

ST1-A

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NA SOLUÇÃO DA
EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO.

Shizuca Ono - IEAv/CTA
José R. Maiorino - IPEN/CNEN-SP

SUMÁRIO

A solução da equação de difusão de nêutrons em estado estacionário é obtida através do método dos elementos finitos. Especificamente, usa-se a técnica variacional para problemas em uma dimensão e a técnica dos resíduos ponderados (aproximação de Galerkin) para problemas em uma ou duas dimensões. Elementos retangulares são utilizados para a divisão do domínio espacial e o fluxo de nêutrons é aproximado por função linear (caso unidimensional) e função bilinear (caso bidimensional). Resultados numéricos são obtidos por meio de um programa de computador em linguagem FORTRAN IV e comparados com os fornecidos pelo código CITATION de diferenças finitas.

1. INTRODUÇÃO

A partir da década de 1960, o Método dos Elementos Finitos (MEF) vem se desenvolvendo de uma maneira acelerada dentro das técnicas numéricas computacionais, para a solução de problemas de valor no contorno. Apesar de ter sido inicialmente mais aplicado e obtido maior sucesso em problemas práticos da mecânica estrutural, tem sido aplicado também em cálculos de transferência de calor, mecânica dos fluídos e outras áreas. Programas computacionais elaborados são disponíveis para análise de estrutura de aeronaves, construção naval, cálculo do vaso de pressão de reatores nucleares e outros problemas básicos da engenharia civil estrutural [5]. O número de vantagens inerentes que conduziu ao uso extensivo desse método nas áreas acima citadas resultou no interesse de sua aplicação em cálculos de física de reatores. Com precisão e relativa facilidade o MEF pode tratar geometrias regulares e irregulares, materiais homogêneos e heterogêneos e quaisquer combinações de condições de contorno, além de poder-se utilizar aproximações de alta ordem.

Dentre vários trabalhos publicados em cálculos neutrônicos citam-se os de Kang e Hansen [6,7]; Semenza, Lewis e Rossow [10]; Franke [4]; Nakata [8] e o seminário sobre aplicação do MEF em cálculos de blindagens [11].

Basicamente, o MEF é um procedimento numérico pelo qual equações diferenciais são discretizadas dividindo o domínio do problema em subdomínios (ou elementos). Funções de interpolação são formuladas dentro de cada elemento em termos dos parâmetros associados aos pontos discretos, ou nos dos contornos, desses elementos. Para isso várias técnicas são utilizadas destacando-se a variacional e a técnica dos resíduos ponderados.

No presente trabalho o MEF é utilizado no cálculo neutrônico em problemas unidimensionais com a técnica variacional e a técnica dos resíduos ponderados e problemas bidimensionais com a técnica dos resíduos ponderados, com elementos retangulares e funções lineares.

2. FORMULAÇÃO GERAL

Seja o problema de valor no contorno descritas por equações do tipo :

$$\text{Lop } U(\underline{x}) = f(\underline{x}), \quad \underline{x} \in \Omega \quad (2.1)$$

e

$$\alpha(\underline{n} \cdot \nabla U(\underline{x})) + \beta U(\underline{x}) = g(\underline{x}), \quad \underline{x} \in \partial\Omega \quad (2.2)$$

onde Lop é um operador diferencial, U a variável dependente (uma função definida sobre o domínio Ω) das variáveis independentes expressas pelo vetor $\underline{x} \in \Omega$, $f(\underline{x})$ e $g(\underline{x})$ funções especificadas. O valor de $U(\underline{x})$ é obtido pela divisão do domínio (Ω) em subdomínios (Ω^e) e da aproximação de $U(\underline{x})$ por funções contínuas dentro do elemento. Assim

$$U(\underline{x}) = U(\underline{x}) = \sum_i a_i \mu_i, \quad (2.3)$$

onde μ_i são funções bases contínuas no subdomínio, em termos das variáveis independentes, e a_i são os parâmetros incógnitas.

A solução é obtida tratando o problema original, que consiste de equações diferenciais, numa forma integral equivalente, i.e.,

$$I = \int_{\Omega} F d\Omega + \int_{\partial\Omega} H d(\partial\Omega), \quad (2.4)$$

onde F e H são funções, combinações de funções ou operadores integrais no domínio (Ω) e seu contorno ($\partial\Omega$) respectivamente. As duas técnicas principais que envolvem tais formas são a variacional e a técnica dos resíduos ponderados.

