

Ivan Petrović
Institut za nuklearne nauke "Boris Kidrič" - Vinča
OOUR Institut za nuklearnu energetiku i tehničku fiziku "NET"

PRIMENA METODE KONAČNIH ELEMENATA NA REŠAVANJE VIŠEGRUPNE
DVO DIMENZIONALNE DIFUZIONNE JEDNAČINE I RAČUNARSKI PROGRAM KONEL

THE APPLICATION OF THE FINITE ELEMENT METHOD TO THE MULTIGROUP
TWO-DIMENSIONAL NEUTRON DIFFUSION EQUATION AND THE KONEL CODE

SADRŽAJ - Analizirana je primena metode konačnih elemenata na prostorno zavisnu višegrupnu difuzionu jednačinu. Pomoću pravougaonih elemenata difuziona jednačina je diskretizovana pa je primenom deo po deo kontinualnih polinoma i varijacionog metoda svedena na sistem linearnih algebarskih jednačina. Globalna matrica je faktorizovana Choleski postupkom, a numeracija tačaka i konačnih elemenata linijskom disekcijom. Sumirana iskustva su iskorišćena za pravljenje računarskog programa KONEL za rešavanje višegrupne dvodimenzionalne difuzione jednačine.

ABSTRACT - The application of finite element method in space dependant neutron diffusion equation is shown in this paper. The diffusion equation is first discretized using rectangular elements. Applying piecewise polynomials in a variational form of the diffusion equation a system of linear algebraic equations is obtained. Choleski decomposition is used to factorise the global matrix and numeration of nodes and finite elements is performed by line dissection. The multigroup two-dimensional diffusion code KONEL was written based on this method.

1. UVOD

Primena metode konačnih elemenata na rešavanje difuzione jednačine se zasniva na korišćenju interpolacionih polinoma za prostornu aproksimaciju i varijacionog računa. Ukratko rečeno, to je postupak kojim se parcijalna diferencijalna jednačina diskretizuje deljenjem oblasti problema u odredjen broj podoblasti, koje se zovu elementi. Interpolacione funkcije (obično polinomi) su formulisane za svaki element, po članovima koji se odnose na diskretne tačke. Ove tačke mogu da se nalaze u uglovima, na stranama i u samoj unutrašnjosti elementa. Interpolacione funkcije

susednih elemenata, odnosno sami elementi, su povezani preko nodalnih parametara, koji uspostavljaju uslove kontinuiteta na granicama elemenata. Rezultujući deo po deo kontinualne probne funkcije su uključene u karakteristični funkcional problema. Postavljajući uslov da funkcional bude stacionaran, dobija se sistem algebarskih jednačina za nodalne parametre. Metod konačnih elemenata se svodi na Ritz-ov postupak kada su zadovoljeni potrebni uslovi kontinuiteta između susednih elemenata. Sa istom lakoćom i tačnošću ovaj metod razmatra pravilne i nepravilne geometrije, homogene i heterogene materijale i bilo koju kombinaciju graničnih uslova. Zahtevana tačnost se dobija sa minimumom simultanih jednačina koncentrišući se na gustinu nodova, ne obraćajući pažnju na koordinatne površine u zonama gde se pojavljuju veliki gradijenti zavisnih promenljivih.

2. RAČUNARSKI PROGRAM KONEL

U programu KONEL energetska zavisnost difuzione jednačine je tretirana višegrupno. Difuziona jednačina u oblasti Ω sa granicom $\partial\Omega$ se piše u sledećem obliku:

$$H\Phi = -\nabla D \nabla \psi + \Sigma \psi = S. \quad (1)$$

Granični uslovi za ψ su:

$$\psi \Big|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{i} \quad D \frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega} = 0 \quad (2)$$

i da je ψ i $D \frac{\partial \psi}{\partial n}$ kontinualno na medjupovršinama, gde je $\frac{\partial}{\partial n}$ spoljašnja normala na površinu.

