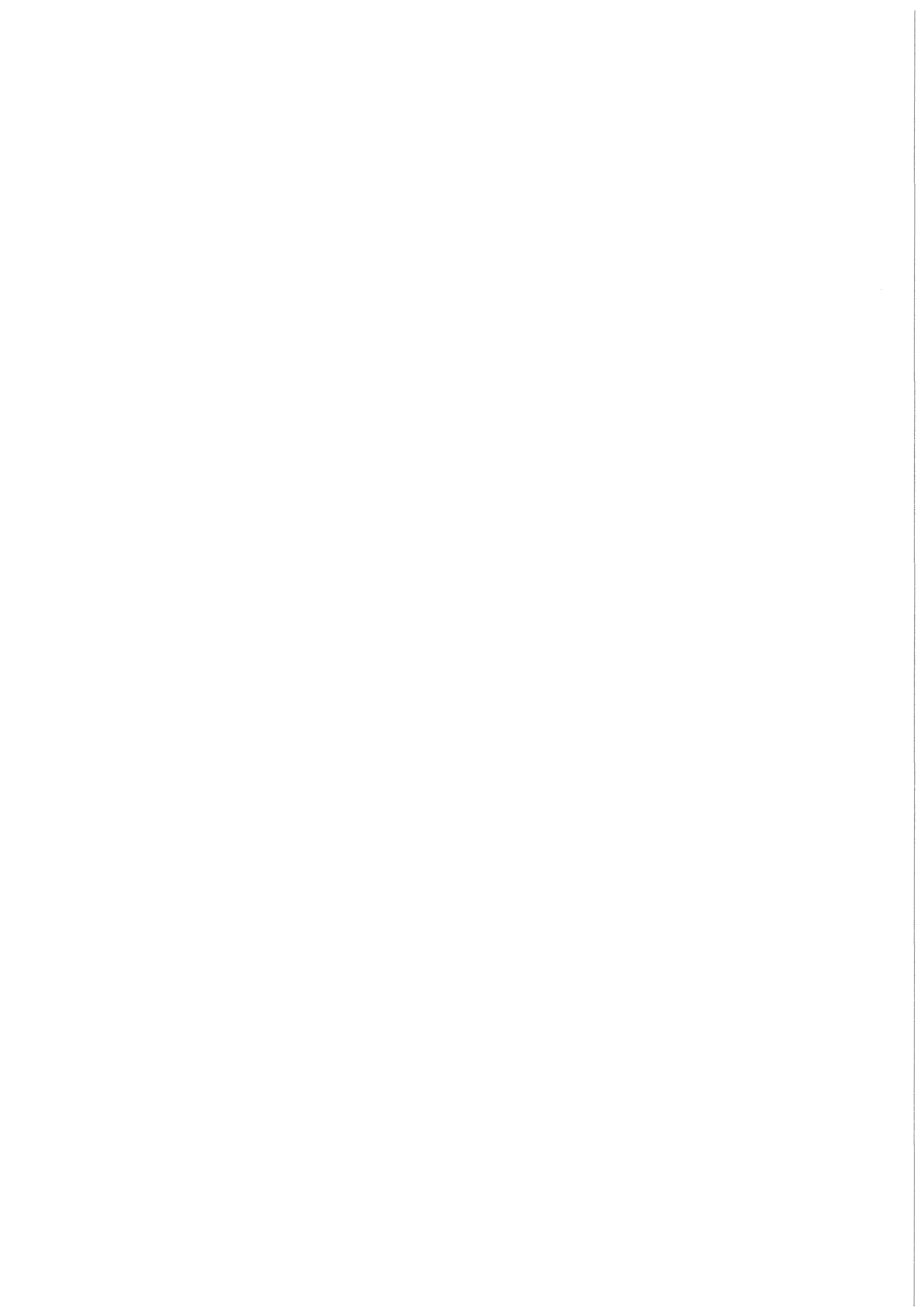


KfK 3289
März 1982

Über das Konvergenzverhalten des Iterationsverfahrens in den Neutronendiffusionsprogrammen D3D und D3E