2.1. Técnica Variacional [12]

Nessa técnica a forma integral correspondente é obtida a partir de teoremas da Física-Matemática os quais garantem que a solução de problemas de valor no contorno, do tipo das eqs. (2.1) e (2.2), é equivalente a extremizar funcionais associados à equação diferencial, ou seja, a função que extremiza o funcional é a solução da equação diferencial.

Para um elemento (e), a forma integral é expressa como :

$$I^e = \int_{\Omega^e} F d\Omega^e + \int_{\partial\Omega^e} H d(\partial\Omega^e) \quad (2.5)$$

onde F e H são função da variável dependente $U(\underline{x})$, que é aproximada por $\bar{U}(\underline{x})$ dentro de cada elemento. Portanto:

Finalmente escolhendo-se um número adequado de funções ponderação $W(\underline{r})$, pode-se obter, um conjunto de equações algébricas lineares para os coeficientes a_i .

3.1. Técnica Variacional

Partindo da equação de difusão, a um grupo, na forma :

$$-\nabla \cdot D(\underline{r}) \nabla \phi(\underline{r}) + \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) - S(\underline{r}) = 0, \quad \underline{r} \in \Omega \quad (3.1)$$

com as condições de contorno

$$\phi(\underline{r}) = 0, \quad \underline{r} \in \partial\Omega \quad (3.2)$$

$$\text{e/ou } \frac{\partial \phi(\underline{r})}{\partial \eta} = 0, \quad \underline{r} \in \partial\Omega \quad (3.3)$$

onde a notação $\bar{\epsilon}$ convencional, o funcional equivalente é dado como [1]:

$$I(\underline{r}, \phi, \phi') = 1/2 \int_{\Omega} \{ -D(\underline{r}) \{ \nabla \phi(\underline{r}) \}^2 - \Sigma_a(\underline{r}) \{ \phi(\underline{r}) \}^2 + 2S(\underline{r}) \phi(\underline{r}) \} d\Omega \quad (3.4)$$

Dividindo o domínio em n elementos e expressando a equação (3.4) para cada elemento tem-se:

$$I = \sum_e I^e \quad (3.5)$$

o fluxo de nêutrons $\phi(\underline{r})$ é aproximado por

$$\phi(\underline{r}) = \sum_i \phi_i \mu_i(\underline{r}) \quad (3.6)$$

onde $\mu_i(\underline{r})$ são as funções bases de tal maneira que

$$\mu_i(\underline{r}_j) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.7)$$

e desta forma o funcional I fica sendo uma função dos valores nodais ϕ_i , que extremizado em relação a ϕ_i , ou seja

$$\frac{\partial I}{\partial \phi_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.8)$$

obtem-se o sistema de equações algébricas

$$I = \sum_e I^e \quad (2.6)$$

Pelo princípio variacional deve-se ter :

$$\delta I = 0 \quad (2.7)$$

A equação (2.7) representa um conjunto de equações simultâneas dos quais se obtêm os parâmetros incôgnitas (ai).

2.2. Técnica dos Resíduos Ponderados [12]

É um procedimento de derivação direta da equação diferencial a ser resolvida. Assumindo-se um comportamento o mais próximo possível do comportamento real da variável a ser calculada, obtêm-se um erro de aproximação, ou resíduo (R):

$$\text{Lop } \bar{U}(\underline{r}) - f(\underline{r}) = R \neq 0. \quad (2.8)$$

A técnica consiste em impor que esse resíduo se anule em média sobre todo o domínio da solução. Assim:

$$\int_{\Omega} \{ (W \text{Lop } \bar{U}(\underline{r}) - Wf(\underline{r})) d\Omega + \int_{\partial\Omega} W \{ \alpha(\underline{n} \cdot \nabla \bar{U}(\underline{r})) + \beta \bar{U}(\underline{r}) - g(\underline{r}) \} d(\partial\Omega) \} = 0 \quad (2.9)$$

onde W é a função ponderação. Dependendo da escolha da função ponderação tem-se os vários tipos do método dos resíduos ponderados. Particularmente, para a função ponderação igual à função de aproximação, a técnica dos resíduos ponderados é chamada aproximação de Galerkin.