Koristeći Kurganoff-ov funkcional $I(\Phi)$:

$$I(\Phi) = - \int_{\Omega} \Phi S \, d\Omega = (H\Phi, \Phi) - 2(S, \Phi) \quad (3)$$

gde (\cdot, \cdot) predstavlja unutrašnji proizvod, dobija se

$$I(\Phi) = \int_{\Omega} (-\Phi \nabla D \nabla \Phi + \Sigma \Phi^2 - 2S\Phi) \, d\Omega. \quad (4)$$

Ako se na prvi član gornje jednačine primeni Green-ova formula, jednačina dobija oblik:

$$I(\Phi) = \int_{\Omega} (D(\nabla \Phi)^2 + \Sigma \Phi^2 - 2S\Phi) \, d\Omega - \int_{\partial\Omega} D\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial n} \, d(\partial\Omega). \quad (5)$$

Prilikom integracije zadnjeg člana gornje jednačine, a s obzirom na orijentaciju normale na površinu, on postaje nula /2/.

Iz ovoga se vidi da difuziona jednačina mora da zadovolji suštinske granične uslove, dok su prirodni sadržani u njoj. Ovakva formulacija difuzione jednačine se zove slaba formulacija. Na osnovu prethodnog se zaključuje da su kriterijumi za izbor bazisne funkcije kojom se aproksimira fluks manje restriktivni i automatski je izbor veći.

Kao što je ranije rečeno ceo prostor u kome se vrši proračun je podeljen na konačne elemente koji su međusobno povezani graničnim uslovima na njihovim dodirnim površinama. Usled toga funkcional (5) ima sada sledeći oblik:

$$I(\Phi) = \sum_1 \int_{\Omega_1} (D(\nabla\Phi)^2 + \Gamma\Phi^2 - 2S\Phi) d\Omega_1 \quad (6)$$

gde se 1 odnosi na broj konačnih elemenata.

Pošto program KONEL vrši proračun u X-Y geometriji probna funkcija će imati oblik:

$$\Phi = \sum_1 \sum_j \Phi_{ij} w_{ik}(x) w_{jt}(y), \quad (7)$$

$$w_{ik}(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x_k - x}{x_k - x_i} \quad \text{i} \quad w_{jt}(y) = \prod_{\substack{t=1 \\ t \neq j}}^m \frac{y_t - y}{y_t - y_j}$$

Kao što se vidi za bazisnu funkciju je uzet Lagrange-ov interpolacioni polinom, dok je Φ_{ij} vrednost fluksa u tački ij koju treba odrediti.

Kada se na osnovu varijacionog principa primeni stacionarnost funkcionala $I(\Phi)$ u svakoj tački ij dobija se:

$$\left. \frac{\partial I(\Phi)}{\partial \Phi_{ij}} \right|_{\substack{i=1, n \\ j=1, m}} = 0 \quad (8)$$

što predstavlja sistem linearnih algebarskih jednačina.

Kao posledica lokalnog karaktera konačnih elemenata dobija se retka matrica, odnosno matrica sa puno nulnih elemenata. Osim toga ova matrica je simetrična i pozitivno definisana. Sve ove osobine pružaju mogućnost da se za rešavanje sistema linearnih

algebarskih jednačina primeni neka od direktnih metoda koje su znatno brže od iterativnog postupka. U programu je upotrebljena faktORIZACIJA Choleski /3/. Primenom ove faktORIZACIJE originalna matrica prelazi u proizvod gornjotrougaone i donjotrougaone matrice. U obe trougaone matrice se pojavljuju novi nenulti članovi u odnosu na konfiguraciju originalne matrice. Broj ovih novih nenulatih članova u trougaonim matricama može biti veći ili manji zavisno od toga kakav način obeležavanja tačaka i konačnih elemenata se izabere. U programu KONEL primenjen je metod linijske disekcije prostora na konačne elemente (sl.1). Ovim postupkom se ne dobija najmanji broj novih nenulatih elemenata u matricama, kao što je slučaj sa višestrukom disekcijom (sl.2), ali sa stanovišta programiranja je znatno jednostavniji od drugog metoda /4/, /5/.

