0,y_j) \; ; \qquad (9)$$

$$\varphi_{ij}(x_i,y_j-0) = \varphi_{ij+1}(x_i,y_j+0) \; ; \qquad (10)$$

$$[\varphi_{ij}(x_i-0,y_j)]_x = [\varphi_{i+1j}(x_i+0,y_j)]_x \; ; \qquad (11)$$

$$[\varphi_{ij}(x_i,y_j-0)]_y = [\varphi_{ij+1}(x_i,y_j+0)]_y \; ; \qquad (12)$$

$$[\varphi_{ij}(x_i-0,y_j)]_{xx} = [\varphi_{i+1j}(x_i+0,y_j)]_{xx} = (m_1)_{ij} \qquad (13)$$

$$[\varphi_{ij}(x_i,y_j-0)]_{yy} = [\varphi_{ij+1}(x_i,y_j+0)]_{yy} = (m_2)_{ij} \qquad (14)$$

$$i=1,...,M-1 \quad ; \quad j=1,...,N-1$$

Resolviendo el sistema se obtienen las siguientes ecuaciones,

$$\frac{1}{6}\left[(m_1)_{i-1j} + 4(m_1)_{ij} + (m_1)_{i-1j}\right] = \frac{1}{\Delta x^2}.(\phi_{i-1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i+1j}) \qquad (15)$$

$$\frac{1}{6}\left[(m_2)_{ij-1} + 4(m_2)_{ij} + (m_2)_{ij+1}\right] = \frac{1}{\Delta y^2}.(\phi_{ij-1} - 2\phi_{ij} + \phi_{ij+1}) \qquad (16)$$

El miembro de la izquierda de (15) y (16), es una aproximación con segundo orden de precisión para la segunda derivada.

Se puede obtener un cuarto orden de precisión sin incrementar la cantidad de puntos del modelo [1], si tomamos las ecuaciones,

$$\frac{1}{12}.\left[(m_1)_{i-1j} + 10.(m_1)_{ij} + (m_1)_{i+1j}\right] = \frac{1}{\Delta x^2}. (\phi_{i-1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i+1j}); \qquad (17)$$

$$\frac{1}{12}.\left[(m_2)_{ij-1} + 10.(m_2)_{ij} + (m_2)_{ij+1}\right] = \frac{1}{\Delta y^2}.(\phi_{ij-1} - 2\phi_{ij} + \phi_{ij+1}); \qquad (18)$$

DISCRETIZACION DE LA ECUACION

Para la resolución numérica se introduce en R* la red cuadrada R^*_h, con un paso $\Delta x = \Delta y = h$.

Se discretiza el sistema de ecuaciones (3) y (4), y se aproxima $\phi(x,y)$, mediante la función spline

$\varphi_{ij}(x,y)$. Entonces en cada región elemental R_{ij} se escribe,

$$-D.(m_1)_{ij} + \alpha_{xij}.\Sigma_a.\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{K_{eff}}.\upsilon\Sigma_f.\phi_{ij}^{n}\ ; \quad (19)$$

$$-D.(m_2)_{ij} + \Sigma_a.\phi_{ij}^{n+1} = \alpha_{xij}.\Sigma_a.\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}}\ ; \quad (20)$$

$$(m_1)_{ij} = \Delta_x\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \quad ; \quad (m_2)_{ij} = \Delta_y\phi_{ij}^{n+1}$$

donde n+½ es la iteración entre n y n+1.

Las ecuaciones (15) y (16) se escriben como,

$$\frac{1}{6}\left[(m)_{i-1j} + 4(m)_{ij} + (m)_{i+1j}\right] = \frac{1}{\Delta h^2}.(\phi_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}} - 2\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \phi_{i+1j}^{n+\frac{1}{2}}) \quad (21)$$

$$\frac{1}{6}\left[(m_2)_{ij-1} + 4(m_2)_{ij} + (m_2)_{ij+1}\right] = \frac{1}{\Delta h^2}.(\phi_{ij-1}^{n+1} - 2\phi_{ij}^{n+1} + \phi_{ij+1}^{n+1}) \quad (22)$$

Combinando las ecuaciones (19) y (21), se obtiene la expresión para calcular $\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}}$ fila a fila. De igual forma con(20) y (22) se obtiene la expresión para calcular ϕ_{ij}^{n+1} por columnas, constituyendo este último la solución después que convergen las iteraciones.

