

APLICACION DEL METODO DE ELEMENTOS FINITOS
PARA LA RESOLUCION DE LA ECUACION DE DIFUSION

Carlos R. Grant

Departamento de Reactores Nucleares

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA

Si escribimos la ecuación de transporte multigrupo, en la cual se ha discretizado ya la energía y se supone isotropía en la dispersión de los neutrones y fuentes:

$$\bar{\Omega} \cdot \nabla \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) + \Sigma_g(\bar{r}) \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g'g}(\bar{r}) \phi_{g'}(\bar{r}) + Q_g(\bar{r}) \quad (1)$$

$\bar{\Omega} = [u, v, w]$ vector unidad dado por los cosenos directores u, v, w .

$\Sigma_g(\bar{r})$ = sección eficaz total para el grupo g .

$\Sigma_{g'g}(\bar{r})$ = sección eficaz de transferencia del grupo g' al g .

$Q_g(\bar{r})$ = fuentes neutrónicas.

G = número de grupos

Se utiliza la Σ para las secciones eficaces macroscópicas.

$$\Phi_g(\bar{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) d\bar{\Omega} \quad (2) \text{ siendo } \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) \text{ y } \Phi_g(\bar{r}) \text{ los flujos direccionales y totales para el grupo } g.$$

Se desarrolla el flujo $\phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega})$ en las componentes esféricas:

$$\begin{aligned} \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) &= \Phi_g(\bar{r}) + 3 J_{gx}(\bar{r}) u + 3 J_{gy}(\bar{r}) v + 3 J_{gz}(\bar{r}) w. \\ &= \Phi_g(\bar{r}) + 3 \bar{\Omega} \cdot \bar{J}_g(\bar{r}). \end{aligned} \quad (3)$$

en la que, la primera componente es $\Phi_g(\bar{r})$ por la (2) y las otras son las corrientes netas en las direcciones x, y, z , siendo para una

dirección $\bar{L}$:

$$J_{\bar{L}}(\bar{r}) = J_{\bar{r}^x}^x + J_{\bar{r}^y}^y + J_{\bar{r}^z}^z = \bar{J}_{\bar{r}}(\bar{r}) \cdot \bar{L} \quad (4)$$

Definamos ciertos recintos, denominados elementos, en los cuales se determinan algunos puntos (nodos), por ejemplo triángulos y cuadriláteros para dos dimensiones y hexaedros para tres:

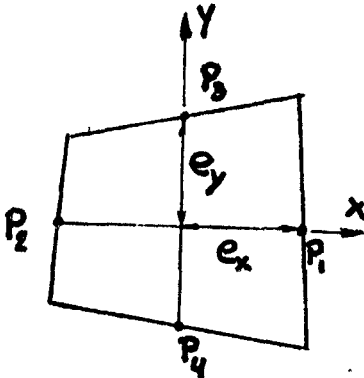


FIG 1

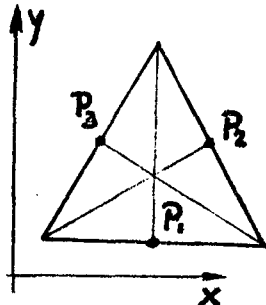


FIG 2

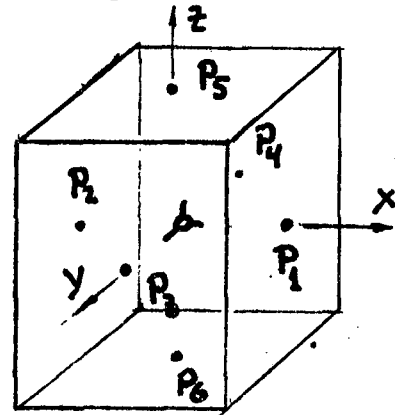


FIG 3

Para las figuras bidimensionales los nodos se definen en los puntos medios de los lados y para las tridimensionales en los centros de las caras definidos por la intersección de las medianas.

