
Desarrollo y Aplicación de un Esquema de Tercer Orden de Diferencias Finitas Centradas en Malla

Arturo Delfín Loya, Gustavo Alonso Vargas*
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Km. 36.5 Carretera México-Toluca
Ocoyoacac, Estado de México 52045, México
adl@nuclear.inin.mx; galonso@nuclear.inin.mx

Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Física y Matemáticas
Unidad Profesional "Adolfo López Mateos"
Col. Lindavista 07738, México D. F.
edmundo@esfm.ipn.mx

Resumen

En este trabajo se presenta el desarrollo de un esquema de tercer orden de diferencias finitas centradas en malla y se aplica en la solución numérica de las ecuaciones de difusión en multigrupos en estado estacionario y geometría XY. Originalmente este esquema fue desarrollado por Hennart y del Valle para la ecuación de difusión monoenergética con una fuente conocida y muestran que el esquema es de tercer orden al comparar la solución numérica con la solución analítica de un problema modelo utilizando varios refinamientos de malla y condiciones de frontera. El esquema por ellos desarrollado introduce además la aplicación de cuadraturas numéricas para evaluar las matrices de rigidez y de masa que aparecen al hacer uso del método de elementos finitos de Galerkin. Una de las cuadraturas empleadas es la cuadratura abierta de 4 puntos, no-estándar, de Newton-Cotes para evaluar en forma aproximada los elementos de las matrices de rigidez. La otra cuadratura es la de 3 puntos de Radau que la emplean para evaluar los elementos de todas las matrices de masa. Uno de los objetivos de estas cuadraturas es eliminar los acoplamientos entre los momentos de Legendre 0 y 1 asociados a las caras izquierda y derecha así como los asociados a las caras inferior y superior de cada celda de la discretización. El otro objetivo es satisfacer los balances de partículas en forma pesada en cada celda. En este trabajo se extiende dicho desarrollo a medios multiplicativos considerando varios grupos de energía. Se describen diversos detalles inherentes a la técnica, particularmente aquéllos que se refieren a la simplificación de los sistemas algebraicos que aparecen debido a la discretización espacial. Se presentan resultados numéricos para varios problemas de prueba y se comparan con los obtenidos con otras técnicas nodales.

* También en el Instituto Politécnico Nacional.

1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se resuelve numéricamente la ecuación de difusión de neutrones en estado estacionario, geometría XY y varios grupos de energía utilizando un esquema de Diferencias Finitas Centradas en Malla (DFCM) de tercer orden originalmente propuesto por Hennart y del Valle quienes lo emplearon para resolver el caso monoenergético no multiplicativo. En sus trabajos se presentan solamente resultados numéricos relacionados con la exactitud del método, órdenes de convergencia discretos y continuos, para un problema modelo de solución analítica conocida. Aquí se desarrolla y aplica el mismo esquema en la solución numérica de las ecuaciones de difusión en multigrupos para medios multiplicativos dando los detalles sobre la discretización, la estructura matricial del problema de valor propio correspondiente y la forma eficiente en que se resuelve proporcionando información sobre el orden y ancho de banda del sistema original así como el orden y ancho de banda del sistema reducido y reordenado. Se presentan también los resultados numéricos obtenidos para el factor de multiplicación efectivo de varios problemas de prueba y se lleva a cabo una comparación con algunas técnicas basadas en esquemas nodales, métodos de matriz respuesta y el de la función de Green.

2. FORMULACIÓN NODAL DEL ESQUEMA DE DIFERENCIAS FINITAS CENTRADAS EN MALLA (DFCM)

La ecuación de difusión de neutrones en estado estacionario, para el grupo de energía g y geometría XY está dada por

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x} D_g \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_g + \frac{\partial}{\partial x} D_g \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_g\right) + (D_g B^2 + \Sigma_{Rg}) \mathbf{f}_g = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s g' \rightarrow g} \mathbf{f}_{g'} + \frac{1}{\mathbf{I}} \mathbf{c}_g \sum_{g'=1}^G \mathbf{n}_{g'} \Sigma_{fg'} \mathbf{f}_{g'}, \quad (1)$$

donde \mathbf{f}_g es el flujo de neutrones correspondiente al g -ésimo grupo de energía, $g=1, \dots, G$, y las constantes físicas tienen el significado usual. G es el número total de grupos de energía y B^2 es el buckling geométrico del sistema. El flujo de neutrones para cada grupo de energía deberá cumplir con condiciones de frontera conocidas.