B. Stehle
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe



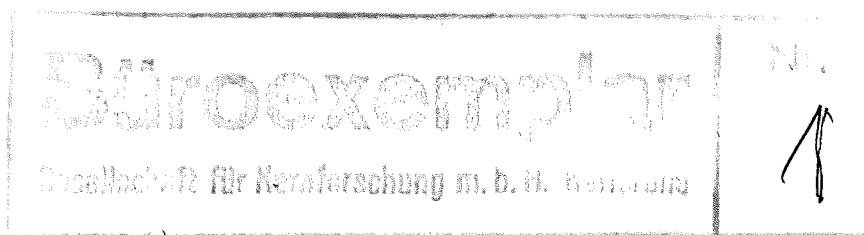
Kernforschungszentrum Karlsruhe

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

KfK 3289

Über das Konvergenzverhalten des Iterationsverfahrens
in den Neutronendiffusionsprogrammen D3D und D3E

B. Stehle



Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Über das Konvergenzverhalten des Iterationsverfahrens
in den Neutronendiffusionsprogrammen D3D und D3E

Zusammenfassung:

Die Neutronendiffusionsprogramme D3D und D3E lösen die Multigruppendiffusionsgleichungen durch die Technik äußere Iteration für die Quellverteilung und innere Iterationen für die Verteilungen der Gruppenflüsse. Die inneren Iterationen bestehen aus zwei geschichteten Blocküberrelaxationen: in den Energiegruppen mit den Ebenen als Blöcke (genannt Gruppeniterationen) und in den Ebenen mit Zeilentupeln als Blöcke (genannt Ebeneniterationen). Das Konvergenzverhalten der äußeren Iteration hängt von der Anzahl der Gruppeniterationen, das der Gruppeniterationen von der Anzahl der Ebeneniterationen ab. Die Anzahlen der Gruppen- und Ebeneniterationen werden bestimmt durch obere Schranken für die relativen Flußänderungen. Die dadurch nicht konstanten inneren Iterationszahlen bewirken nicht monotones Konvergenzverhalten und irreguläre Sprünge von numerischen Werten der äußeren Iteration. Dies wird an Hand von aus der Literatur übernommenen Beispielen dargestellt. Außerdem werden Möglichkeiten zur Behébung derartiger Schwierigkeiten aufgezeigt.

On the Convergence Behaviour of the Iteration Procedure
in the Neutron Diffusion Programs D3D and D3E

Summary:

The neutron diffusion programs D3D and D3E solve the multigroup diffusion equations by the technique, outer iteration for the distribution of the source and inner iterations for the distribution of the group fluxes. The inner iterations consist of two nested block overrelaxations: with the planes as the blocks within the energy groups (called group iterations) and with tuples of lines as blocks within the planes (called plane iterations). The convergence behaviour of the outer iteration depends on the number of the group iterations, the behaviour of the group iterations on the number of the plane iterations. These numbers of the inner iterations are determined by upper bounds for the relative flux changes and, therefore, vary from outer iteration to outer iteration causing non-monotonic convergence behaviour and irregular jumps of numerical values of the outer iteration. This is demonstrated by means of examples taken from the literature. In addition, ways to overcome such difficulties are indicated.

Beschreibung des Iterationsverfahrens

Das Iterationsverfahren zur Lösung der Multigruppendiffusionsgleichungen in den Programmen D3D und D3E ist in /1/ und /2/ beschrieben und wird, soweit notwendig, hier kurz dargestellt.

Gelöst werden die Multigruppendiffusionsgleichungen

$$\begin{aligned} & - \nabla D^g(T) \nabla \phi^g(T) + R^g(T) * \phi^g(T) \\ & = \sum_{h=1, g-1} S^{g,h}(T) * \phi^h(T) + (1/k_{eff}) * \sum_{h=1, G} F^{g,h}(T) * \phi^h(T) \quad g=1(1)G \quad (1) \end{aligned}$$

in einem Lösungsbereich, in dem in Teilintervallen die Größen $D^g(T)$, $R^g(T)$, $S^{g,h}(T)$ und $F^{g,h}(T)$ konstant sind.

$D^g(T)$ Diffusionskoeffizient

$R^g(T)$ Removalquerschnitt

$S^{g,h}(T)$ die Streuung aus der Energiegruppe h in die Gruppe g
($h < g$, d. h. nur Abwärtsstreuung)

$F^{g,h}(T)$ die Neutronenerzeugung durch Spaltung
aus der Energiegruppe h in die Gruppe g

