



Redução e Aplicação da BTE à Geofísica de Poços

JADIR DA CONCEIÇÃO DA SILVA

DEPARTAMENTO DE GEOLOGIA / UFRJ, Brasil

Resumo

A eficiência na modelagem numérica de perfis nucleares de poços esbarra na obtenção de uma equação ideal aos objetivos propostos. A equação de difusão mais simples empregada origina-se da aplicação da Lei de Fick na redução da equação de transporte de Boltzmann (BTE). Ela, no entanto, não permite obter explicitamente os parâmetros físicos envolvidos, principalmente o coeficiente de difusão e as seções de transição entre grupos. Neste trabalho, é apresentada uma forma alternativa de reduzir a BTE ao mesmo tempo em que permite obter de forma matematicamente explícita os diversos parâmetros envolvidos. A equação de difusão é obtida como uma aproximação P_ℓ da equação de transporte de Boltzmann no espaço de fase onde as variáveis direção, fonte e fluxo angular são expandidas em harmônicos esféricos através dos polinômios ortogonais de Legendre. Também é apresentada a decomposição espectral da BTE para um sistema fisicamente mais simples, denominado aproximação de difusão para multigrupos de energia. Como resultado, percebe-se que a forma final obtida é bastante eficiente no que se refere à modelagem numérica de perfis nucleares de poço.

INTRODUÇÃO

A equação de transporte de Boltzmann (BTE), no espaço de fase, para um meio heterogêneo e sem multiplicação é dada pela seguinte equação integro-diferencial:

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, E, \Omega) + \Sigma_T(\mathbf{r}, E) \Psi(\mathbf{r}, E, \Omega) = \int_{S^2} \int_E N_s(\mathbf{r}) \sigma_s(\Omega \cdot \Omega', E, E') \Psi(\mathbf{r}, E', \Omega') dE' d\Omega' + S(\mathbf{r}, E, \Omega), \quad (1)$$

onde Ω é o vetor unitário direção, $S(\mathbf{r}, E, \Omega)$ é a fonte externa, \mathbf{r} é o vetor espacial, E a energia e $\Psi(\mathbf{r}, E, \Omega)$ é o fluxo diferencial ou angular (Barry and Pollard, 1982). A seção de choque total macroscópica é dada por $\Sigma_T(\mathbf{r}, E) = N_a(\mathbf{r}) \sigma_a(E) + N_s(\mathbf{r}) \sigma_c(E)$, onde $N_a(\mathbf{r})$ e $N_s(\mathbf{r})$ são as densidades de materiais absorvedores e espalhadores das formações. O parâmetro $\sigma_a(E)$ é a seção de choque microscópica para ambas as absorções fotoelétrica e Compton. O parâmetro $\sigma_c(E)$ é a seção de choque microscópica para o espalhamento Compton. A seção de choque microscópica diferencial, $\sigma_s(\Omega \cdot \Omega', E, E')$, mede a probabilidade de transição do fóton da direção Ω' para a direção Ω e da energia E' para a energia E .

Infelizmente a equação (1) só é idealmente resolvida pelo método Monte Carlo, tornando o cálculo computacionalmente ineficiente. Portanto, a fim de se obter uma solução eficiente e rápida, a equação (1) deve ser reduzida pela aproximação P_ℓ , onde o fluxo angular e a fonte são expandidas em harmônicos esféricos através dos polinômios ortogonais de Legendre.

REDUÇÃO DA BTE

A redução da equação (1) consiste basicamente em expandir a(s) fonte(s) e o fluxo angular em harmônicos esféricos de $\mu = \cos\theta$, onde θ é o ângulo entre a direção arbitrária Ω e a direção principal \mathbf{r} (Figura 1). Como o fluxo escalar monoenergético (excluiremos a partir daqui o termo energia, E , para simplificação) é por definição

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega, \quad (2)$$

e de forma idêntica a fonte escalar, a expansão de ambos será

$$\Psi(\mathbf{r}, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \Phi_\ell(\mathbf{r}) P_\ell(\mu), \quad (3a)$$

$$S(\mathbf{r}, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} S_{\ell}(\mathbf{r}) P_{\ell}(\mu). \quad (3b)$$

onde $\Phi_{\ell}(\mathbf{r})$ e $S_{\ell}(\mathbf{r})$ são o fluxo escalar e a fonte, respectivamente, e $P_{\ell}(\mu)$ é o polinômio de Legendre. Dada a invariância rotacional em φ das distribuições da fonte e fluxo, tem-se