Klasična Choleski dekompozicija realne simetrične pozitivno definisane matrice A reda n, je data sa $A = T^T T$ gde je:

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1n} \\ 0 & t_{22} & \dots & t_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & t_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{ i } \quad T^T = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & \dots & 0 \\ t_{12} & t_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ t_{1n} & t_{2n} & \dots & t_{nn} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Množeći matrice T^T i T medjusobno dobijamo sledeće jednačine koje dozvoljavaju da se odrede elementi t_{ij} matrice T:

$$t_{1i}t_{1j} + t_{2i}t_{2j} + \dots + t_{ii}t_{ij} = a_{ij} \quad (i < j)$$

$$t_{i1}^2 + t_{i2}^2 + \dots + t_{ii}^2 = a_{ii} \quad (10)$$

Na osnovu ovoga može se pisati sukcesivno:

$$t_{11} = \sqrt{a_{11}} \quad t_{1j} = \frac{a_{1j}}{t_{11}} \quad (j > 1)$$

$$t_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki}^2} \quad (1 < i \leq n) \quad (11)$$

$$t_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} t_{kj}}{t_{ii}} \quad (i < j)$$

$$t_{ij} = 0 \quad \text{ za } \quad i > j.$$

Ako se zna da je $A\Phi = Q$, onda se mogu pisati sledeće dve jednačine:

$$T^T y = Q \quad \text{i} \quad T\Phi = y \quad (12)$$

ili razvijeno u sisteme jednačina:

$$\begin{aligned} t_{11} y_1 &= Q_1 \\ t_{12} y_1 + t_{22} y_2 &= 2 \\ &\dots\dots\dots \\ t_{1n} y_1 + t_{2n} y_2 + \dots\dots + t_{nn} y_n &= Q_n \end{aligned} \quad (13)$$

što odgovara prvoj jednačini, i

$$\begin{aligned} t_{11} \phi_1 + t_{12} \phi_2 + \dots\dots + t_{1n} \phi_n &= y_1 \\ &\dots\dots\dots \\ t_{22} \phi_2 + \dots\dots + t_{2n} \phi_n &= y_2 \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ t_{nn} \phi_n &= y_n \end{aligned} \quad (14)$$

što odgovara drugoj jednačini.

Iz ova dva sistema jednačina sukcesivno se dobija:

$$y_1 = \frac{Q_1}{t_{11}}; \quad y_i = \frac{Q_i - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} y_k}{t_{ii}} \quad (i > 1) \quad (15)$$

$$\phi_n = \frac{y_n}{t_{nn}}; \quad \phi_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^n t_{ik} \phi_k}{t_{ii}} \quad (i < n) \quad (16)$$

Pošto je, kao što je već rečeno matrica A simetrična a matrica T gornja trougaona, potrebno je pisati samo $\frac{n}{2}(n+1)$ gornjih koeficijenata a_{ij} , i t_{ij} ($i \geq j$) kada se računa. Dakle pri primeni ovog metoda, jednačine (11) i (15) se koriste za sukcesivno računannje koeficijenata, t_{ij} i y_i ($i=1,2,\dots,n$), a onda postupkom u nazad, jednačinom (16) dobijaju se nepoznate ϕ_i ($i = n, n-1, \dots, 1$).

Dakle, kao što se vidi kod metode konačnih elemenata vrednosti fluksa u tačkama se dobijaju direktnim rešavanjem sistema linearnih algebarskih jednačina za svaku energetsku grupu, a ne kao kod konačnih razlika unutrašnjim iteracijama, odnosno iteriranjem po fluksu. Ovo dakako povećava brzinu rada kod metode konačnih elemenata.

Nalažanje sopstvene vrednosti problema, kao i kod metoda konačnih razlika tako i kod metode konačnih elemenata se računa spoljašnjim iteracijama, odnosno iteriranjem po izvoru. U programu KONEL ne koristi se nikakvo ubrzavanje spoljašnjih iteracija.