ϕ^g Neutronenfluß der Energiegruppe g, ϕ^g und $D^g \nabla \phi^g$ stetig

g Index der Energiegruppe, g=1 Gruppe höchster Energie

G Anzahl der Energiegruppen

T Ortsvektor (in cartesischen Koordinaten $T=(X,Y,Z)$,

in Zylinderkoordinaten $T=(\theta,R,Z)$,

in Dreieckkoordinaten $T=(U,V,W,Z)$, $U-V-W=0$)

k_{eff} Eigenwert

Auf den Rändern des Lösungsbereichs gelten logarithmische Randbedingungen (n Außennormale des Randes, T auf dem Rand):

$$- D^g(T) * \langle n, \text{grad } \phi^g(T) \rangle = c(T) * \phi^g(T) \quad (2)$$

Zur Diskretisierung wird über den Lösungsbereich ein "achsenparalleles" Gitter gelegt, derart, daß Gitterebenen auf den Grenzflächen der Mischungsbereiche konstanter Querschnitte liegen. Über die um die Gitterpunkte gelegten Volumenelemente (Boxen) werden die Multigruppen-gleichungen unter der Annahme Fluß=constant im Volumenelement integriert und in ein lineares algebraisches Gleichungssystem übergeführt, das sich wie folgt schreiben läßt:

$$(A-S)*\phi = 1/keff*F*\phi \quad (3)$$

Die Matrix A beschreibt die Diffusions- und Removalterme (Siebenpunktformel in Rechteck- und Zylindergeometrie, Neunpunktformel in Dreieck-Z-Geometrie), die untere Dreiecksmatrix S die Streuterme und die Matrix F die Spaltterme des Gleichungssystems.

oder

$$\phi = 1/keff*(A-S)^{-1}*F*\phi$$

$$F*\phi = 1/keff*F*(A-S)^{-1}*F*\phi$$

$$\Psi = 1/keff*M*\Psi \quad (4)$$

mit der Quelle $\Psi=F*\phi$ und der Matrix $M=F*(A-S)^{-1}$

woraus sich das Schema der äußeren Iteration ergibt (α Iterationsindex, L lineares Funktional der Summe über alle Komponenten):

$$\Psi'_{\alpha+1} = M*\Psi_{\alpha}$$

$$keff_{\alpha+1} = L(\Psi'_{\alpha+1})$$

$$\Psi_{\alpha+1} = 1/keff_{\alpha+1}*\Psi'_{\alpha+1} \quad (5)$$

Aus Gleichung (3) werden die Gruppenflüsse sukzessive berechnet

1, g-1

$$A_{\alpha+1}^g \phi_{\alpha+1}^g = \sum_h S_{\alpha+1}^{g,h} \phi_{\alpha+1}^h + \psi_{\alpha}^g = B_{\alpha}^g \quad (\text{gesetzt}) \quad g=1(1)G$$

h

$\phi_{\alpha+1}^g$ wird berechnet durch Blocküberrelaxation, wobei die Gitterebenen $Z=\text{constant}$ die Blöcke bilden, d.h. mit der Blocktridiagonalgestalt von

$$A^g = (A_{p,q}^g) \quad (p,q \text{ Ebenenindizes})$$

erhält man das Iterationsverfahren (genannt Gruppeniteration, β Iterationsindex):

$$\phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p} = (A_{p,p}^g)^{-1} * (-A_{p,p-1}^g * \phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p-1} - A_{p,p+1}^g * \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,p+1} + B_{\alpha}^{g,p}) \quad (6)$$

$$\phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p} = \Omega^g * (\phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p} - \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,p}) + \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,p}$$

Aus Gleichung (6)

$$\begin{aligned} A_{p,p}^g * \phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p} &= -A_{p,p-1}^g * \phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p-1} - A_{p,p+1}^g * \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,p+1} + B_{\alpha}^{g,p} \\ &= C_{\alpha+1,\beta}^{g,p} \quad (\text{gesetzt}) \end{aligned}$$

werden die Ebenenflüsse durch Blocküberrelaxation berechnet, wobei Zeilen, Zeilenpaare oder Zeilenquadrupel die Blöcke bilden, was jeweils Blocktridiagonalgestalt von

$A_{p,p}^g$ bewirkt.