Para el triángulo se adopta un sistema de coordenadas ortogonal cualquiera, pero para el cuadrilátero el de la FIG 1, no necesariamente ortogonal, lo mismo que para el hexaedro (ver FIG 3). Si es n_c el número de nodos del elemento, las funciones de interpolación $N_p(\bar{r})$ se definen tal que sea

$$N_p(\bar{r}) = \delta_{pq} \quad \sum_p N_p(\bar{r}) = 1 \quad (5)$$

por ejemplo, para el cuadrilátero ($n_c = 4$, ver FIG 1):

$$\begin{aligned} N_1(xy) &= \frac{1}{4} \left(1 + 2 \frac{x}{e_x} + \frac{x^2}{e_x^2} - \frac{y^2}{e_y^2} \right) & N_2(xy) &= \frac{1}{4} \left(1 - 2 \frac{x}{e_x} + \frac{x^2}{e_x^2} - \frac{y^2}{e_y^2} \right) \\ N_3(xy) &= \frac{1}{4} \left(1 + 2 \frac{y}{e_y} + \frac{y^2}{e_y^2} - \frac{x^2}{e_x^2} \right) & N_4(xy) &= \frac{1}{4} \left(1 - 2 \frac{y}{e_y} + \frac{y^2}{e_y^2} - \frac{x^2}{e_x^2} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

y en forma análoga para las demás figuras.

Haciendo uso de estas funciones, el flujo y las corrientes de la (3)

se expresan como:

$$\begin{aligned}\Phi_p(\vec{n}) &= \sum_p \Phi_{sp} N_p(\vec{n}) & J_{sx}(\vec{n}) &= \sum_p J_{sxp} N_p(\vec{n}) \\ J_{sy}(\vec{n}) &= \sum_p J_{syp} N_p(\vec{n}) & J_{sz}(\vec{n}) &= \sum_p J_{szp} N_p(\vec{n}) \\ \bar{J}_{s\vec{n}} &= \sum_p \bar{J}_{s\vec{n}} \cdot \bar{J}_{sp} N_p(\vec{n}) \text{ con } \bar{J}_{sp} = [J_{sxp}; J_{syp}; J_{szp}] \quad (8)\end{aligned}$$

Reemplazando las (7) y (8) en la (3) y luego ésta en la (1), suponiendo que dentro de cada elemento las secciones eficaces y las fuentes son constantes, se obtiene:

$$\begin{aligned}\sum_q \bar{J}_{sq} \cdot [\Phi_{sq} + 3 \bar{J}_{sq} \cdot \bar{J}_{sq}] \nabla N_q(\vec{n}) + \sum_q \sigma_s (\Phi_{sq} + 3 \bar{J}_{sq} \cdot \bar{J}_{sq}) N_q(\vec{n}) &= \\ = \sum_q \sum_{s'} \sigma_{ss'} \Phi_{s'q} N_q(\vec{n}) + Q_s \quad (9)\end{aligned}$$

Los parámetros libres son Φ_{sp} , J_{sxp} , J_{syp} y J_{szp} , o sea, por grupo, $n_c \cdot (1 + n_b)$ siendo n_c el número de nodos y n_b el número de dimensiones espaciales. Para cada grupo se dejan sin definir n_c condiciones, que se determinarán por medio de relaciones de continuidad con los elementos vecinos, y las otras $n_c n_b = N$ condiciones se fijan integrando el residuo de la (9) respecto a ciertas funciones de peso $\Sigma_p(\vec{n}, \vec{l})$ o estableciendo restricciones a las corrientes paralelas a los lados o caras sobre sus correspondientes nodos. Pueden darse los siguientes casos:

a) $\Sigma_p(\vec{n}, \vec{l}) = F_p(\vec{n})$

Al integrar el residuo de la (9) en todo $\vec{l}$ y el elemento se obtiene una relación de la forma:

$$\begin{aligned}\sum_q [a_{xpq} J_{sxp} + a_{ypq} J_{syp} + a_{zpq} J_{szp}] + \sigma_s \sum_q S_{pq} \Phi_{sq} &= \\ = \sum_q \sum_{s'} \sigma_{ss'} S_{pq} \Phi_{s'q} + R_p Q_s \quad (10)\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
a_{\frac{x}{z}pq} &= \frac{1}{V} \int_V F_p(\bar{n}) \frac{\partial N_q(\bar{n})}{\partial \frac{x}{z}} d\bar{n} \\
S_{pq} &= \frac{1}{V} \int_V F_p(\bar{n}) N_q(\bar{n}) d\bar{n} \\
R_p &= \sum_q S_{pq}
\end{aligned} \tag{11}$$