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(r, \mu) = |\Omega| |\nabla \Psi(r, \mu)| \cos \theta = \mu \nabla \Psi(r, \mu). \quad (4)$$

Dessa forma,

$$d\Omega = -d\varphi d\theta. \quad (5)$$

Inserindo as equações (4) e (5) em (1), tem-se

$$\mu \nabla \Psi(r, \mu) + \Sigma_T(r) \Psi(r, \mu) = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 N_s(r) \sigma_s(\mu, \mu') \Psi(r, \mu') d\mu' d\varphi + S(r, \mu). \quad (6)$$

A seção de choque diferencial microscópica, $\sigma_s(\mu, \mu')$, é também expandida em harmônicos de $\mu_0 = \cos \alpha$, onde α é o ângulo entre as direções de incidência e espalhamento (Figura 1). Esta seção será

$$\sigma_s(\mu_0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{\ell} P_{\ell}(\mu_0) \quad \text{para } -1 \leq \mu_0 \leq 1, \quad (7)$$

onde

$$\sigma_{\ell} = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0) P_{\ell}(\mu_0) d\mu_0. \quad (8)$$

A fim de explicitar μ_0 em função de μ , faz-se uso do teorema de adição dos polinômios ortogonais de Legendre (Luke, 1969)

$$\sigma_s(\mu_0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{\ell} P_{\ell}(\mu) P_{\ell}(\mu') + \sum_{\ell=0}^{\infty} 2 \sum_{m=1}^{\ell} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(\mu) P_{\ell}^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi'). \quad (9)$$

e que substituída na equação (6) resulta em

$$\mu \nabla \Psi(r, \mu) + \Sigma_T(r) \Psi(r, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} N_s(r) \sigma_{\ell} P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 P_{\ell}(\mu') \Psi(r, \mu') d\mu' + S(r, \mu). \quad (10)$$

que é conhecida como aproximação P_{ℓ} da BTE. Ao multiplicar cada lado da equação (10) pelo harmônico $P_n(\mu)$, e integrar de -1 a +1, obtém-se uma série de $n+1$ equações diferenciais de primeira ordem.

APROXIMAÇÃO P_1

Na aproximação P_1 assume-se que a contribuição dos termos de segunda ordem da expansão são desprezíveis (Etherington, 1958). Inicialmente, nota-se que as propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Legendre P_{ℓ} não permitem uma relação aceitável se inserirmos as equações (3a) e (3b) diretamente em (10) devido ao fator μ no primeiro termo (Nowosad, 1978). No entanto, podemos usar como alternativa a condição adicional de ortogonalidade a seguir (Luke, 1969)

$$\int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) P_{\ell}(\mu) d\mu = \begin{cases} 0 & \text{se } \ell \neq n+1 \\ \frac{n+1}{2n+1} \frac{2}{2(n+1)+1} & \text{se } \ell = n+1. \end{cases} \quad (11)$$

Se multiplicarmos a equação (10) por P_n , $n=0, 1$ e integrar a equação resultante de -1 a +1, obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\nabla\Phi_1(\mathbf{r}) + \Sigma_T(\mathbf{r})\Phi_0(\mathbf{r}) = N_s(\mathbf{r})\sigma_0\Phi_0(\mathbf{r}) + S_0(\mathbf{r}) \text{ para } n = 0, \quad (12a)$$

$$\nabla\left(\int_{-1}^1 \mu P_z(\mu)\Psi(\mathbf{r},\mu)d\mu\right) = N_s(\mathbf{r})\sigma_1\Phi_1(\mathbf{r}) + S_1(\mathbf{r}) \text{ para } n = 1. \quad (12b)$$

A invariância da fonte externa, $S(\mathbf{r},\Omega) = S(\mathbf{r},-\Omega)$, faz com que $\sigma_0 = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0)d\mu_0 = \sigma_s$, e dessa forma $S_1(\mathbf{r}) = \int_{-1}^1 \mu S(\mathbf{r},\mu)d\mu$.