Mit den Abkürzungen (Unterdrücken der Indizes g,p,α,β ; r,s Blockindizes, m Anzahl der Blöcke)

$$A_{p,p}^g = (a_{r,s})$$

$$\phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,p} = \phi = (\phi^1, \dots, \phi^m) \text{ transponiert}$$

$$C_{\alpha+1,\beta}^{g,p} = c = (c^1, \dots, c^m) \text{ transponiert}$$

erhält man das Iterationsverfahren (genannt Ebeneniteration, γ Iterationsindex):

$$\phi_{\gamma+1}^r = (a_{r,r})^{-1} * (-a_{r,r-1} * \phi_{\gamma+1}^{r-1} - a_{r,r+1} * \phi_{\gamma}^{r+1} + c_r) \quad (7)$$

$$\phi_{\gamma+1}^r = \omega * (\phi_{\gamma+1}^r - \phi_{\gamma}^r) + \phi_{\gamma}^r$$

Die Diagonalblöcke $a_{r,r}$ sind Bandmatrizen und werden direkt invertiert.

Steuerung der Anzahl der inneren Iterationen

Die Ebeneniteration wird beendet, wenn für alle Ortskomponenten i der Ebene

$$|\phi_{\gamma+1}^i - \phi_{\gamma}^i| \leq \varepsilon_c * \phi_{\gamma}^i$$

erfüllt ist. (ε_c wird im Output "GENAUGKEIT EBENE" genannt).

Die Anzahl der auszuführenden Iterationen in einer Ebene hängt ab von der momentanen Flußausgangsschätzung, der Konvergenzgeschwindigkeit (Konvergenzradius $\omega-1$) und der geforderten Genauigkeit.

Divergenz der Ebeneniteration (etwa auf Grund der zu geringen Stellenzahl) wird auf folgende Weise vom Programm abgefangen: Aus dem Konvergenzradius $\omega-1$ wird eine Maximalzahl von Iterationen berechnet:

$$\text{MAX}(\text{nb8}, -\text{LOG}(\varepsilon)/(2-\omega)), \text{nb8 das Achtfache der Anzahl der Blöcke}$$

ε die aktuelle Genauigkeitsschranke

Wird diese Zahl überschritten, wird sie endlich oft erhöht um die Anzahl der Blöcke. Falls das Kriterium dann immer noch nicht erfüllt ist, wird die Rechnung abgebrochen. (Nachrichten über das Konvergenzverhalten bei jedem Erreichen der gesetzten Iterationszahl lassen die Divergenz erkennen).

Divergenz auf Grund der zu geringen Stellenzahl bei einfacher Wortlänge kann vom Benutzer durch den Einsatz der Programmversion mit doppelter Wortlänge behoben werden.

Analog wird mit der Gruppeniteration und dem Kriterium (für alle Ortskomponenten i in der Gruppe g)

$$|\phi_{\alpha+1,\beta+1}^{g,i} - \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,i}| \leq \varepsilon_b * \phi_{\alpha+1,\beta}^{g,i}$$

verfahren. (ε_b wird im Output "GENAUIGKEIT GRUPPE" genannt).

Divergenz auf Grund von zu wenig Ebeneniterationen, d.h. zu großem ε_c , kann behoben werden durch Verkleinerung von ε_c . ε_c wird von vornherein $\leq \varepsilon_b$ gewählt.

Die Anzahl der auszuführenden Iterationen in einer Gruppe hängt ab von der momentanen Flußausgangsschätzung, der Konvergenzgeschwindigkeit (Konvergenzradius $\Omega-1$) und der geforderten Genauigkeit.

Wenn durch ungeeignete Gruppeneinteilung die Flußniveaus der Gruppen um Größenordnungen verschieden sind, ist es in Vielgruppenrechnungen möglich, daß kleine Flußänderungen in Gruppen mit hohem Flußniveau verhältnismäßig große Änderungen in Gruppen mit niedrigem Niveau hervorrufen und eine größere Anzahl von Iterationen erfordern, als auf Grund der Konvergenzgeschwindigkeiten dieser Gruppen zu erwarten ist. Da diese Gruppen nicht wesentlich zur Neutronenproduktion und zu k_{eff} beitragen, kann eine unnötig große Anzahl von Iterationen in unwichtigen Gruppen durch geeignete Zusammenfassung solcher Gruppen vermieden werden, ohne das Ergebnis zu beeinträchtigen.

Die äußere Iteration wird beendet, wenn über alle Gruppen g und alle Ortskomponenten i das Kriterium

$$\text{MAX } (\psi_{\alpha+1}^{g,i} / \psi_{\alpha}^{g,i}) - \text{MIN } (\psi_{\alpha+1}^{g,i} / \psi_{\alpha}^{g,i}) \leq \varepsilon_a * k_{eff_{\alpha+1}}$$

erfüllt ist. (ε_a wird im Output "GENAUIGKEIT QUELLE" genannt).