$V =$ volúmen del elemento.

$$b) \Sigma_p(\bar{n}, \bar{l}) = F_p(\bar{n}) \bar{l} \cdot \bar{n}$$

Siendo $\bar{n} = (n_x, n_y, n_z)$ un vector unitario.

En este caso, al integrar el residuo de la (9) y multiplicar por

$$D_g = 1/(3.6_g) \quad \text{nos da:}$$

$$\begin{aligned}
&\sum_q [a_{xpq} J_{gxq} + a_{ypq} J_{gyq} + a_{zpq} J_{gzq}] \tag{12} \\
&+ D_g \sum_q d_{pq} \Phi_{gq} = 0
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
a_{\frac{x}{z}pq} &= \frac{1}{V} n_{\frac{x}{z}} \int_V F_p(\bar{n}) N_q(\bar{n}) d\bar{n} \\
d_{pq} &= \frac{1}{V} \int_V \left(n_x \frac{\partial N_q}{\partial x} + n_y \frac{\partial N_q}{\partial y} + n_z \frac{\partial N_q}{\partial z} \right) F_p(\bar{n}) d\bar{n} \tag{13}
\end{aligned}$$

c) Se impone la condición

$$J_{g\bar{l}_p}(\bar{n}_p) = J_{g\bar{l}_p}(\bar{n}_0)$$

con $\bar{l}_p = (u_p, v_p, w_p)$ una dirección cualquiera. Es decir, que la corriente en una cierta dirección para un cierto punto sea igual a la de un punto de referencia $\bar{n}_0$ en esa misma dirección.

Por la (4), las (7) y las (5) se obtiene:

$$\begin{aligned}
J_{g\bar{l}_p}(\bar{n}_p) &= (J_{gxp} u_p + J_{gyp} v_p + J_{gzp} w_p) \\
&= \sum_q (J_{gxq} u_p + J_{gyq} v_p + J_{gzq} w_p)
\end{aligned}$$

de donde la forma de la relación obtenida es:

$$\sum_q [\alpha_{xpq} J_{pxq} + \alpha_{ypq} J_{pyq} + \alpha_{zpq} J_{pzq}] = 0 \quad (14)$$

$$\text{con } \alpha_{xyzpq} = \sum_q N_q (\bar{n}_0) \frac{V_p}{V_p} - \frac{V_p}{V_p} \quad (15)$$

Si agrupamos las condiciones de tipo a), b) y c) dadas por las fórmulas (10), (12) y (14) y las expresamos matricialmente se obtiene para cada grupo:

$$A \tilde{J}_{pxyz} + D_p S_D \tilde{\Phi}_p + G_p S_G \tilde{\Phi}_p = \sum_{p'} G_{pp'} S_{p'} \tilde{\Phi}_{p'} + Q_p \tilde{S}_Q$$

donde, si es $N = n_c \cdot n$ el número de restricciones por grupo, A es una matriz de N por N , S_G y S_D matrices de N por n_c , $\tilde{J}_{pxyz}$ el vector de N componentes de los $\tilde{J}_{xyzq}$, $\tilde{\Phi}_p$ es un vector columna de n_c elementos.

Sólo falta ahora expresar los $\tilde{J}_{pxyz}$ en función de las corrientes netas en los nodos para las direcciones normales a las caras o lados correspondientes. Si éstas se dan mediante los vectores unitarios:

$$\tilde{n}_p = [\eta_{px}, \eta_{py}, \eta_{pz}]$$

resulta ser

$$J_{pp} = \eta_{px} J_{pxp} + \eta_{py} J_{pyp} + \eta_{pz} J_{pzp} \quad (17)$$

ó matricialmente

$$\tilde{J}_p = M \tilde{J}_{pxyz} \quad (18)$$

donde M es una matriz de n_c por N y $\tilde{J}_p$ un vector de las n_c componentes J_{pp} .