El resultado clásico que se obtiene cuando un método de elemento finito discretiza, por ejemplo, la ecuación de difusión de neutrones para varios grupos de energía, se obtiene un sistema algebraico de ecuaciones. La matriz correspondiente a este sistema algebraico se construye en base a las contribuciones de dos componentes, que vienen de las matrices de rigidez y la matriz de masa. Para problemas con geometría cartesiana en 2D, el sistema de ecuaciones algebraica, en realidad un problema de valor propio, se escribe como sigue

$$\left(K_x^g + K_y^g + M_R^g\right) \underline{\mathbf{f}}^g = \sum_{g'=1}^G M_s^{g' \rightarrow g} \underline{\mathbf{f}}^{g'} + \frac{1}{\mathbf{I}} \sum_{g'=1}^G M_f^{g' \rightarrow g} \underline{\mathbf{f}}^{g'}, \quad g = 1, \dots, G \quad (2)$$

donde los elementos de las matrices locales correspondientes a las matrices de rigidez K_x^g y K_y^g están dados por

$$k_{x_{ij}}^{eg} := D_g^e \frac{\Delta y_j}{\Delta x_i} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{\partial u_i}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial u_j}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} d\mathbf{h} \quad (3a)$$

$$k_{y_{ij}}^{eg} := D_g^e \frac{\Delta x_i}{\Delta y_j} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{\partial u_i}{\partial \mathbf{h}} \frac{\partial u_j}{\partial \mathbf{h}} d\mathbf{x} d\mathbf{h} \quad (3b)$$

y los de las matrices de masa M de la siguiente manera

$$m_{ij} := \frac{\Sigma^e \Delta x_i \Delta y_j}{4} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} u_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}) u_j(\mathbf{x}, \mathbf{h}) d\mathbf{x} d\mathbf{h} \quad (4)$$

donde la Σ^e juega el papel de la sección eficaz asociada a la matriz de masa y donde las u_i involucradas en las integrales, son funciones base locales de la aproximación de elemento finito.

El siguiente paso consiste en la evaluación de las integrales en las ecuaciones (3) y (4) respectivamente. En particular, se implementó el esquema nodal de elemento finito RT-1 (Raviart-Thomas de índice 1) que interpola los momentos de Legendre de órdenes cero y primer orden por cara y los momentos de Legendre (11), (10), (01) y (11) por celda, teniendo en total 12 parámetros de interpolación por celda. En la Figura 1 se muestran el conjunto de parámetros de interpolación así como el correspondiente espacio polinomial. Para este esquema nodal, el sistema de ecuaciones algebraicas dada en (1) es de orden $(2(N_{Ex} + N_{Ey}) + 4N_C)G$ donde G es el número total de grupos de energía, N_{Ex} y N_{Ey} son el número de caras en la dirección x y y respectivamente, y N_C es el número total de celdas para un dominio dado. Para el esquema nodal RT-1, Hennart y del Valle [1,2], aplican una cuadratura Newton-Cotes abierta de 4 puntos para desacoplar los parámetros de interpolación correspondientes a los momentos de Legendre 0 y 1 entre las caras izquierda y derecha así como en las caras inferior y superior para la matriz de rigidez, y una cuadratura de Gauss-Radau de 3 puntos para la matriz de masa, de tal forma que sólo algunos elementos de la diagonal son diferentes de cero. Hennart y del Valle [1,2] utilizan un argumento basado en teoría de aproximación, precisión de cuadraturas, y un ingrediente denominado "patch test" para asegurar que el esquema de diferencias finitas centrado en malla que surge después de aplicar las reglas de cuadratura antes mencionadas al esquema nodal RT-1 es de orden 3. Como se puede ver de la Figura 1, el espacio polinomial P_3 está contenido en el espacio S_h con lo cual, sólo por esto, en principio se podría decir que el esquema, desde un punto de vista de interpolación, sería de orden 4. Pero, por otro lado, aunque la cuadratura numérica de Radau de 3 puntos integra exactamente hasta polinomios de grado cuatro no es el caso para la abierta, no-estándar, de Newton-Cotes, que sólo

integra bien hasta polinomios de tercer grado. Finalmente, el "patch test" señala que para lograr el tercer orden de precisión es necesario que se conserven al menos los momentos de Legendre de órdenes 0 y 1, que es una de las características del esquema nodal RT-1. Por lo antes mencionado, el esquema no puede tener una precisión mayor a tres.