Bei exakter Berechnung der Gruppenflüsse $\phi_{\alpha+1}^g$ gilt (siehe /3/):

$$\text{MIN } (\psi_{\alpha+1}^{g,i} / \psi_{\alpha}^{g,i}) \leq \text{MIN } (\psi_{\alpha+2}^{g,i} / \psi_{\alpha+1}^{g,i}) \leq k_{eff_{\alpha+2}} \leq$$

$$\text{MAX } (\psi_{\alpha+2}^{g,i} / \psi_{\alpha+1}^{g,i}) \leq \text{MAX } (\psi_{\alpha+1}^{g,i} / \psi_{\alpha}^{g,i}) \quad (8)$$

Zeigen diese Schranken auf Grund von zu wenig Gruppeniterationen keine Konvergenz, kann diese durch Verkleinerung von ε_b erreicht werden, das von vornherein $\leq \varepsilon_a$ gewählt wird.

Die Beendigung der Iterationen durch Kriterien wurde gewählt, damit das Programm den Rechenablauf an jedes einzelne Problem, an gruppen- und ebenenabhängige Konvergenzgeschwindigkeiten, sowie an die momentane Genauigkeit während der Rechnung anpassen kann. Dafür mußte die entsprechend aufwendige Berechnung der relativen Flußänderung in Kauf genommen werden. Der Aufwand wird jedoch eingeschränkt, da eine (auf Grund der Anzahl der ausgeführten Iterationen in der vorhergehenden Gruppe bzw. Ebene) geschätzte Anzahl von Iterationen ohne diese Berechnung ausgeführt wird. Dies kann dazu führen, daß gelegentlich mehr als die nach dem Kriterium notwendigen Iterationen ausgeführt werden.

Es zeigt sich, daß sich für feste, genügend kleine $\varepsilon_c \leq \varepsilon_b (\leq \varepsilon_a)$ die Schranken von k_{eff} gemäß (8) i.allg. monoton verhalten trotz kleiner werdender Iterationszahlen. Da es wenig Sinn hat, die Gruppenflüsse im Verhältnis zur erreichten Genauigkeit der Quelle viel genauer zu berechnen, wird die Rechnung mit groben Werten $\varepsilon_c, \varepsilon_b, \varepsilon_a$ begonnen, die nach Erfüllung der Kriterien stufenweise verschärft werden, bis die vorgegebenen Endwerte (Eingabegrößen) erreicht sind. Beim Übergang zu schärferen Kriterien, d.h. kleineren Werten für $\varepsilon_c, \varepsilon_b, \varepsilon_a$, liegt das Intervall der Schranken von k_{eff} oft zunächst nicht mehr im Intervall der vorhergehenden Iteration.

Abhängigkeiten von der Anzahl der inneren Iterationen

Die Änderung der Anzahl der inneren Iterationen bedeutet eine Änderung des Iterationsverfahrens. Dies wirkt sich auf die aus den Iterationen berechneten Größen aus, insbesondere auf die Schätzung des Dominanzverhältnisses $v = |k_2/k_1|$ der beiden im Betrag größten Eigenwerte k_1 und k_2 .

Unter der Annahme, daß die Quelle Ψ die Summe der zu den Eigenwerten k_1 und k_2 zugehörigen Eigenvektoren Ψ_1 und Ψ_2 ist, d.h.

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \text{ mit } M(\Psi_1) = k_1 * \Psi_1 \text{ und } M(\Psi_2) = k_2 * \Psi_2$$

ergeben sich aus vier aufeinander folgenden Iterationsschritten die Gleichungen (j Exponent):

$$M^j(\Psi) = k_1^j * \Psi_1 + k_2^j * \Psi_2$$

woraus folgt:

$$L(M^j(\Psi)) = k_1^j * L(\Psi_1) + k_2^j * L(\Psi_2) \quad j=0,1,2,3$$

Da die $L(M^j(\Psi))$ aus den Iterationen bekannt sind, und die Gleichungen sich nach den vier Unbekannten k_1 und k_2 , $L(\Psi_1)$ und $L(\Psi_2)$ auflösen lassen, ergibt sich $v = |k_2/k_1|$.

Durch die Änderung der Anzahl der inneren Iterationen zeigen die Schätzungen für v oft ein sprunghaftes Verhalten, insbesondere beim Übergang zu schärferen Kriterien.

