

METODOS NUMERICOS DE DIFERENCIAS FINITAS AVANZADOS PARA RESOLVER LA ECUACION DE DIFUSION DE LOS NEUTRONES

Daniel Millian Lorenzo¹, Carlos García Hernández² y Dany Sánchez Domínguez²

¹Centro de Tecnología Nuclear

²Instituto Superior de Ciencias y Tecnología Nuclear

RESUMEN

La tarea de la determinación del campo de liberación de energía en los reactores nucleares energéticos es de vital importancia para el buen funcionamiento y la seguridad de un CEN. Es por ello que se continúa trabajando en el desarrollo de modelos físico-matemáticos para la simulación de los procesos físico-neutrónicos que ocurren en la zona activa de los reactores nucleares. Los modelos de red gruesa basados en métodos de diferencias finitas (FD) han demostrado tener ciertas limitaciones en su exactitud, por lo que es una tarea actual el desarrollo de nuevos métodos para la solución en red gruesa de la ecuación de difusión de neutrones (EDN). En el trabajo se desarrolla un nuevo método de solución de la EDN para redes gruesas, el cual alcanza un mayor orden de exactitud, que los métodos de FD tradicionales. Los resultados obtenidos para una zona activa modelo se comparan contra tareas de pruebas analíticas y numéricas. Para la implementación de los algoritmos diseñados se empleó el compilador Fortran Power Station Versión 3.2.

ABSTRACT

The task of determining the energy field liberation in the power nuclear reactors is of vital importance for the good operation and the safety of a nuclear plant. For this reason continues working in the development of mathematics models for the simulation of the nuclear processes that occurs in the active zone of the nuclear reactors. The models of gross mesh based on finite differences methods (FD) have demonstrated certain limitations in their exactness. Therefore is a current task the development of new methods for the solution of the equation of diffusion of neutrons (EDN) in gross mesh. In this work is developed a new method for solving the EDN in gross mesh. That reaches a higher order of exactness, than traditional FD methods. The outputs obtained for a model zone active is compared against analytic and numeric benchmarks. For the computational implementation of the designed algorithms we employed the Fortran Power Station Version 3.2 compiler.

INTRODUCCION

La Ecuación de Difusión (ED) describe el balance neutrónico en la zona activa del reactor nuclear; por lo cual es utilizada como modelo en los cálculos de red gruesa. Tradicionalmente se resuelve empleando el Método de Diferencias Finitas (MDF), este presenta limitaciones en cuanto a rapidez, exactitud y eficiencia computacional.

En el presente trabajo mostraremos un novedoso enfoque del método de diferencias finitas que permite resolver la ED con coeficientes constantes y obtener el autovalor principal y la autofunción asociada al mismo con exactitud y un uso eficiente de los recursos de la computadora. Este se conoce como el Método de Aproximación de Sumas (MAPS) para la Ecuación de Difusión de los neutrones en aproximación de un grupo.

Método de aproximación de sumas para la ecuación de difusión a un grupo neutrónico

Para el desarrollo del modelo partiremos de la ED en aproximación monoenergética, para geometría cuadrada y un medio homogéneo, con condición de contorno de primera especie:

$$-D(x,y)\Delta\phi(x,y) + \Sigma_a(x,y)\phi(x,y) = q(x,y)\phi(x,y) - \mu(x,y)$$

El modelo desarrollado se apoya en las ideas fundamentales del MAPS, al dividir el problema original multidimensional en varios problemas unidimensionales más sencillos, el paso de una iteración a otra se realiza en varias etapas en cada una de las cuales se utiliza un esquema corriente de dos capas, dichos esquemas por separado no aproximan la ecuación de partida, pero la suma de los residuos para cada paso intermedio tiende a cero.