Si las restricciones tipo a), b) y c) se eligen de tal manera que A sea invertible, se multiplican ambos miembros de la (16) por MA^{-1} y se reemplaza la (18) tenemos:

$$\tilde{J}_p + [D_p T_D + G_p T_G] \tilde{\Phi}_p = \sum_{p'} G_{pp'} T_{p'} \tilde{\Phi}_{p'} + Q_p \tilde{T}_Q \quad (19)$$

donde

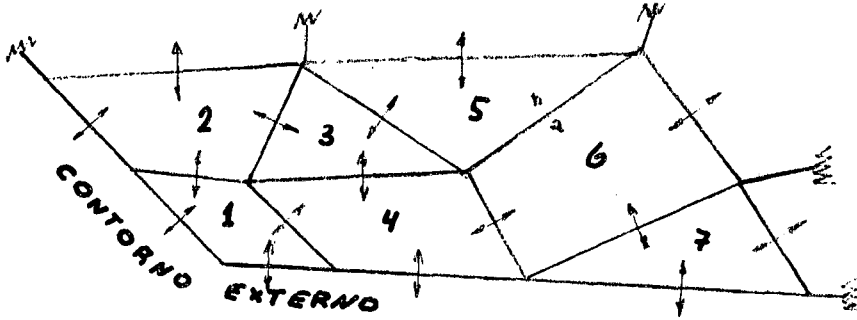
$$T_D = MA^{-1} S_D \quad ; \quad T_G = MA^{-1} S_G$$

$$\tilde{T}_Q \text{ (vector columna)} = MA^{-1} \tilde{S}_Q \quad (20)$$

T_D, T_S son matrices de n_c por n_c elementos

MODO DE OPERAR

Si armamos una red como la de la figura, tenemos para cada elemento T_S y T_D que los caracterizan.



Si empleamos las relaciones

$$\begin{aligned}\tilde{J}_g &= \tilde{J}_{sg} - \tilde{J}_{eg} \\ \tilde{\Phi}_g &= 2(\tilde{J}_{sg} + \tilde{J}_{eg})\end{aligned}\quad (21)$$

son vectores que contienen las corrientes totales de entrada y salida

Las reemplazamos en las (19) y obtenemos:

$$\tilde{J}_{sg} = R_{eg} \tilde{J}_{eg} + R_{sg} \sum_{g'} \sigma_{g'g} T_S \tilde{\Phi}_{g'} + Q_g \tilde{R}_{ag} \quad (22)$$

en donde las expresiones de la matrices R_{eg} , R_{sg} y R_{ag} surgen inmediatamente. Las condiciones de borde se definen mediante matrices de respuesta tipo

$$\tilde{J}_{bg} = R_{bg} \tilde{J}_{sg} + Q_{bg} \quad (23)$$

en particular:

$$\tilde{Q}_{bg} = 0; \quad R_{bg} = 0 : \text{ contorno negro}$$

$$\tilde{Q}_{bg} = 0; \quad R_{bg} = \text{matriz unidad: contorno blanco.}$$

Las relaciones (21), (22) y (23) sugieren un proceso iterativo en el que, para cada elemento, dadas las corrientes entrantes se hallan las salientes, que serán a su vez las entrantes de los nodos vecinos. Este esquema no es más que un método de GAUSS-SEIDEL que puede ser también acelerado por algún coeficiente de sobrerelajación, luego de cada barrido completo por toda la red.

Existen otros métodos que emplean directamente las (19), que conducen a procesos iterativos similares a los de los métodos de diferencias finitas, que por restricciones de espacio no exponemos aquí. Se han programado rutinas que calculan las T_s y T_D para triángulos, cuadrados, hexaedros, prismas, pirámides, tetraedros, cuñas circulares y cilíndricas, sectores circulares o cilíndricos y elementos unidimensionales, que permitieron realizar algunos cálculos de distribución de flujo para algunas redes con resultados satisfactorios en cuanto al tiempo de procesamiento empleado.