Desta forma, usando-se a aproximação dada pela eq. (2.3) e subdividindo-se a integral no domínio, nos respectivos elementos obtêm-se :

$$\sum_e \left\{ \int_{\Omega^e} \{ W \text{Lop } \bar{U}(\underline{r}) - Wf(\underline{r}) \} d\Omega^e + \int_{\partial\Omega^e} W \{ \alpha(\underline{n} \cdot \nabla \bar{U}(\underline{r})) + \beta \bar{U}(\underline{r}) - g(\underline{r}) \} d(\partial\Omega^e) \right\} = 0 \quad (2.10)$$

$$\phi_{i-1} \left[\frac{D^{(a)}}{\Delta X} - \frac{\Sigma_a^{(a)} \Delta X}{6} \right] + \phi_i \left[-\frac{D^{(a)} - D^{(b)}}{\Delta X} + \frac{-\Sigma_a^{(a)} - \Sigma_a^{(b)}}{3} \Delta X \right] + \phi_{i+1} \left[\frac{D^{(b)}}{\Delta X} - \frac{\Sigma_a^{(b)} \Delta X}{6} \right] + \frac{\Delta X}{2} (S^{(a)} + S^{(b)}) = 0, \quad (3.9)$$

onde os superscritos (a) e (b) representam os elementos adjacentes ao n \bar{o} i.

3.2. T cnica dos Res duos Ponderados

Multiplicando-se a equa o de difus o (3.1) pela fun o pondera o W (r) e integrando-a no dom nio Ω obt m-se a forma fraca:

$$-\int_{\Omega} W(\underline{r}) D(\underline{r}) \nabla^2 \phi(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} W(\underline{r}) \Sigma_a(\underline{r}) \phi(\underline{r}) d\Omega = \int_{\Omega} W(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega \quad (3.10)$$

Pela identidade de Green, e das condi es ϕ ou $\frac{\partial \phi}{\partial \eta}$ nulos no contorno tem-se:

$$\int_{\Omega} D(\underline{r}) \nabla \phi(\underline{r}) \nabla W(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega} W(\underline{r}) \Sigma_a(\underline{r}) d\Omega = \int_{\Omega} W(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega \quad (3.11)$$

Aproximando-se o fluxo de n etrons no elemento como:

$$\phi^e(\underline{r}) = \sum_i a_i \mu_i(\underline{r}) \quad e \quad (3.12)$$

$$W(\underline{r}) = \mu_j(\underline{r}), \quad (3.13)$$

obt m-se

$$\sum_i \phi_i \left\{ \int_{\Omega^e} D(\underline{r}) \nabla \mu_i(\underline{r}) \nabla \mu_j(\underline{r}) d\Omega + \int_{\Omega^e} \Sigma_a(\underline{r}) \mu_i(\underline{r}) \mu_j(\underline{r}) d\Omega \right\} = \int_{\Omega^e} \mu_j(\underline{r}) S(\underline{r}) d\Omega, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.14)$$

No caso bidimensional o fluxo de n etrons   aproximado como:

$$\phi(x, y) = \sum_{ij} \phi_{i,j} \mu_i(x) \mu_j(y),$$

onde

$$\mu_i(x) = \begin{cases} \mu_i^-(x) = \frac{X - X_{i-1}}{X_i - X_{i-1}} & , X_{i-1} \leq X \leq X_i \\ \mu_i^+(x) = \frac{X_{i+1} - X}{X_{i+1} - X_i} & , X_i \leq X \leq X_{i+1} \end{cases}$$

e

$$\mu_j(y) = \begin{cases} \mu_j^-(y) = \frac{Y - Y_{j-1}}{Y_j - Y_{j-1}} & , Y_{j-1} \leq Y \leq Y_j \\ \mu_j^+(y) = \frac{Y_{j+1} - Y}{Y_{j+1} - Y_j} & , Y_j \leq Y \leq Y_{j+1} \end{cases}$$

e procedendo-se como o descrito no ítem 2.2 pode-se obter um sistema de equações algébricas para os valores nodais $\phi_{i,j}$ {9}.

Os resultados numéricos foram obtidos através de um programa de computador em linguagem FORTRAN-IV, que além do fator de multiplicação, fornece a distribuição de fluxo e potência {9}. Foram processados alguns problemas testes que são apresentados a seguir de modo sumário.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1. Reator Tipo Placa

Para um reator tipo placa de duas zonas (combustível, refletor) {6}, os valores do K_{ef} da aproximação pela técnica variacional e resíduos ponderados são apresentados na tabela 4.1 e os valores do fluxo térmico na figura 4.1. O erro do K_{ef} é calculado em relação do resultado obtido pelo código CITATION {2} com largura de malha igual a $L/60$.