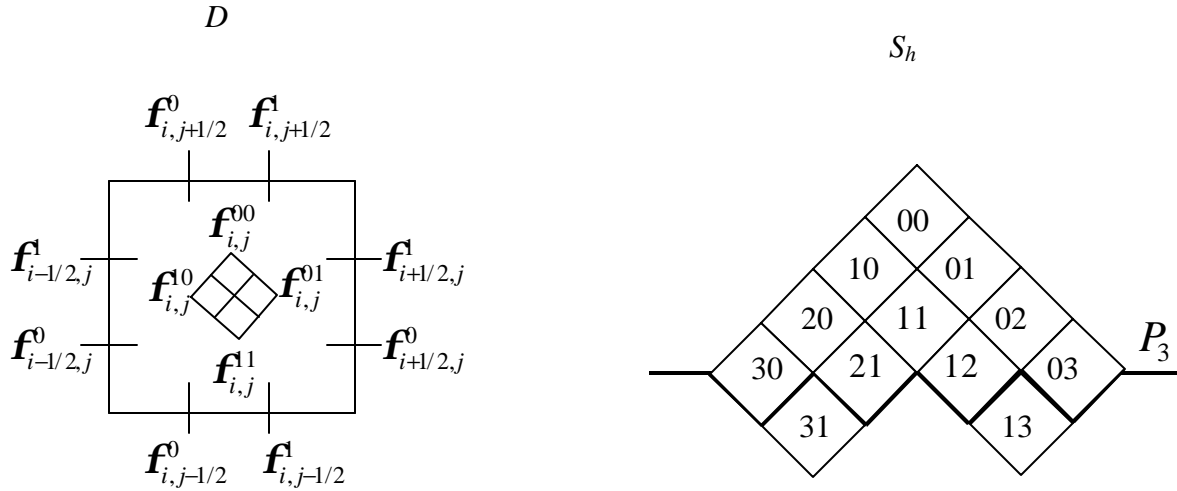


Figura 1. Conjunto de parámetros de interpolación y espacio polinomial de aproximación para el esquema nodal RT-1.

3. FORMULACIÓN NODAL RT-1 DEL ESQUEMA DE TERCER ORDEN DFCM

Para evaluar los elementos de las matrices de rigidez y masa del esquema nodal RT-1, se utilizan las reglas de integración numérica mencionadas en la sección anterior para llegar a un conjunto de ecuaciones del cual $2(N_{Ex} + N_{Ey})G$ ecuaciones son iguales a cero. Cada ecuación de este subgrupo puede ser interpretada como la continuidad de los momentos de Legendre de órdenes cero y uno de la corriente de neutrones en las direcciones x y y para cada grupo de energía, donde dichos momentos están dados para los extremos izquierdo y derecho de la celda en la siguiente forma

$$J_{xR(i,j)}^{0g} = +\frac{2D^g}{\Delta x_i} (3f_{i+1/2,j}^{0g} - 3f_{ij}^{0g} - 2f_{i,j}^{+0g}); \quad J_{xL(i,j)}^{0g} = -\frac{2D^g}{\Delta x_{i+1}} (3f_{i-1/2,j}^{0g} - 3f_{ij}^{0g} + 2f_{i,j}^{0g}) \quad (5a)$$

$$J_{xR(i,j)}^{1g} = +\frac{2D^g}{\Delta x_i} (f_{i+1/2,j}^{1g} - f_{ij}^{1g} - \frac{2}{3}f_{i,j}^{1g}); \quad J_{xL(i,j)}^{1g} = -\frac{2D^g}{\Delta x_{i+1}} (f_{i-1/2,j}^{1g} - f_{ij}^{1g} + \frac{2}{3}f_{i,j}^{1g}) \quad (5b)$$

y para las caras inferior y superior como sigue

$$J_{yT(i,j)}^{0g} = + \frac{2D_{ij}^g}{\Delta y_j} (3\mathbf{f}_{i,j+1/2}^{0g} - 3\mathbf{f}_{ij}^{0g} - 2\mathbf{f}_{i,j}^{01g}); \quad J_{xB(i,j)}^{0g} = - \frac{2D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}} (3\mathbf{f}_{i,j-1/2}^{0g} - 3\mathbf{f}_{ij}^{0g} + 2\mathbf{f}_{i,j}^{01g}) \quad (6a)$$