Basándonos en las ideas anteriores se escribe el esquema iterativo del sistema empleando las siguientes expresiones:

$$-D\Delta_x\phi(x,y)^{n+\frac{1}{2}} + \alpha_x(x,y)\Sigma_a\phi(x,y)^{n+\frac{1}{2}} = q(x,y)$$

$$-D\frac{\partial^2\phi(x,y)^{n+1}}{\partial y^2} + \Sigma_a\phi(x,y)^{n+1} = \alpha_x(x,y)\Sigma_a\phi(x,y)^{n+\frac{1}{2}}$$

El coeficiente $\alpha_x(x,y)$ garantiza el cumplimiento de las condiciones del esquema aditivo para el sistema anterior y durante el proceso iterativo este coeficiente se determina a través de la expresión:

$$\alpha_x^n(x,y) = \alpha_x^{n-1}(x,y) \frac{\phi^{n+\frac{1}{2}}(x,y)}{\phi^{n-1}(x,y)}$$

Para obtener los esquemas en diferencias que aproximen las derivadas de segundo orden presentes en las ecuaciones con un alto orden de precisión se utiliza como función de interpolación un Spline bicúbico, en la región elemental R_{ij} , $x_{i-1} \leq x \leq x_i$, $y_{j-1} \leq y \leq y_j$, y se define como:

$$\begin{aligned} \phi_{ij}(x,y) = & \alpha_{00}^{ij} + \alpha_{10}^{ij}(x-x_i) + \alpha_{20}^{ij}(x-x_i)^2 + \alpha_{30}^{ij}(x-x_i)^3 \\ & + \alpha_{01}^{ij}(y-y_i) + \alpha_{02}^{ij}(y-y_i)^2 + \alpha_{03}^{ij}(y-y_i)^3 \end{aligned}$$

A continuación se brinda el sistema de ecuaciones formado por las condiciones de interpolación y continuidad para cada uno de los nodos de la red.

a) condición de interpolación:

$$\phi_{ij}(x_i, y_j) = \phi_{ij}(x_i, y_j) \quad i = 1, \dots, I; \quad j = 1, \dots, J$$

b) condiciones de continuidad:

$$\phi_{ij}(x_i - 0, y_j) = \phi_{i+1j}(x_i + 0, y_j)$$

$$\phi_{ij}(x_i, y_j - 0) = \phi_{i+1j}(x_i, y_j + 0)$$

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

$$[\phi_{ij}(x_i, y_j - 0)]_y = [\phi_{i+1j}(x_i, y_j + 0)]_y$$

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

$$[\phi_{ij}(x_i, y_j - 0)]_{yy} = [\phi_{i+1j}(x_i, y_j + 0)]_{yy}$$

$$i = 1, \dots, I-1; \quad j = 1, \dots, J-1$$

al resolverlo se obtienen las siguientes expresiones donde el miembro izquierdo representa una aproximación para las segundas derivadas con un orden de precisión $O(h^2)$:

$$\frac{1}{6}[(m_1)_{i-1j} + 4(m_1)_{ij} + (m_1)_{i+1j}] = \frac{1}{h^2}(\phi_{i-1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i+1j})$$

$$\frac{1}{12}[(m_2)_{ij-1} + 10(m_2)_{ij} + (m_2)_{ij+1}] = \frac{1}{h^2}(\phi_{ij-1} - 2\phi_{ij} + \phi_{ij+1})$$

Se realizan transformaciones algebraicas en las expresiones anteriores y teniendo en cuenta el desarrollo de la segunda derivada en serie de Taylor es posible obtener esquemas en diferencia con un orden de precisión $O(h^4)$:

$$\frac{1}{12}[(m_1)_{i-1j} + 10(m_1)_{ij} + (m_1)_{i+1j}] = \frac{1}{h^2}(\phi_{i-1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i+1j})$$

$$\frac{1}{12}[(m_2)_{ij-1} + 10(m_2)_{ij} + (m_2)_{ij+1}] = \frac{1}{h^2}(\phi_{ij-1} - 2\phi_{ij} + \phi_{ij+1})$$

