

D.V.Altiparmakov¹ i M.S.Milgram²

¹Institut za nuklearne nauke "Boris Kidrič" - Vinča
 OOUR Institut za nuklearnu energetiku i tehničku fiziku "NET"
 P.Fah 522, 11001 Beograd, Jugoslavija

²Atomic Energy of Canada Limited
 Chalk River Nuclear Laboratories
 Chalk River, Ontario K0J 1J0, Canada

UPOREĐENJE NEKIH VARIJACIONIH REŠENJA DIFUZIONE JEDNAČINE NEUTRONA

A COMPARISON OF CERTAIN VARIATIONAL SOLUTIONS OF NEUTRON DIFFUSION EQUATION

SADRŽAJ: Koristeći teoriju R-funkcija i varijacionu metodu Kantoroviča konstruisano je aproksimativno rešenje difuzione jednačine neutrona u homogenoj prostornoj oblasti proizvoljnog oblika. Proračuni su izvršeni sa pet različitih probnih funkcija za neke karakteristične oblasti poligonalnog oblika (kvadrat, trougao, heksagon, romb i oblast L-oblika). U slučaju konkavnih poligona, čini se da rešenje na bazi R-funkcija slabo konvergira, te je neophodan poseban tretman singulariteta. U poredjenju sa R-funkcijama, razvoj po singularnim funkcijama Šoškova ima znatno komplikovaniji matematički oblik, međjutim odlikuje se većom brzinom konvergenције.

ABSTRACT: Using the R-function theory and the variational method of Kantorovich, an approximate solution of the neutron diffusion equation is constructed for a homogeneous spatial domain of arbitrary shape. Calculations have been carried out by five different types of trial functions for certain characteristic domains of polygonal shape (square, triangle, hexagon, rhombus and L-shaped domain). In the case of non-convex polygons, the convergence of the R-function solution is very poor and a separate treatment of singularity seems to be necessary. Compared to the R-function solution, the singular function development is mathematically more complicated, but superior in respect to convergence rate.

1. UVOD

Povećani zahtevi sigurnosti i ekonomičnijeg rada nuklearnih elektrana nametnuli su potrebu za što bržom i tačnijom simulacijom procesa u nuklearnom reaktoru. Jedno od ključnih pitanja pri tome jeste rešenje difuzione jednačine neutrona u višedimenzionim modelima reaktora sa složenim geometrijskim oblikom. U velikom šarenilu postojećih numeričkih metoda, pokazalo se da su nodalne

aproksimacije, posebno tzv. analitičke kvazi-jednodimenzione nodalne metode, naj-efikasnije u pogledu brzine i tačnosti proračuna. Međutim, njihova primena je ograničena skoro isključivo na modele reaktora sa pravougaonom strukturom, te se i dalje oseća potreba za jednako efikasnim metodama u drugim geometrijama.

Većina numeričkih aproksimacija zasniva se na rasparčavanju zadate geometrijske oblasti na podoblasti jednostavnog oblika. Za razliku od toga, u varijacionoj metodi Kontroroviča [1] predložen je analitički tretman oblasti. Koristeći teoriju R-funkcija [2], ova metoda može da se primeni u modelima proizvoljnog geometrijskog oblika. Zahvaljujući unapred ugrađenoj analitičkoj informaciji o geometriji problema, može se očekivati da će ovakva aproksimacija dati istu tačnost sa manjim brojem stepena slobode (nepoznatih koeficijenata) u odnosu na druge metode. To je bilo već potvrđeno nekim reaktorskim proračunima metodom uloženi elemenata [3-5].

Ovaj rad se bavi pitanjem konvergencije aproksimativnog rešenja. U nedostatku praktično primenljivih teorijskih procena greške, analiza je izvršena na seriji proračuna za nekoliko karakterističnih geometrijskih oblasti. Radi jednostavnosti razmatrana je Helmholtzova jednačina

$$\Delta \phi + \lambda \phi = 0, \quad (1)$$

u homogenoj dvodimenzionoj oblasti Ω sa Dirichletovim uslovom na granici $\delta\Omega$,

$$\phi = 0 \text{ na } \delta\Omega \quad (2)$$

Najmanja sopstvena vrednost λ_1 jednačine (1) jednaka je kvadratu geometrijskog parametra odgovarajućeg modela kritičnog reaktora, dok prva sopstvena funkcija ϕ_1 opisuje raspodelu neutronskog fluksa. Ista matematička formulacija, jednačine (1) i (2), sreće se i kod problema sopstvenih vrednosti vibrirajućih membrana.