Ein vorübergehend nahezu konstantes Verhalten von v beweist jedoch noch nicht, daß das gesuchte Dominanzverhältnis $|k_2/k_1|$ bereits gefunden wurde, da z.B. die Ausgangsschätzung Ψ zunächst im wesentlichen eine Summe von Ψ_1 und Ψ_3 sein könnte, so daß $|k_3/k_1|$ geschätzt wird. Bessere Konvergenz kann durch höhere innere Iterationszahlen erreicht werden. Numerische Instabilitäten beruhen oft auf der zu kurzen einfachen Wortlänge.

Beispiele:

Die Abhängigkeit von Iterationswerten, z.B. die der Schätzung für v , von der Zahl der inneren Iterationen, wurde von Vondy und Fowler durch viele Rechnungen mit dem Programm VENTURE /4/ gezeigt und in /5/ beschrieben. Im Gegensatz zu D3D/D3E wurde in VENTURE mit festen inneren Iterationszahlen gerechnet. Da die verwendeten Benchmarkprobleme dort ausführlich untersucht wurden, genügte es hier, das Konvergenzverhalten in D3D/D3E durch wenige Rechnungen zu verdeutlichen. Die Probleme sind zweidimensional; die inneren Iterationen sind daher Ebeneniterationen.

Erläuterungen zu den Ergebnistabellen:

A) Beispiel 1: The Fast Reactor Two-Dimensional R-Z Benchmark

(Siehe Tabelle Seite 12)

Dieser Reaktor hat ein 6.9 m^3 Zylinder-Core mit Blanket. Das Problem hat 21 Energiegruppen und ein 78×48 radial*axiales Maschennetz.

Die Fälle 2,4,6,8,10 bzw. 12 unterscheiden sich von den Fällen 1,3,5, 7,9 bzw. 11 durch Anwendung der Tschebyscheff-Beschleunigung.

Die Schätzung des Dominanzverhältnisses verhält sich bei Rechnungen mit Abfragetechnik sprunghaft (Fall 1 und 2). Im Fall 1 kann sich das Programm wegen zu großer Schwankungen nicht auf einen Wert festlegen. Im Fall 2 gelingt dies mehr oder weniger zufällig wegen einer günstigeren Ausgangsschätzung durch die Tschebyscheff-beschleunigten Lösungen für die gröberen Maschennetze. Bei den Rechnungen mit festen Iterationszahlen (Fall 3 bis 12) verläuft die Schätzung des Dominanzverhältnisses dagegen konvergent. In den Fällen 3,5,7,9 und 11 wurde das Dominanzverhältnis bis zuletzt berechnet. Die Endwerte, die schon ab Iteration 18 bis 20 auf 1% genau feststehen, sind angegeben.

Die durchschnittliche Zahl der Ebeneniterationen pro Gruppe und pro äußerer Iteration bei Beendigung durch Kriterien entspricht ungefähr der optimalen festen Zahl von Ebeneniterationen.

Die Auswirkungen der Flußschätzungen aus gröberen Maschennetzen zeigen die Fälle 7,8 im Vergleich zu 9,10. Offenbar sind in dieser Ausgangsschätzung für das feine Maschennetz die höheren Eigenvektoren schon teilweise eliminiert, so daß das Dominanzverhältnis nach weniger äußeren Iterationen bestimmt werden kann als bei Verwendung einer nur groben Schätzung.

Die Fälle 3,5,7,9,11 zeigen, daß das Dominanzverhältnis mit steigenden inneren Iterationszahlen sinkt. In den Fällen 2,4,6,8,10,12 werden die Schätzungen für das Dominanzverhältnis früh und in verschiedenen Iterationen festgelegt. Diese Zahlenwerte sind daher nur als grobe Näherungen zu betrachten und nicht gut vergleichbar. Trotzdem bewirkt die Verwendung dieser Näherungswerte eine erhebliche Reduktion der Rechenzeit, wie der Vergleich der Rechenzeiten der Fälle mit und ohne Tschebyscheff-Beschleunigung zeigt.

B) Beispiel 2: The Georgia Tech Cell Problem

(Siehe Tabelle Seite 13)

Dies ist ein kleines Zellproblem in X-Y-Geometrie. Das Neungruppenproblem hat ein 11×11 Maschennetz. Die Maschenweite ist sehr klein, ungefähr 0.06 cm.