Se aproxima el flujo a través de la función Spline descrita anteriormente y al discretizar el sistema iterativo de las ecuaciones de difusión podemos escribir en cada región elemental R_{ij} :

$$-D(m_1)_{ij} + \alpha_{xij}\Sigma_a\phi_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{k}q_{ij}$$

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

Al escribir las ecuaciones anteriores en notación matricial y combinarlas con los esquemas en diferencias obtenidos para cada una de las direcciones correspondientes, se obtienen los siguientes Sistemas de Ecuaciones Lineales Algebraicos (SELA) asociados a cada una de las dirección:

$$(T_1)_j(\Phi)_j^{n+\frac{1}{2}} = (\bar{F}_1)_j + (\bar{R}_1)_j$$

$$(T_2)_j(\Phi)_j^{n+1} = (\bar{F}_2)_j + (\bar{R}_2)_j$$

Se obtienen las matrices $(T_1)_j$ y $(T_2)_j$ tridiagonales de dimensiones $(I-1) \times (I-1)$ y $(J-1) \times (J-1)$. Los componentes de la matriz $(T_1)_j$ y los vectores $(\bar{F}_1)_j + (\bar{R}_1)_j$ son:

$$a_i = \alpha_{xi-1j}\Sigma_a - 12\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

RESULTADOS NUMERICOS

En la validación de la metodología de cálculo descrita en el epígrafe anterior se generó una tarea de prueba con el programa de difusión de red fina SNAP3D, las características de la misma se describen a continuación:

- Longitud del dominio 180 cm .
- Flujo cero en la frontera.
- Propiedades físicas homogéneas en toda la región.
- Relación de constantes:

Tabla 1. Relación de constantes de la región de cálculo

Constantes	Valor
D	1.000
Σ_a	0.021
$\nu\Sigma_f$	0.022

Los resultados obtenidos con el MAPS en el cálculo del autovalor fundamental y la autofunción asociada al mismo, que se corresponden con el coeficiente efectivo de multiplicación y la distribución de flujo neutrónico respectivamente, se compararon con los obtenidos con el Método de Diferencias Finitas tradicional.

Se realizaron corridas para diferentes pasos de la malla, desde redes gruesas a finas. Los resultados obtenidos en el cálculo del autovalor fundamental se muestran en la Tabla 2.

En ella: K_{eff} es el autovalor fundamental del sistema o coeficiente efectivo de multiplicación, Errk (%) es el error relativo del autovalor y N° Iter es el número de iteraciones externas. Los valores obtenidos para K_{eff} con el MAPS son satisfactorios con errores relativos muy pequeños y mejores que los obtenidos por el MDF con un menor número de iteraciones externas. En la Tabla 3 se muestran los resultados obtenidos en el cálculo de la distribución de flujo neutrónico:

$$b_i = 10\alpha_{xij}\Sigma_a + 24\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

$$c_i = \alpha_{xi+1j}\Sigma_a - 12\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

$$f_i = q_{i-1j} + 10q_{ij} + q_{i+1j}$$

para $i = 1, \dots, I - 1$

$$r_1 = \left[-\alpha_{x0j}\Sigma_a + 12\left(\frac{D}{h^2}\right) \right] \phi_{0j}^{n+1/2}$$

$$r_i = 0, i = 2, \dots, I - 2$$

$$r_{I-1} = \left[-\alpha_{xIj}\Sigma_a + 12\left(\frac{D}{h^2}\right) \right] \phi_{Ij}^{n+1/2}$$