2. APROKSIMATIVNO REŠENJE

Pretpostavimo da je na oblasti Ω zadat kompletan skup kontinualnih i diferencijabilnih funkcija $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, n}$, koje zadovoljavaju granični uslov (2). Aproksimativna vrednost $\lambda_1^{(n)}$ prve sopstvene vrednosti λ_1 jednačine (1) jednaka je stacionarnoj tački Rayleighovog količnika u n -dimenzionom prostoru funkcija $S_n(\Omega)$ sa bazisom $\{\xi_i\}$, tj.

$$\lambda_1^{(n)} = \inf_{\psi \in S_n(\Omega)} \left\{ \frac{\int_{\Omega} (\nabla \psi)^2 d\Omega}{\int_{\Omega} \psi^2 d\Omega} \right\}, \quad (3)$$

gde je probna funkcija ψ sledećeg oblika:

$$\psi = \sum_{i=1}^n C_i \xi_i. \quad (4)$$

Iz uslova stacionarnosti dobija se homogeni sistem od n linearnih algebarskih jednačina po nepoznatim koeficijentima C_i . Kompletnost skupa $\{\xi_i\}$ implicira konvergenciju aproksimativnog rešenja ka tačnom, odnosno $\lambda_1^{(n)} + \lambda_1$ i $\phi_1^{(n)} = \sum C_i \xi_i + \phi_1$

kada $n \rightarrow \infty$, gde je $\{C_{11}\}$ prvi sopstveni vektor sistema algebarskih jednačina.

Pretpostavimo da je na oblasti Ω zadata kontinualna i diferencijabilna funkcija ω sa sledećim svojstvima

$$\omega(x,y) \begin{cases} > 0, & (x,y) \in \Omega \\ = 0, & (x,y) \in \delta\Omega \end{cases} \quad (5)$$

Bazis $\{\zeta_i\}$ sada lako može da se konstruiše [1] u obliku $\{\omega \zeta_i\}$, gde je $\{\zeta_i \mid \zeta_i \in C^1(\Omega)\}$ proizvoljni bazis.

Primenom analitičke geometrije, funkcija ω može lako da se konstruiše samo za ograničenu klasu oblasti (analitičke figure, konveksne polu-analitičke figure i sl.). Situacija je daleko teža kada se radi o oblasti složenog geometrijskog oblika. Međutim, teorija R-funkcija [2] je dala opšte rešenje pitanja geometrije u problemima graničnih vrednosti i time omogućila primenu ove metode na oblasti proizvoljnog oblika.

3. REZULTATI PRORAČUNA

U ovom radu razmatrane su sledeće oblasti poligonalnog oblika:

- 1) Kvadrat stranice $a = 2$,
- 2) Jednakostrani trougao visine $h = 3$
- 3) Pravihni heksagon visine $h = 2$,
- 4) Romb stranice $a = 1$ i ugla $\theta = 45^\circ$,
- 5) Oblast L-oblika, koja je sastavljena od 3 kvadrata stranice $a = 1$.

Usled prisustva čoškova (neregularnih tačaka granice $\delta\Omega$), rešenje jednačine (1) ima singularnu komponentu. Asimptotsko ponašanje rešenja u okolini čoška može se predstaviti u sledećem obliku [6]:

$$\phi(r, \theta) = \sum_{l=1}^{\infty} a_l \sin(l\theta/\alpha) J_{l/\alpha}(\sqrt{\lambda} r), \quad (6)$$

gde su r i θ polarne koordinate, α je veličina ugla, a $J_{l/\alpha}$ je Besselova funkcija prve vrste reda l/α . Kao posledica singularnog karaktera rešenja, može doći do značajnog smanjenja brzine konvergencije, pa čak i do praktične neprimenljivosti pojedinih aproksimacija.