Dieses Benchmark zeichnet sich durch schlechte Konvergenz im Innern aus. Die geschätzten Überrelaxationsparameter liegen im Fall 1 zum Teil nahe 2.0, nämlich zwischen 1.808767 (Gruppe 6) und 1.988881 (Gruppe 4).

Aus der schlechten Konvergenz erklärt sich:

a) Durch die Mehrzeilenblockung wird eine wesentliche Beschleunigung erzielt (Fälle 1 bis 3).

b) Die Schranken von keff verhalten sich in allen Rechnungen nicht monoton. Als Beispiel Fall 1. Das Kriterium in der Ebene beginnt mit 0.001 und wird vor den mit (*) gekennzeichneten Iterationen um den Faktor 0.1 verschärft.

Äußere Iteration Nummer	Untere Schranke von keff	Obere Schranke von keff
1	0.3628722	0.3640468
2 (*)	0.4241973	0.4252582
3	0.4266710	0.4267109
4 (*)	0.4311838	0.4312498
5	0.4313248	0.4313270
6 (*)	0.4317357	0.4317419
7	0.4317469	0.4317471
8 (*)	0.4317775	0.4317781
9	0.4317783	0.4317783
10 (*)	0.4317767	0.4317768
11	0.4317766	0.4317766
12 (*)	0.4317761	0.4317761
13	0.4317761	0.4317761

Auch hier entspricht die durchschnittliche Zahl der Ebeneniterationen pro Gruppe und pro äußerer Iteration bei Beendigung durch Kriterien ungefähr der optimalen festen Zahl von Ebeneniterationen. Allerdings entsprechen die durchschnittlichen Iterationszahlen in den einzelnen Ebenen nicht immer den Konvergenzgeschwindigkeiten in diesen Ebenen. Man vergleiche etwa in der folgenden Tabelle für Fall 1 die Gruppe 6 mit den Gruppen 2 und 3:

Gruppe Nummer	Überrelaxations- parameter ω	Durchschnittliche Iterationszahl
1	1.983764	117.4
2	1.984999	98.5
3	1.979795	93.4
4	1.988881	148.2
5	1.982358	145.3
6	1.808767	115.7
7	1.985067	161.4
8	1.984393	157.2
9	1.959070	125.3

C) Erfahrungen aus anderen D3D/D3E-Rechnungen:

Auch bei Berechnungen von großen modularen Cores (SNR2) wurden ähnliche Unregelmäßigkeiten beobachtet (siehe /6/):

- 1) Vergrößerung des Intervalls der Schranken von k_{eff} nach Verschärfung der Kriterien ist auf die infolgedessen erhöhte Zahl der inneren Iterationen zurückzuführen.
- 2) Die nicht monotone Änderung der Schranken von k_{eff} nach Beginn der Tschebyscheff-Beschleunigung ist auf die durch die Beschleunigung zunächst stärker veränderte Quelle zurückzuführen.
- 3) Die starken Schwankungen der Schätzungen des 1. und 2. Eigenwerts und des sich daraus ergebenden Dominanzverhältnisses am Anfang der Iteration ist (von der Änderung der Zahl der inneren Iterationen abgesehen) auf die schlechte Ausgangsschätzung zurückzuführen, die noch nicht als Summe des 1. und 2. Eigenvektors betrachtet werden kann.
- 4) Die nach Beginn der Tschebyscheff-Beschleunigung ausgedruckten Werte der Eigenwerte und des Dominanzverhältnisses sind formal in gleicher Weise berechnet wie vor Anwendung der Beschleunigung, was unzulässig ist. Für die Rechnung haben sie keine Bedeutung.

Bei Berechnungen der schnellen Reaktortypen SNR, SNEAK, KNK mit den üblichen Maschenweiten treten die beschriebenen Unregelmäßigkeiten i.a. nur unwesentlich in Erscheinung wegen der guten Konvergenz der äußeren und inneren Iterationen. Bei Maschenverfeinerung und damit schlechterer Konvergenz wurden die hier beschriebenen Schwierigkeiten ebenfalls beobachtet. Sie erwiesen sich jedoch bisher in der angegebenen Weise als behebbar.