ΔX	Galerkin		Variacional	
	K_{ef}	Erro (%)	K_{ef}	Erro (%)
L/12	1.0215	0.066	1.0188	0.199
L/24	1.0211	0.026	1.0198	0.101
L/48	1.0209	0.009	1.0212	0.04

K_{ef} . referência = 1.02083

Tab. 4.1 - Valores do K_{ef} do problema 4.1

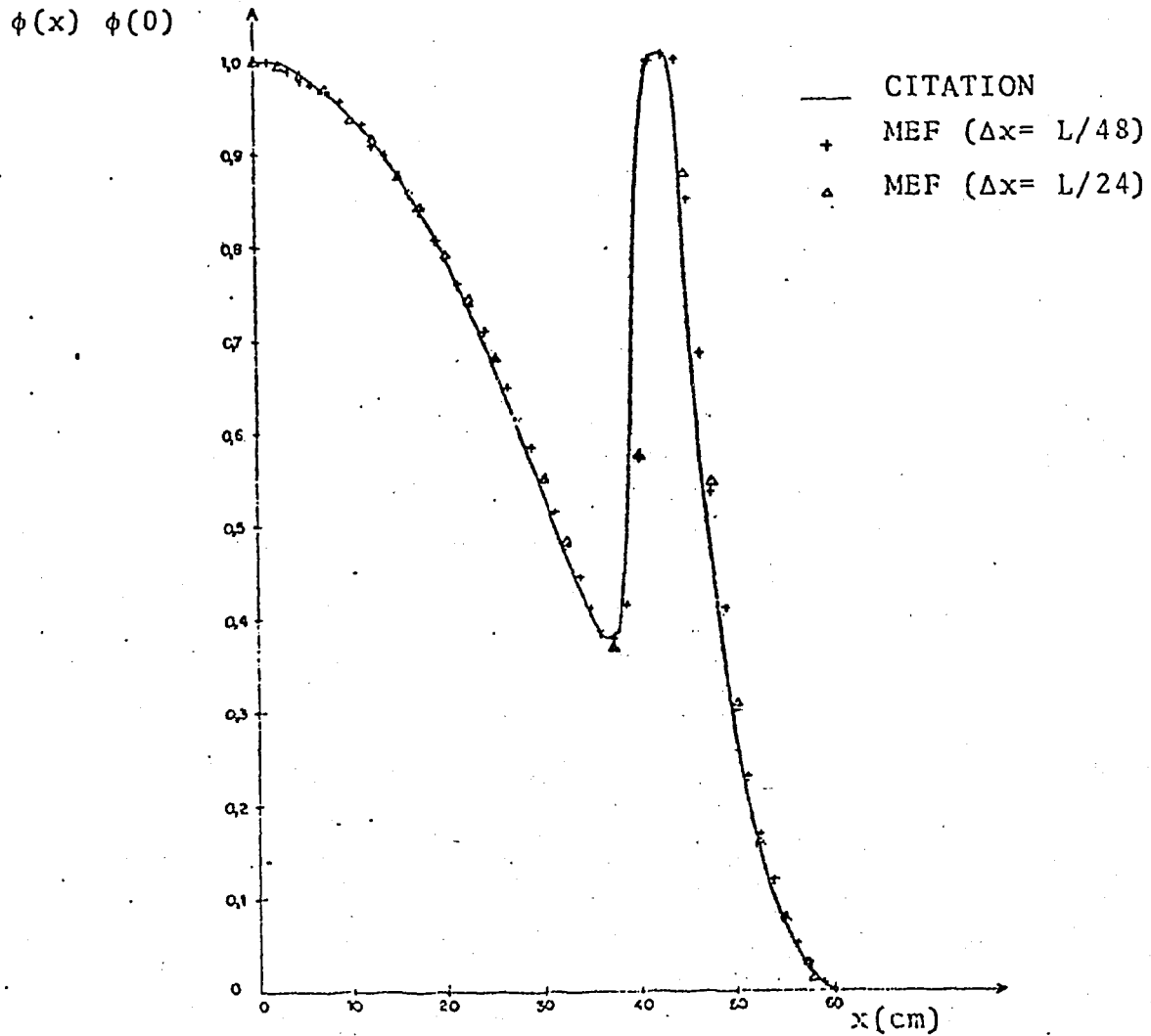


Fig. 4.1 - Fluxo térmico do problema 4.1.