Na početku programa direktno se učitavaju makroskopski efikasni preseki i proračun se vrši u više zona. Na izlazu program daje efektivni faktor umnožavanja neutrona, prostornu raspodelu fluksa i snage. Program je još u fazi testiranja.

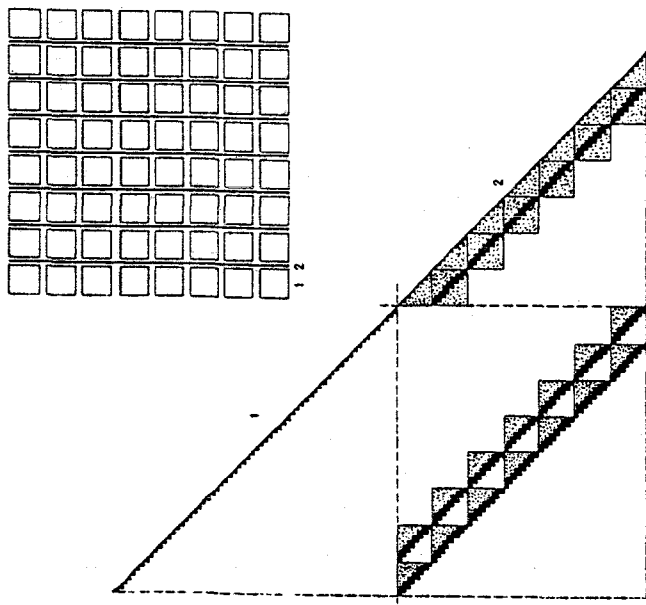
3. PRIMER PRORAČUNA I ZAKLJUČAK

Za testiranje programa KONEL izvršen je proračun dvodimenzionog IAEA BENCHMARK problema /6/, na računarskoj mašini IBM 370/3031. Kao referentna vrednost za k_{eff} je uzeta vrednost dobijena ekstrapolacijom vrednosti koje su dobijene programom VENTURE /7/ i koja iznosi $k_{eff} = 1,02959$. Poredjenja radi izvršen je proračun dvodimenzionog IAEA BENCHMARK problema i programom VAMPIR koji se zasniva na primeni metode konačnih razlika. U tabelama 1. i 2. dati su karakteristični parametri oba programa za ovaj proračun u zavisnosti od reda aproksimacije odnosno koraka mreže. Na slici 3. data je prostorna raspodela odstupanja srednje snage izračunate programima KONEL i VAMPIR od vrednosti dobijenih ekstrapolacijom rezultata izračunatih programom VENTURE, izražena u procentima.

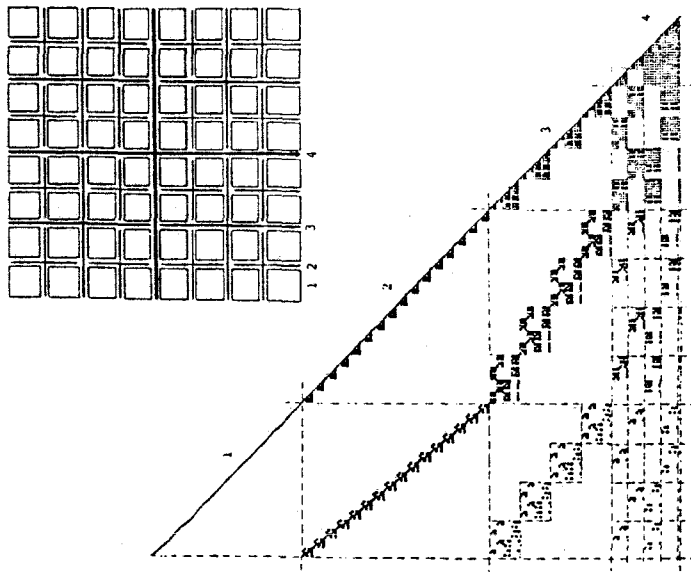
Iz prikazanih rezultata se može zaključiti da je metod konačnih elemenata znatno brži od metoda konačnih razlika i da postiže zadovoljavajuću tačnost.