Proračuni su izvršeni sa sledećim probnim funkcijama:

$$A. \quad \psi = \omega \sum_{i=1}^n C_i P_i(x,y) \quad (7)$$

$$B. \quad \psi = \omega f_c \sum_{i=1}^n C_i P_i(x,y) \quad (8)$$

$$C. \quad \psi = \omega f_c \sum_{i=1}^n C_i P_i(\omega, \omega_{c1}, \dots, \omega_{ck}) \quad (9)$$

$$D. \quad \psi = \omega^* f_c \prod_{i=1}^n C_i P_i(\omega^*, \omega_{c1}, \dots, \omega_{ck}) \quad (10)$$

Polazeći od različitih mogućih funkcija elementarnih sastavnih oblasti (stranice poligona) i koristeći različite sisteme R-operacija, za datu složenu oblast Ω može da se konstruiše beskonačni skup funkcija ω . Mi smo koristili jednačinu prave u normalnom obliku (za poluravni koje predstavljaju stranice poligona) i sistem $\frac{R}{2}$ -operacija. Ovaj sistem rezultira funkcijama iz klase $C^1(\Omega)$ i održava normalizovanost funkcija sastavnih oblasti. Pored toga on zadovoljava zakone distributivnosti i asocijativnosti, čime se geometrijska simetrija oblasti prenosi i na odgovarajuću R-funkciju oblasti.

Funkcije $p_i(x,y)$ u aproksimacijama A i B predstavljaju polinome prostornih koordinata x i y . U cilju smanjenja broja nepoznatih koeficijenata, korišćeni su samo polinomi koji zadovoljavaju geometrijsku simetriju. Radi povećanja tačnosti, pomoću funkcije f_c u aproksimacijama B, C i D, ugrađen je vodeći član $r^{1/\alpha}$ razvoja singularne komponente. Pri tome, funkcija f_c ima sledeći oblik:

$$f_c = \prod_{k=1}^k \left| \vec{r} - \vec{r}_k \right|^{1/\alpha k - 1} \quad (11)$$

gde je k indeks čoška α odgovarajući ugao, a \wedge označava operaciju $\frac{R}{2}$ -konjunkcije. Za razliku od $\frac{R}{2}$ -funkcija, u aproksimaciji D (primenljiva samo za konveksne oblasti) funkcija ω^* konstruisana je kao proizvod funkcija sastavnih oblasti (stranica poligona). Ne zalazeći u razmatranje pitanja kompletnosti, u aproksimacijama C i D, umesto polinoma prostornih koordinata, korišćeni su polinomi funkcija oblasti ω i funkcija čoškova ($\omega_{ck} = |\vec{r} - \vec{r}_k|$). Slično tome, bez dokaza o kompletnosti, definisana je i sledeća probna funkcija na osnovu razvoja po singularnim funkcijama čoškova:

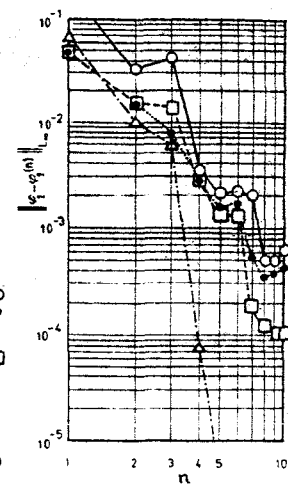
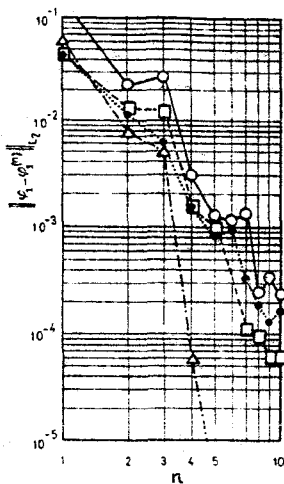
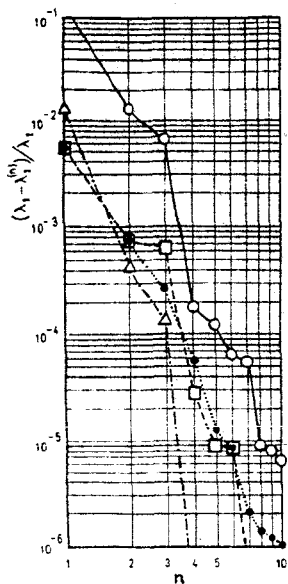
$$E. \quad \psi = \prod_{i,j,k} C_{ijk} \omega_k^i |\vec{r} - \vec{r}_k|^{\frac{2j+1}{\alpha k}} \sin \frac{2j+1}{\alpha k} (\theta - \theta_k), \quad (12)$$

gde je k indeks čoška, a funkcija ω_k^i je jednaka nuli na svim stranicama poligona, izuzev na stranicama koje zaklapaju posmatrani ugao.