4.2. Problemas teste em duas dimensões

A tab. 4.2 apresenta valores do K_{ef} para três problemas em duas dimensões e dois grupos de energia. Nos três casos o resultado referênciã é obtido pelo CITATION de diferenças finitas. O primeiro é um reator de duas zonas (caroço e refletor) {6} cuja geometria é mostrada na fig. 4.2.

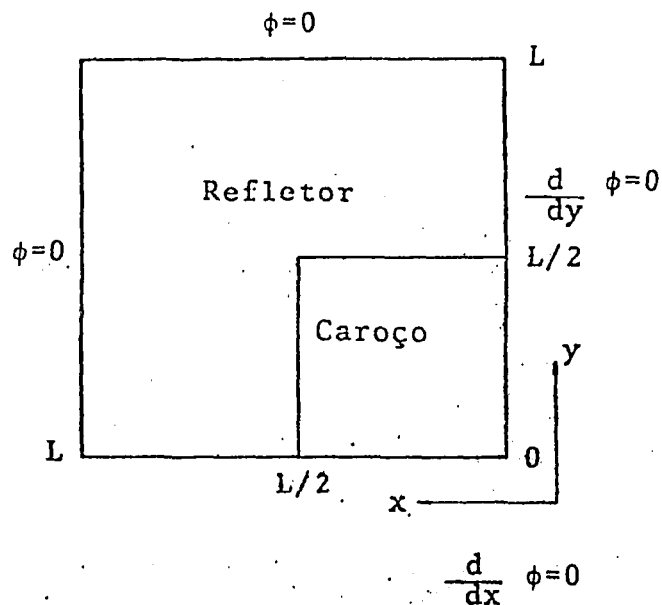


Fig. 4.2 - Geometria do 1º problema.

O resultado referência foi obtido com uma discretização de 40 x 40 pontos. A fig. 4.3 apresenta o comportamento do fluxo térmico para $y = 15$ cm.