Los elementos de la matriz $(T_2)_i$ y de los vectores $(\bar{F}_2)_i + (\bar{R}_2)_i$ se calculan a través de las siguientes expresiones:

$$a_j^* = \Sigma_a - 12\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

$$b_j^* = 10\Sigma_a - 24\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

$$c_j^* = \Sigma_a - 12\left(\frac{D}{h^2}\right)$$

$$f_j^* = \alpha_{xj-1}\Sigma_a\phi_{j-1}^{n+1/2} + 10\alpha_{xj}\Sigma_a\phi_{ij}^{n+1/2} + \alpha_{xj+1}\Sigma_a\phi_{ij+1}^{n+1/2}$$

$$r_1^* = \left[-\Sigma_a + 12\left(\frac{D}{h^2}\right) \right] \phi_{i0}^{n+1}$$

$$r_j^* = 0; j = 2, \dots, J-2$$

$$r_{J-1}^* = \left[-\Sigma_a + 12\left(\frac{D}{h^2}\right) \right] \phi_{iJ}^{n+1}$$

Los sistemas de ecuaciones obtenidos se caracterizan por tener matrices simétricas, con diagonal dominante y sus soluciones pueden obtenerse por cualesquiera de los métodos convencionales de resolución de sistemas de ecuaciones lineales algebraicos (SELA), por la rapidez, exactitud y sencillez de programación se recomienda el uso del método de factorización.

Tabla 2. Resultados del cálculo del autovalor

Criterios de convergencia para las iteraciones:

Valor Patrón K_{eff} : 1.018087Error Autovalor: 1×10^{-5} Error Flujo: 1×10^{-4}

Puntos	MAPS			MDF		
	K_{eff}	Errk (%)	Nº Iter	K_{eff}	Errk (%)	Nº Iter
5 x 5	1.018014	7.17×10^{-3}	49	1.018893	7.92×10^{-3}	56
10 x 10	1.017997	8.84×10^{-3}	52	1.018219	7.23×10^{-3}	54
20 x 20	1.017988	9.72×10^{-3}	52	1.108050	6.63×10^{-3}	54
50 x 50	1.017947	1.58×10^{-2}	49	1.017905	1.79×10^{-3}	53
100 x 100	1.017926	1.37×10^{-2}	48	1.017615	4.63×10^{-3}	53

Tabla 3. Resultados del cálculo de la autofunción (flujo neutrónico).

Puntos	MAPS			MDF		
	ErrMax ϕ (%)	σ (%)	Nº Iter	ErrMax ϕ (%)	σ (%)	Nº Iter
5 x 5	7.464	7.05	49	67.31	67.04	56
10 x 10	2.227	1.78	52	3.332	1.82	54
20 x 20	0.542	0.56	52	0.971	0.55	54
50 x 50	0.423	0.39	49	1.165	0.50	53
100 x 100	0.441	0.41	48	2.703	1.16	53

En la Tabla 3:

ErrMax ϕ (%) es el error relativo máximo del flujo, σ (%) es la dispersión o raíz cuadrática media de los errores relativos.

El MAPS permite obtener con exactitud los valores de la autofunción para diferentes pasos espaciales. Logrando mejores resultados que el MDF tradicional fundamentalmente en cálculos de red gruesa (Tabla 3).

El MAPS posibilita la reconstrucción del campo de liberación de energía a partir de la función de interpolación.

Los resultados obtenidos con el MAPS demuestran sus posibilidades para ser usado en el cálculo físico de los reactores nucleares.

REFERENCIAS

- [1] SAMARSKI, A.A. (1986): "Introducción a los métodos numéricos", Editorial Mir, Moscú.
- [2] GOMEZ MONTENEGRO, A. (1992): "Construcción de esquemas de diferencias para la resolución numérica de problemas iniciales y de contorno por el método de interpolación por tramos", Tesis de Doctorado, ISPJAE. Cuba.
- [3] SANCHEZ DOMINGUEZ, D. (1998): "Desarrollo de Métodos Numéricos avanzados para la solución de la Ecuación de Difusión de los Neutrones", Tesis de Diploma, ISCTN, Cuba.
- [4] MILLIAM LORENZO, D. (1998): "Método para resolver la Ecuación de difusión de los Neutrones utilizando Polinomios de Interpolación por Tramos para la construcción de los Esquemas de Diferencias", *Revista de la Sociedad Cubana de Física*, Cuba.