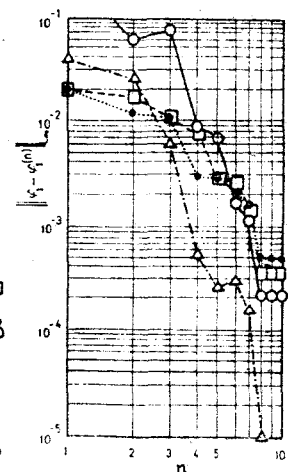
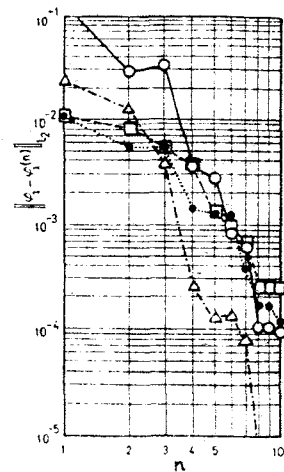
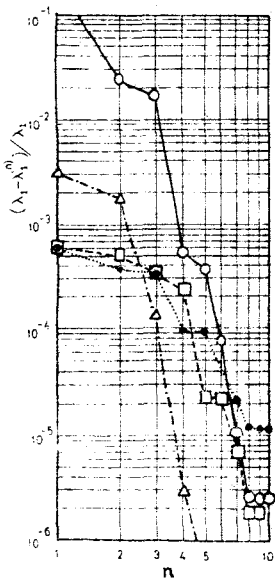
Rezultati proračuna prve sopstvene vrednosti λ_1 sa različitim brojem stepena slobode n prikazani su u tabeli 1. Pored toga, za oblasti oblika kvadrata i jednakost ranog trougla (raspoloživo analitičko rešenje), na slici 1 prikazana je relativna greška prve sopstvene vrednosti, kao i globalna i lokalna greška prve sopstvene funkcije, u zavisnosti od broja stepena slobode aproksimacije.

Tabela 1: Prva sopstvena vrednost $\lambda_1^{(n)}$ u zavisnosti od broja stepena slobode aproksimacije

Oblast	n	apr. A	apr. B	apr. C	apr. D	apr. E	oblast	n	apr. A	apr. B	apr. C	apr. D	apr. E
Kvadrat	1	5.5306105	4.9631191	4.9631190	5.0000000	5.0000000	R-obl.	1			34.9346		40.4868
	2	4.9971879	4.9386408	4.9384703	4.9363957	4.9369559		2			34.9587		35.2387
	3	4.9686964	4.9361956	4.9381736	4.9348871	4.9354326		3			34.9524		34.9187
	4	4.9356858	4.9350928	4.9349442	4.9348280	4.9348023		4			34.9243		34.8457
	5	4.9353978	4.9348639	4.9348464	4.9348205	4.9348022		5			34.9129		34.7869
	6	4.9351083	4.9348441	4.9348474	4.9348186	4.9348022		6			34.7848		34.7836
	7	4.9350930	4.9348126	4.9348057	4.9348088			7			34.7848		34.7660
	8	4.9348481	4.9348092	4.9348027	4.9348057			8			34.7671		34.7535
	9	4.9348438	4.9348081	4.9348023	4.9348042			9			34.7420		34.7468
	10	4.9348341	4.9348073	4.9348023	4.9348042			10			34.7368		34.7468
Tažna vrednost		$\lambda_1 = 4.9348022$					Uporedna vrednost [7] $\lambda_1^- = 34.7114 < \lambda_1 < \lambda_1^+ = 35.0282$						
Trougao	1	5.2408307	4.3892416	4.3892416	4.5767564	4.4000000	L-obl.	1	11.6669	9.9717	9.9717		9.86768
	2	4.4954927	4.3881695	4.3888305	4.3899311	4.3945122		2	11.4342	9.7667	9.9142		9.66285
	3	4.4600021	4.3880707	4.3870716	4.3872400	4.3870880		3	11.3417	9.7471	9.7530		9.65734
	4	4.3889119	4.3869230	4.3875308	4.3868622	4.3865031		4	10.1553	9.7401	9.7523		9.64634
	5	4.3881403	4.3869177	4.3865950	4.3867144	4.3864929		5	10.1515	9.7347	9.6821		9.64634
	6	4.3868370	4.3868554	4.3865950	4.3865629	4.3864923		6	10.1515	9.7331	9.6816		9.64093
	7	4.3865385	4.3865898	4.3865226	4.3865384	4.3864915		7	10.1126	9.7176	9.6764		9.64048
	8	4.3865025	4.3865450	4.3864991	4.3865142	4.3864908		8	10.0744	9.7176	9.6718		9.64040
	9	4.3865025	4.3865450	4.3864990	4.3864947	4.3864908		9	10.0688	9.7157	9.6713		9.63967
	10	4.3865024	4.3865430	4.3864940	4.3864941			10	10.0419	9.7151			9.63948
Tažna vrednost		$\lambda_1 = 4.3864909$					Referentna vrednost [8] $\lambda_1 = 9.6397238$						
Heksagon	1			5.5255936		5.3835979							
	2			5.3760324		5.3669692							
	3			5.3757308		5.3668875							
	4			5.3670233		5.3666789							
	5			5.3667390		5.3665120							
	6			5.3665853		5.3665056							
	7			5.3665730		5.3665042							
	8			5.3665687		5.3665042							
	9			5.3665579		5.3665042							
	10			5.3665336		5.3665040							