$$J_{yT(i,j)}^{1g} = + \frac{2D_{ij}^g}{\Delta y_j} (3\mathbf{f}_{i,j+1/2}^{1g} - 3\mathbf{f}_{ij}^{0g} - 2\mathbf{f}_{i,j}^{1g}); \quad J_{xB(i,j)}^{1g} = - \frac{2D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}} (3\mathbf{f}_{i,j-1/2}^{1g} - 3\mathbf{f}_{ij}^{0g} + 2\mathbf{f}_{i,j}^{1g}) \quad (6b)$$

Cada una de las ecuaciones que son idénticas a cero relaciona directamente los momentos de Legendre de la celda con los momentos de Legendre de las caras, permitiendo de esta manera resolver los momentos de Legendre del flujo de neutrones en las caras en términos de los momentos de Legendre del flujo de neutrones en las celdas. Por ejemplo, el momento de Legendre de orden k del flujo de neutrones en las caras correspondientes al grupo de energía g y la discretización en la dirección x está dada por

$$\mathbf{f}_{i+1/2,j}^{g,k} = \frac{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta x_i} \mathbf{f}_{i,j}^{g,0k} + \frac{D_{i+1,j}^g}{\Delta x_{i+1}} \mathbf{f}_{i+1,j}^{g,0k}}{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta x_i} + \frac{D_{i+1,j}^g}{\Delta x_{i+1}}} + \frac{2}{3} \frac{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta x_i} \mathbf{f}_{i,j}^{g,1k} - \frac{D_{i+1,j}^g}{\Delta x_{i+1}} \mathbf{f}_{i+1,j}^{g,1k}}{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta x_i} + \frac{D_{i+1,j}^g}{\Delta x_{i+1}}}, \quad k = 0,1; g = 1, \dots, G. \quad (7a)$$

mientras que el momento de Legendre de orden k del flujo de neutrones en las caras correspondientes al grupo de energía g y la discretización en la dirección y está dada por

$$\mathbf{f}_{i,j+1/2}^{g,k} = \frac{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta y_j} \mathbf{f}_{i,j}^{g,k0} + \frac{D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}} \mathbf{f}_{i,j+1}^{g,k0}}{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta y_j} + \frac{D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}}} + \frac{2}{3} \frac{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta y_j} \mathbf{f}_{i,j}^{g,k1} - \frac{D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}} \mathbf{f}_{i,j+1}^{g,k1}}{\frac{D_{i,j}^g}{\Delta y_j} + \frac{D_{i,j+1}^g}{\Delta y_{j+1}}}, \quad k = 0,1; g = 1, \dots, G \quad (7b)$$

Cuando las expresiones de los momentos de Legendre para las caras se colocan en las ecuaciones restantes, las cuales corresponden a los momentos de Legendre (00), (10), (01) y (11), en cada celda, de la ecuación de difusión para cada grupo de energía, y se obtiene un sistema de ecuaciones algebraico simplificado de orden $4N_c G$, formalmente un problema de valor propio dado por

$$L_{x(i,j)}^{g,kl} + L_{y(i,j)}^g + \sum_{R(i,j)}^g \mathbf{f}_{i,j}^{g,kl} = \sum_{g'=1}^G \sum_{s(i,j)}^{g' \rightarrow g} \mathbf{f}_{i,j}^{g',kl} + \frac{1}{I} \mathbf{c}_{(i,j)}^g \sum_{g'=1}^G \mathbf{m}_{f(i,j)}^{g'} \mathbf{f}_{i,j}^{g',kl}, \quad k, l = 0,1, g = 1, \dots, G \quad (8)$$

donde $L_{x(i,j)}^{g,kl}$ y $L_{y(i,j)}^{g,kl}$ se relacionan con los momentos de Legendre de orden (kl) del término de fugas en las direcciones x y y , donde (i,j) identifica a la celda $C_{i,j} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$. Se puede observar que las incógnitas del sistema

de ecuaciones (8) son únicamente los momentos de Legendre en la celda. El sistema algebraico dado en (8) se puede reescribir en la siguiente forma

$$\sum_{g'=1}^G A^{gg'} \underline{\Phi}^{g'} = \frac{1}{I} \sum_{g'=1}^G B^{gg'} \underline{\Phi}^{g'}, g = 1, \dots, G \quad (9)$$