Beispiel 1: The Fast Reactor Two-Dimensional R-Z Benchmark

Fall Nr.	Zeilen- blockung	Quell- kriterium	Maximaler Über- relaxations- koeffizient	keff (**)
1-12	2	1.E-6	1.455314	1.006117

Fall Nr.	Anzahl der inneren Iterationen	Anzahl der äußeren Iterationen	Dominanzver- hältnis (***)	Tscheby- scheffbe- schleunigung ab Iteration	CPU auf IBM3033
1	5.03 (*)	57			9'46"
2	5.54 (*)	31	0.7532342	10	5'41"
3	4	65	0.8705808		10'06"
4	4	37	0.8137539	10	5'59"
5	5	59	0.8567932		9'47"
6	5	31	0.7933474	9	5'25"
7	6	56	0.8504681		9'56"
8	6	29	0.7728560	8	5'23"
9	6 (#)	69	0.8504662		11'37"
10	6 (#)	40	0.8291477	23	6'50"
11	10	55	0.8463391		11'50"
12	10	29	0.7535669	8	6'33"

(*) Durchschnittswert

(**) Die Abweichung des keff-Werts von dem der VENTURE-Rechnung (1.0067176) ist auf die verschiedenen Differenzenformeln (mesh-centered in VENTURE, mesh-edged in D3D) zurückzuführen.

(***) Bei Rechnungen mit Tschebyscheff-Beschleunigung ist die benutzte Schätzung des Dominanzverhältnisses angegeben. Bei den übrigen Rechnungen ist die Schätzung aus der letzten äußeren Iteration angegeben, falls die Schätzwerte sich in den letzten Iterationen als konvergent erwiesen.

(#) Die Fälle 9 und 10 sind Rechnungen ohne Flußschätzungen aus größeren Maschennetzen

Beispiel 2: The Georgia Tech Cell Problem

Fall Nr.	Zeilen- blockung	Quell- kriterium	Maximaler Überrelaxations- koeffizient	keff
1	1	1.E-8	1.9888	0.431776
2	2	1.E-8	1.9830	0.431776
3	4	1.E-8	1.9690	0.431776
4-11	1	1.E-8	1.9888	0.431776

Fall Nr.	Anzahl der inneren Iterationen	Anzahl der äußeren Iterationen	CPU auf IBM3033
1	130 (*)	13	19.45"
2	127 (*)	9	13.67"
3	92 (*)	7	6.54"
4	20	99	47.31"
5	60	31	34.69"
6	110	17	21.50"
7	120	15	20.59"
8	130	14	20.64"
9	140	13	20.56"
10	150	12	20.23"
11	160	12	21.51"

(*) Durchschnittswert

Schlußbemerkung: Das in D3D gewählte Vorgehen zur Beendigung der Iterationen durch Kriterien ist zwar rechenaufwendig aber flexibel und ermöglicht eine relativ problemlose Anwendung des Rechenprogramms, da es sich vom Benutzer leicht beeinflussen läßt, falls mit den Defaultwerten für die oberen Schranken der relativen Flußänderung keine Konvergenz erzielt wird. Insbesondere bei Rechnungen für schnelle Brüter hat sich das Verfahren bewährt. Die in der vorliegenden Untersuchung erwähnten Nachteile können eventuell durch Modifizieren der Strategien gemildert werden.

Den Herren Dr. Vondy und Dr. Fowler (ORNL) danken wir herzlich für die Bereitstellung der Eingabedaten für die Benchmarkprobleme und die Überlassung von zugehörigen Ausgabelisten sowie für ihren Bericht /5/. Ihre Unterstützung hat uns die Durchführung dieser Untersuchung sowie die Einsicht in das Konvergenzverhalten unsres Verfahrens wesentlich erleichtert.

/1/ B. Stehle

D3D - Ein Fortranprogramm zur Lösung der stationären dreidimensionalen Multigruppendiffusionsgleichungen
KfK 2118 März 1975

/2/ B. Stehle

D3E, unveröffentlichte Programmbeschreibung, 1978

/3/ G.J. Habetler, M.A. Martino

Existence Theorems and Spectral Theory for the Multigroup
Diffusion Model
Proceedings of Symposia in Applied Mathematics
Volume 11 pp 127-139, 1961
American Mathematical Society

/4/ D. R. Vondy, T. B. Fowler, G. W. Cunningham

VENTURE: A Code Block for Solving Multigroup Neutronics Problems
Applying the Finite-Difference Diffusion-Theory Approximation to
Neutron Transport
ORNL-5062, October 1975

/5/ D. R. Vondy, T. B. Fowler

The Iterative Behavior of Diffusion Theory
Flux Eigenvalue Neutronics Problems
ORNL/TM-6843 May 1979

/6/ E. Kiefhaber, A. Polch

Unveröffentlichter Bericht des KfK, 1978