1.a: Greške aproksimacije za oblast oblika kvadrata



1.b: Greške aproksimacije za oblast oblika trougla

APROKSIMACIJA: A ○ ○ ○ ○
 B ● ● ● ●
 C □ □ □ □
 E △ △ △ △

Sl.1: Relativna greška prve sopstvene vrednosti $\lambda_1^{(n)}$ i norme (L_2 i L_∞) greške prve sopstvene funkcije $\phi_1^{(n)}$

4. DISKUSIJA REZULTATA I ZAKLJUČAK

Prostorne oblasti, koje su razmatrane u ovom radu, izabrane su sa ciljem da se omogući jasnije sagledavanje pojedinih efekata, u prvom redu uticaj singulariteta čoškova. Tako, tri pravilna poligona (trougao, kvadrat i heksagon) mogu dati sliku o uticaju veličine ugla, romb ilustruje efekte različitih čoškova, dok L-oblast uključuje konkavni ugao i odgovarajući "jaki" singularitet. Iz prikazanih rezultata, jasno se uočava razlika u tačnosti između konveksnih poligona i konkavne L-oblasti. U slučaju konveksnih oblasti, sve razmatrane aproksimacije daju visoku tačnost (relativna greška prve sopstvene vrednosti je manja od 10^{-4}) za vrlo mali broj stepena slobode ($n < 10$). Poredeći sa klasičnim aproksimacijama, potvrđuje se očekivanje da analitičko ugrađivanje geometrijske informacije doprinosi značajnom smanjenju broja stepena slobode aproksimacije. Tako na primer, kod heksagona metodom konačnih razlika postiže se tačnost istog reda veličine ($\lambda_1 = 5.36356$) tek sa 1536 nepoznatih koeficijenata [9]. Mada se radi o dosta grubljim aproksimacijama, slična situacija je i u slučaju L-oblasti. Da bi se dobila prva sopstvena vrednost sa tačnošću od 3×10^{-2} u metodi konačnih razlika potreban je korak mreže od $h = 1/16$ (360 koeficijenata) [10]. Bez uključivanja singularnih funkcija, nema poboljšanja ni kod Hermiteovih konačnih elemenata ($\lambda_1 = 9.887$ za korak mreže $h = 1/8$) [11].

Posmatrajući rezultate dobijene sa samo jednim stepenom slobode ($n = 1$), uočava se da ugrađivanje vodećeg člana singulariteta značajno doprinosi tačnosti R-aproksimacije. Ovakva aproksimacija (B i C) je vrlo dobra za konveksne poligone u kojima su dominantni mali uglovi (trougao, kvadrat, romb). Greška raste sa povećanjem ugla, tako da od veličine 10^{-3} za trougao, 5×10^{-3} za kvadrat, dostiže vrednost 3×10^{-2} u slučaju heksagona i L-oblasti. Pri tome, očito je da dolazi do određene interferencije uticaja različitih uglova, što bi trebalo razmatrati detaljnije u daljem radu.