Los sistemas que se obtienen son tridiagonales, de segundo orden, y se completan con las condiciones de fronteras discretizadas. Para aumentar al cuarto orden, en lugar de las ecuaciones (15) y (16) se utilizan (17) y (18). Una vez obtenida la solución, se puede construir la función spline bicúbica, y reconstruir la solución en una red con un paso menor.

Resultados Numéricos

Se resuelve la ecuación,

$-D.\Delta\phi(x,y) + \Sigma_a.\phi(x,y) = q(x,y)$, en $0 \le x \le 1$, $0 \le y \le 1$. Con las condiciones de fronteras, $\phi(0,y)=\sin(\frac{\pi}{2}.y)$, $\phi(1,y)=1+\sin(\frac{\pi}{2}.y)$, $\phi(x,0)=\sin(\frac{\pi}{2}.x)$ y $\phi(x,1)=1+\sin((\frac{\pi}{2}.x)$. Se conoce la solución exacta $\phi(x,y)=\sin(\frac{\pi}{2}.x)+\sin(\frac{\pi}{2}.y)$. Además, D=1,

$\Sigma_a=1$ y $q=[1+(\frac{\pi}{2})^2].].[\sin(\frac{\pi}{2}.x)+\sin(\frac{\pi}{2}.y)]$. El problema fue resuelto utilizando los esquemas de segundo y cuarto orden y tres pasos de la red, es decir, h=0.20, h=0.10 y h=0.05. El criterio de convergencia de las iteraciones se tomó igual a 10^{-4}.

Los resultados de la comparación entre la solución numérica y la exacta,demuestran que la exactitud aumenta al disminuir el paso de la red, y se incrementa prácticamente al doble al aumentar el orden del esquema de diferencias.

Paso	Orden	Error Máximo Relativo
0.20	2	0.49 %
0.20	4	-0.28 %
0.10	2	-0.22 %
0.10	4	-0.12 %
0.05	2	-0.08 %
0.05	4	-0.04 %

Ahora, se presentan los resultados de los cálculos, para 4 nodos de la región, y se comparan con la solución exacta,

	x=0.2	x=0.4	x=0.6	x=0.8	Solución	Paso	Orden
y=0.6	1.11803	1.39680	1.61803	1.76007	Exacta		
	1.12197	1.39529	1.61635	1.76374	Númerica	0.20	2
	1.12042	1.39697	1.61819	1.76248	Númerica	0.20	4
	1.11893	1.39643	1.61763	1.76089	Númerica	0.10	2
	1.11861	1.39684	1.61807	1.76065	Númerica	0.10	4
	1.11825	1.39671	1.61793	1.76027	Númerica	0.05	2
	1.11818	1.39681	1.61804	1.76022	Numérica	0.05	4

La reconstrucción de la solución, a partir de la función spline bicúbica construida para un paso de la red de 0.20, un cuarto orden de precisión, y en el nodo (0.40,0.60), se presenta a continuación,

	x=0.25	x=0.30	x=0.35	x=0.40	Solución
y=0.45	1.03213	1.10344	1.17195	1.23723	Exacta
	1.03126	1.10133	1.17016	1.23711	Reconstruida
y=0.50	1.08979	1.16110	1.22960	1.29489	Exacta
	1.08850	1.15858	1.22741	1.29436	Reconstruida
y=0.55	1.14309	1.21440	1.28290	1.34819	Exacta
	1.14200	1.21208	1.28090	1.34785	Reconstruida
y=0.60	1.19170	1.26301	1.33151	1.39680	Exacta
	1.19112	1.26120	1.33002	1.39697	Reconstruida

CONCLUSIONES

Se demostró la efectividad del método para resolver la ecuación de la difusión. Es un método adecuado para el cálculo de red gruesa, debido a que los esquemas de diferencias de cuarto orden que se construyen y que se combinan con el esquema local-unidimensional, proporcionan una exactitud satisfactoria de los resultados. Por otro lado, los sistemas algebraícos finales están constituidos por una matriz muy estructurada, lo cual facilita el proceso de cálculo sin un gran esfuerzo, en cuanto a operaciones aritméticas y requerimiento de memoria de la computadora. La solución se reconstruye con una exactitud adecuada en una red fina, a partir de los resultados de una red gruesa.

REFERENCIAS

1. GOMEZ, A. (1992): "Construcción de esquemas de diferencias para la resolución numérica de problemas iniciales y de contorno por el método de la interpolación por tramos". Tesis de Doctor. ISPJAE, Cuba. En español.

2. SAMARSKI, A.A. (1986): "Introducción a los métodos numéricos". Editorial Mir. Moscú. En español.