donde las matrices A^{gg} tienen una estructura análoga a la que tiene el esquema clásico de diferencias finitas en geometría XY donde cada entrada diferente de cero de dicha matriz es una matriz bloque 4×4 . Todas las otras matrices involucradas son diagonales. Esta estructura se modifica finalmente empleando un reordenamiento grupos de energía-momentos de celda. Un punto a favor es que los momentos de Legendre en las caras no se necesitan en el proceso que se sigue para alcanzar la solución numérica del sistema algebraico. Así, los momentos de Legendre en las caras de las celdas se pueden calcular una vez que se obtiene la solución numérica del problema de difusión si se necesita una distribución detallada del flujo de neutrones en una celda dada o en el núcleo completo. Aunque únicamente se resuelven problemas en 2D este método se puede extender a problemas en 3D.

4. RESULTADOS NUMÉRICOS DE TRES PROBLEMAS DE PRUEBA

Para probar el esquema DFCM(RT-1) descrito anteriormente se resolvieron tres problemas de prueba que están completamente descritos en [3]. Los problemas de prueba fueron los siguientes: Biblis 2D PWR (P1), LRA 2D BWR (P2), y finalmente el problema para un LMFBR (P3). Estos problemas fueron resueltos utilizando dos mallas diferentes por celda. Los resultados que se encontraron (MC1G) fueron comparados contra: MC0G, la versión RT-0 de esta técnica, MH-RT-1, una formulación híbrida mezclada del esquema nodal RT-1 [4], NRMPO, un código basado en el desarrollo de un método nodal de respuesta [5], y NGFM, un código basado en el desarrollado de un método nodal con funciones de Green [3]. El resultado del factor de multiplicación efectiva k_{eff} se muestra en la Tabla I. Del análisis de esta tabla se observa que MC1G proporciona mejores resultados que MC0G como es de esperarse. Además, los resultados de MC1G son comparables a los obtenidos con otros métodos, como MH-RT-1 y NRMPO cuando se lleva a cabo la comparación con el valor de referencia presentado por NGFM.

Tabla I. Resultados numéricos para k_{eff}

Problema (Malla)	MC0G	MC1G	MH-RT-1	NRMPO	NGFM (Malla)
P1 (1x1)	1.040908	1.025545	1.025027	1.025247	1.025103 (6x6)
P1 (2x2)	1.028476	1.025023			
P2 (1x1)	1.003887	0.995471	0.995388	0.996420	0.996368 (4x4)
P2 (2x2)	0.997495	0.996034			
P3 (2x2)	1.067188	1.056901	1.056888	1.057005	1.056991 (4x4)
P3 (4x4)	1.059452	1.056982			

5. CONCLUSIONES

Se ha desarrollado y aplicado un esquema de tercer orden de diferencias finitas centradas en malla para resolver numéricamente la ecuación de difusión de multigrupos. La precisión de la técnica, junto con la reducción del número total de incógnitas así como la utilización de un reordenamiento grupos de energía-momentos de celda, permiten resolver el sistema de ecuaciones en una forma eficiente. Los resultados numéricos para los problema de prueba concuerdan con el alto orden de los esquemas nodales que se utilizaron con fines de comparación.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) el apoyo para desarrollar este trabajo bajo el Proyecto de Investigación 33806-U.

REFERENCIAS

1. J. P. Hennart and E. del Valle, "Nodal mesh-centered finite difference schemes," *Trans. Am. Nucl. Soc.* **73**, 189 (1995).
2. J. P. Hennart and E. del Valle, "Mesh-centered nodal finite elements for elliptic problems," *Num. Meth. Part. Diff. Eqs.*, **14**(4), pp. 439-465 (1998).
3. R.D. Lawrence, "A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations", *PhD Thesis*, University of Illinois at Urbana Champaign, (1979).
4. J.P. Hennart, E. Malambu, E.H. Mund, and E. del Valle, "Efficient higher order nodal finite element formulations for neutron multigroup diffusion equations", *Nucl. Sci. Engng.* **124**, 97-110 (1996).
5. E. Malambu, "Contribution au Méthodes Nodales pour les Équations de Diffusion Multigroupe de Neutrons", *Thèse de Docteur en Sciences*, Université Catholique de Louvain, Louvain-la Neuve (1994).