U pogledu brzine konvergencije, aproksimacija E (razvoj po singularnim funkcijama) je superiorna u odnosu na ostale, koje su međusobno ravnopravne. Pri tome, pomenimo da i u metodi Hermitovih konačnih elemenata sa singularnim funkcijama [11], tačnost rešenja u suštini potiče od singularnih funkcija. U prikazanim rezultatima, mali broj stepena slobode je velikim delom rezultat činjenice da probne funkcije unapred zadovoljavaju geometrijsku simetriju problema. To posebno dolazi do izražaja kod aproksimacije E primenjene na oblast L-oblika. U ovom slučaju, pored očigledne geometrijske simetrije, rešenje jedinačine (1) zadovoljava još jednu simetriju [8], koja je sadržana u aproksimaciji E, ali ne može da se ugradi u R-funkcijama oblasti. Kada je u pitanju geometrijska simetrija, aproksimacija C je u prednosti nad ostalima jer se primenom $\frac{0}{2}$ sistema, simetrija automatski ugrađuje u R-funkcije oblasti. Kod ostalih aproksimacija polinoma prostornih koordinata (A i B), kao i singularne funkcije (E), treba birati zavisno od vrste simetrije.

Za razliku od većine postojećih aproksimacija, metoda R-funkcija daje jednostavno formalno rešenje, bez obzira na geometrijski oblik posmatrane oblasti. Međutim, iz prikazanih rezultata za L-oblik, čini se da su tačnost i brzina konvergencije pod znakom pitanja kada se radi o konkavnim oblastima. U tom slučaju neophodan je poseban tretman singulariteta konkavnih čoškova.

Kod uobičajenih modela reaktora (jezgro okruženo reflektorom) singulariteti spoljašnje površine ne dolaze do posebnog izražaja. Usled sličnih vrednosti nuklearnih karakteristika materijala, ni singulariteti unutrašnjih granica nemaju velikog uticaja. Kao rezultat toga, metodom uloženi elemenata (superpozicija probnih funkcija oblika A,B ili C) dobijeni su dosta dobri rezultati [3-5] za modele reaktora sa složenim geometrijskim oblikom. Pitanje singulariteta konkavnih čoškova može postati aktuelno prilikom proračuna eksperimentalnih reaktora na brze neutrone, kod kojih pojedini delovi aktivne zone nisu okruženi reflektorom. U tom slučaju, pored neadekvatnosti matematičkog modela (1-2), mogu se očekivati i vrlo grube numeričke greške klasičnih aproksimacija. Do slične situacije može doći i prilikom proračuna termalnih reaktora sa vrlo jakim ("oznim") apsorberima.

Zahvalnost

Veliki deo ovog rada nastao je za vreme boravka jednog od autora (D.A.) u Nuklearnim laboratorijama u Čok Riveru (CRNL). Koristimo ovu priliku da izrazimo zahvalnost CRNL-u, kao i Republičkoj zajednici nauke SR Srbije, koja je finansirala taj boravak.

REFERENCE

- [1] L.V.Kantorovich and V.I.Krylov, "Approximate Methods of Higher Analysis", New York, Interscience Publishers.
- [2] V.L.Rvačev, "Teorija R-funkcij i nekotore priloženija", Kiev, Naukova Dumka, 1982.
- [3] D.Altiparmakov, "Metoda uloženi elemenata u višedimenzionim proračunima nuklearnih reaktora", XXVII Konferencija ETAN-a, Struga, 6-10 juna 1983., Knjiga V, str.441-448.
- [4] D.Altiparmakov, "Nested Element Method in Multidimensional Neutron Diffusion Calculations", Proc. ITM on Numerical Methods in Nuclear Engineering, Montreal, Sept. 6-9, 1983, Vol.1, p.327.
- [5] D.Altiparmakov, "On Trial Functions in the Nested Element Method", Nucl. Sci. and Eng., 92, 330, 1986.
- [6] R.S.Lehman, "Developments at an Analytic Corner of Solutions of Elliptic Partial Differential Equations", Journ. of Mathematics and Mechanics, 8, 5, 727, 1959.
- [7] J.T.Stadter, "Bounds to Eigenvalues of Rhombical Membranes", J.SIAM Appl. Math., 14, 2, 324, 1966.
- [8] L.Fox, P.Henrici and C.Moler, "Approximations and Bounds for Eigenvalues of Elliptic Operators", SIAM J.Numer.Anal., 4, 1, 89, 1967.
- [9] S.Douglas, CRNL, Privatna komunikacija.
- [10] J.K.Reid and J.E.Walsh, "An Elliptic Eigenvalue Problem for a Reentrant Region", J.Soc.Indust.Appl.Math., 13, 3, 837, 1965.
- [11] G.J.Fix, S.Gulati and G.I.Wakoff, "On the Use of Singular Functions with Finite Element Approximations", J.Comp. Physics, 13, 209, 1973.