Inserindo a equação(11) nas equações (12a) e (12b) tem-se o novo sistema

$$\nabla\Phi_1(\mathbf{r}) + \Sigma_a(\mathbf{r})\Phi_0(\mathbf{r}) = S_0(\mathbf{r}) \text{ onde } \Sigma_a(\mathbf{r}) = \Sigma_T(\mathbf{r}) - N_s(\mathbf{r})\sigma_s \quad (13a)$$

$$\nabla\Phi_0(\mathbf{r}) - 3[\Sigma_T(\mathbf{r}) - N_s(\mathbf{r})\sigma_1]\Phi_1(\mathbf{r}) = 0. \quad (13b)$$

que podem ser combinadas em uma equação simples para a componente isotrópica do fluxo $\Phi_0(\mathbf{r})$. A eliminação de $\Phi_1(\mathbf{r})$ das equações (13a) and (13b) resulta na aproximação de difusão da BTE original

$$\nabla \cdot [\mathbf{D}(\mathbf{r})\nabla\Phi_0(\mathbf{r})] - \Sigma_a(\mathbf{r})\Phi_0(\mathbf{r}) + S_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (14)$$

onde $S_0(\mathbf{r})$ é a densidade total de fótons tendo a mesma energia que $\Phi_0(\mathbf{r})$, mas produzidas por fontes externas e o parâmetro $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \left\{3[\Sigma_T(\mathbf{r}) - N_s(\mathbf{r})\sigma_1]\right\}^{-1}$ é o coeficiente de difusão na forma explícita.

EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA MULTIGRUPOS

Suponhamos agora que as energias dos raios gama estão distribuídas em um número finito de grupos de energia. Para descrever esta distribuição, o intervalo total de energias $[E_0, E_G]$ é dividido em G sub-intervalos $I_g = [E_{g-1}, E_g]$, para $g = 1, 2, \dots, G$ e tal que $E_0 > E_1 > E_2 > \dots > E_G$ e $\max|E_{g-1} - E_g| \rightarrow 0$ quando $G \rightarrow \infty$. A equação para multigrupos determina soluções aproximadas $\Phi_g(\mathbf{r})$ para o fluxo escalar integrado em cada sub-intervalo de energia I_g , resultando em

$$-\nabla \cdot [\mathbf{D}_g(\mathbf{r})\nabla\Phi_g(\mathbf{r})] + \Sigma_T(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}) = S_g(\mathbf{r}) + \sum_{g'=1}^{g-1} b_{gg'}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}), \quad (15)$$

onde o último termo corresponde aos termos da integral da equação (1) envolvendo $\Phi_g(\mathbf{r})$ e que foram incorporados à fonte externa $S_g(\mathbf{r})$ como elemento de transição entre os grupos, conforme mostra a Figura 2. Na forma do operador linear $\mathbf{L}_g = -\nabla \cdot [\mathbf{D}_g(\mathbf{r})\nabla] + \Sigma_{T,g}(\mathbf{r})$, dado como elementos da matriz diagonal \mathbf{L} , e fazendo de Φ, s e \mathbf{B} os vetores fluxo escalar, fonte externa e matriz de transição, respectivamente, a equação de difusão é reduzida ao sistema de equações lineares $\mathbf{L}\Phi = \mathbf{B}\Phi + s$ ou na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{L}_1 & & & \\ & \mathbf{L}_2 & 0 & \\ & 0 & \ddots & \\ & & & \mathbf{L}_G \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_G \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{G1} & b_{G2} & \dots & b_{GG} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_G \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_G \end{bmatrix} \quad (16)$$

CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi apresentado um método matematicamente eficiente para reduzir a equação de transporte de Boltzmann (BTE) a um estado em que o fluxo depende apenas das variáveis espaciais e das propriedades físicas do meio. O sistema de difusão para multigrupos resultou em aproximações simples da equação de difusão e os parâmetros físicos, além de poderem ser considerados constantes dentro de cada grupo do modelo físico, sem incorrer a erros apreciáveis, foram obtidos de forma explícita, o que permite suas utilizações nas soluções numéricas de perfis nucleares de poços.