4. LITERATURA

- /1/ A.Kavenoky, J.J.Lautard, A Finite Element Depletion Diffusion Calculation Method With Space Dependent Cross Sections, Nucl.Sci and Eng., 64, p.563, (1977)
- /2/ C.M.Kang and K.F.Hansen, Finite Element Methods for Reactor Analysis, Nucl.Sci. and Eng., 51, p.456 (1973)
- /3/ D.M.Davierwalla, A.Pelloni, D.Altiparmakov, Finite Elements in Multidimensional Nuclear Diffusion, Proc.Int.Topl.Mtg. Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Vol.I, p.335, Munchen, 1981.
- /4/ D.Altiparmakov, Some Improvements in Finite Element Method Applied to Neutron Diffusion Calculations, EIR Ber.No.429,1983.
- /5/ A.George, Numerical Experiments Using Dissection Methods to Solve n by n Grid Problems, SIAM J.Numer.Anal, Vol.14, No.2, 1977.
- /6/ C.E.Higgs, FINELM Architecture and Usage, Newsletter of the NEA Data Bank, 30, p.179 (1983)
- /7/ M.N.Zizin, L.K.Shishkov, L.N.Yaroslavtseva, Fizika Yadernykh Reaktorov: Testovye Nejtronno-Fizicheskie Raschety Yadernykh Reaktorov, Moskva, Atomizdat, 1980.



Slika 1. - Nivoi numerisanja čvorova primenom linijske disekcije za mrežu od 8x8 komančnih elemenata i struktura matrice dekomponovane Cholesky postupkom.



Slika 2. - Nivoi numerisanja čvorova primenom višestruke disekcije za mrežu od 8x8 komančnih elemenata i struktura matrice dekomponovane Cholesky postupkom.

PROGRAM KONEL

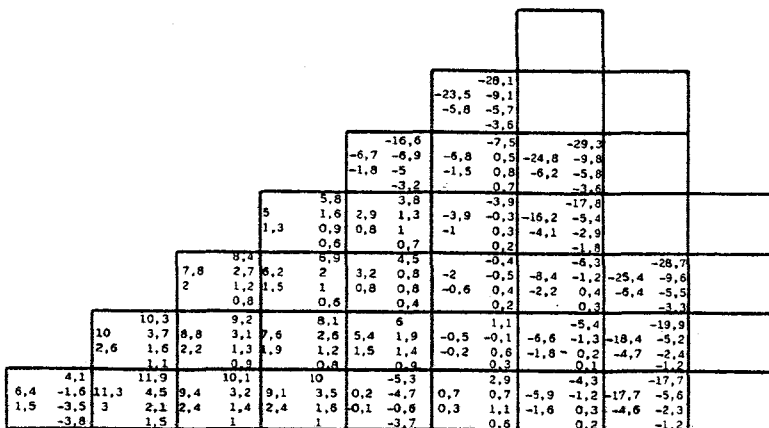
red aproksimacije	k_{eff}	Broj iteracija	Vreme proračuna
linearna	1,0305338	80	24,19 s
kvadratna	1,0293713	70	56,8 s
kubna	1,0293779	95	2 min 44,65 s
četvrtog reda	1,0293217	95	5 min 19,57 s

Tabela 1.

PROGRAM VAMPIR

Korak mreže	k_{eff}	Broj iteracija	Vreme proračuna
5 cm	1,0266895	205	3 min 52,61 s
2,5 cm	1,0257893	178	18 min 12,17 s

Tabela 2.



	K	linearna aproksimacija	program VAMPIR
*	KK	kvadratna aproksimacija	* korak mreže 5 cm
**	KKK	kubna aproksimacija	** korak mreže 2,5 cm
***	KKKK	aproksimacija četvrtog stepena	

Slika 3. - Prostorna raspodela odstupanja srednje snage od rezultata dobijenih ekstrapolacijom iz programa VENTURE izražena u % za 2 D IAEA BENCHMARK