REFERÊNCIAS

Barry, J. M. and Pollard, J. P., 1982, *Solution of neutron diffusion linear equations by the method of implicit non-stationary iteration*, in Noye, J., *Numerical solution of partial differential equations*: North-Holland Publishing, 605-622.

Etherington, H., 1958, *Nuclear engineering handbook*: McGraw-Hill.

Luke, Y. L., 1969, *The special functions and their approximations*: Academic Press Inc.

Nowosad, P., 1978, *Elementos da teoria dos reatores nucleares*, in Nowosad, P., *Operadores positivos e otimização - aplicação à engenharia nuclear*, CBPF, 29-62.

AGRADECIMENTOS

Agradeço o apoio computacional do NCE - Núcleo de Computação Eletrônica da UFRJ e do Setor de Geologia de Engenharia e Ambiental do Depto. de Geologia da UFRJ.

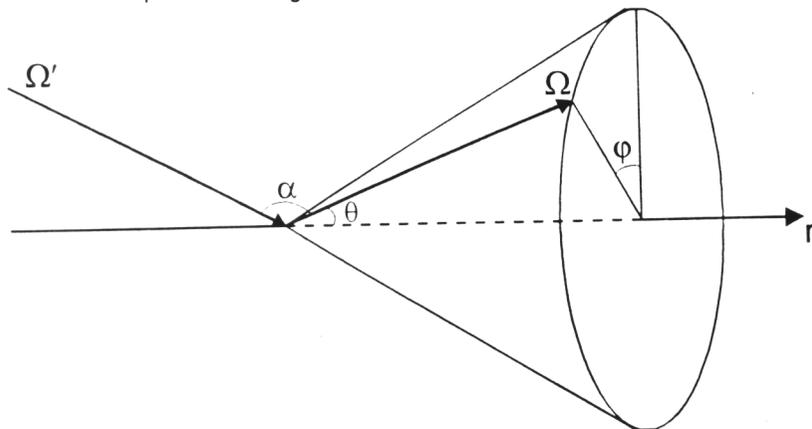


Figura 1 - Relações angulares para o espalhamento de fótons.

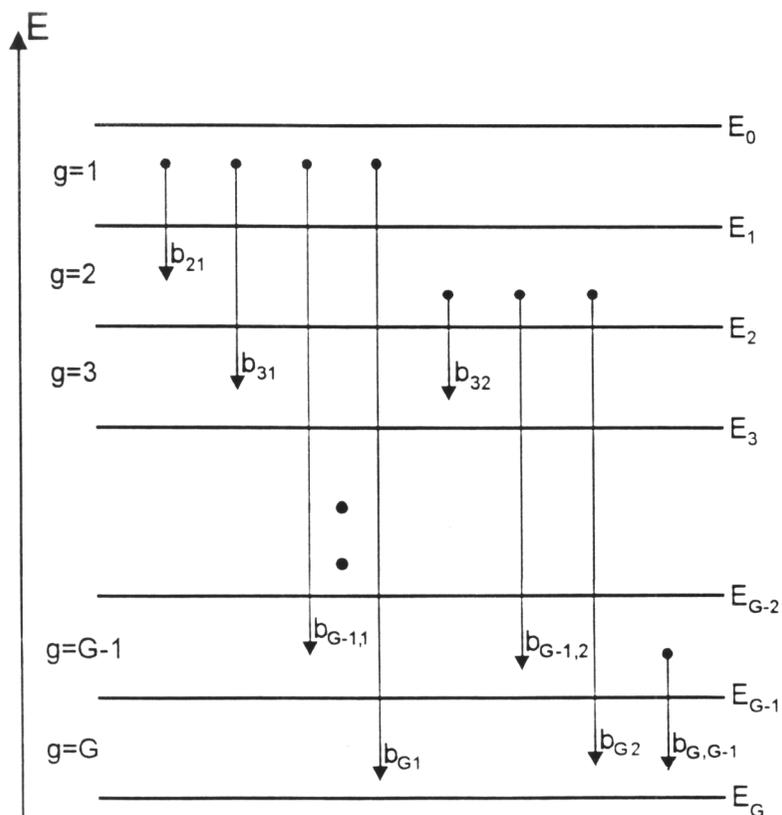


Figura 2 - Esquema de transição de fótons entre grupos de energia.