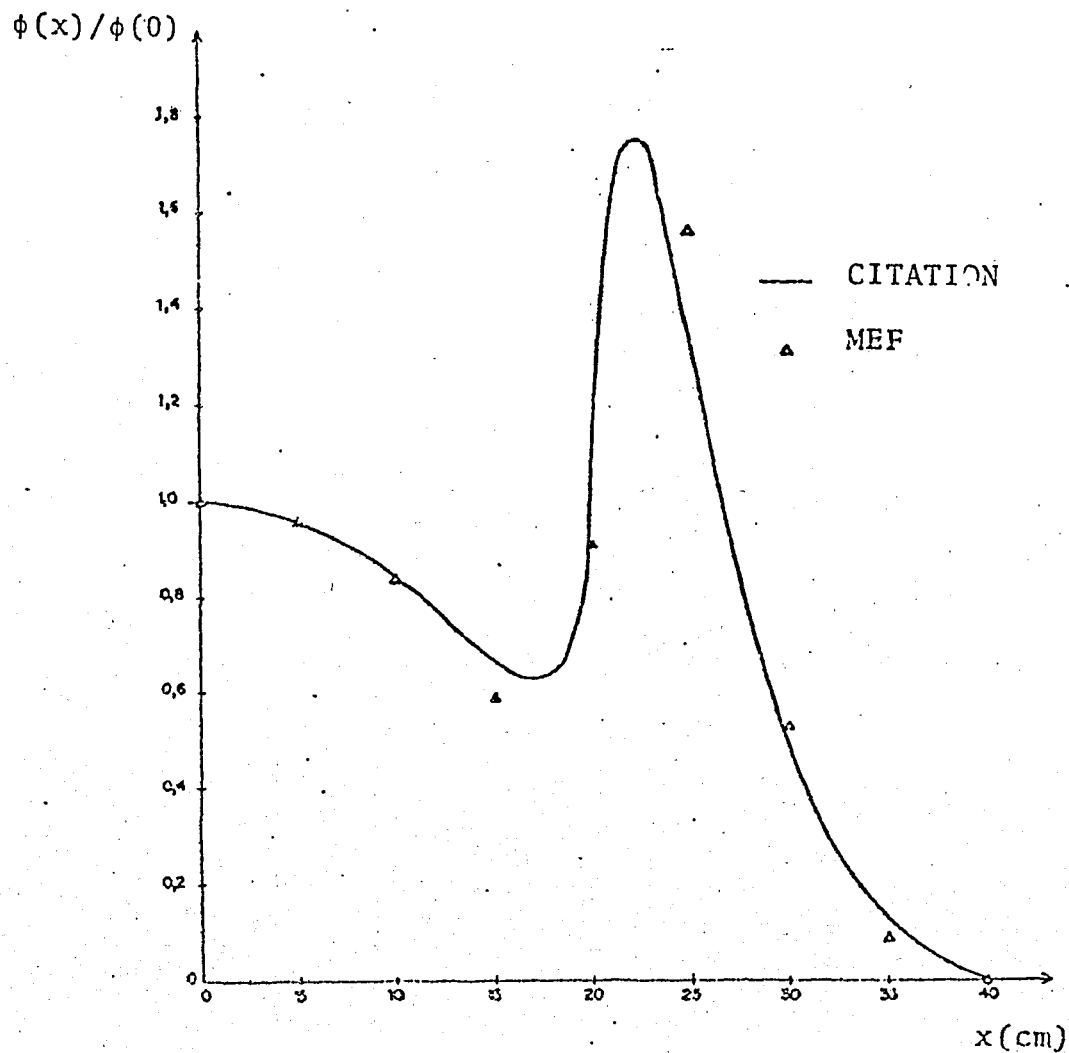


Fig. 4.3 - Fluxo térmico do 1º problema.

O segundo é o reator ZION-1 com 5 zonas diferentes (fig.4.4). O resultado para comparação é obtido com discretização de 80 x 80 pontos. A fig. 4.5 mostra a curva do fluxo térmico para $y = 78,485$ cm.

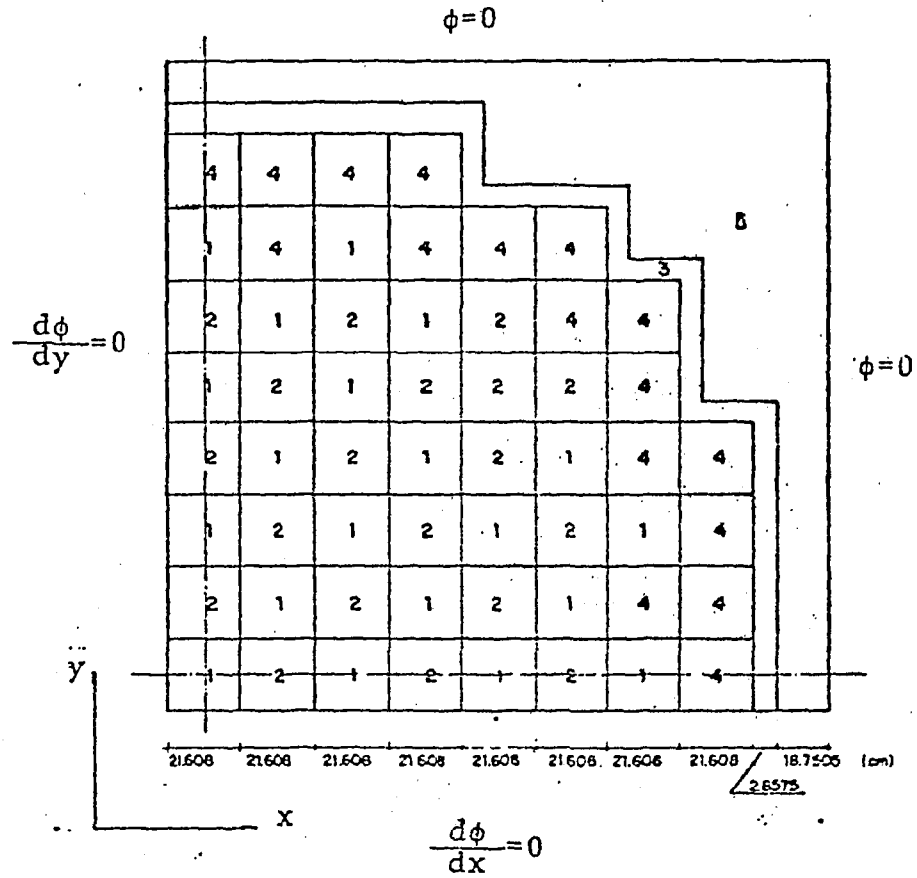
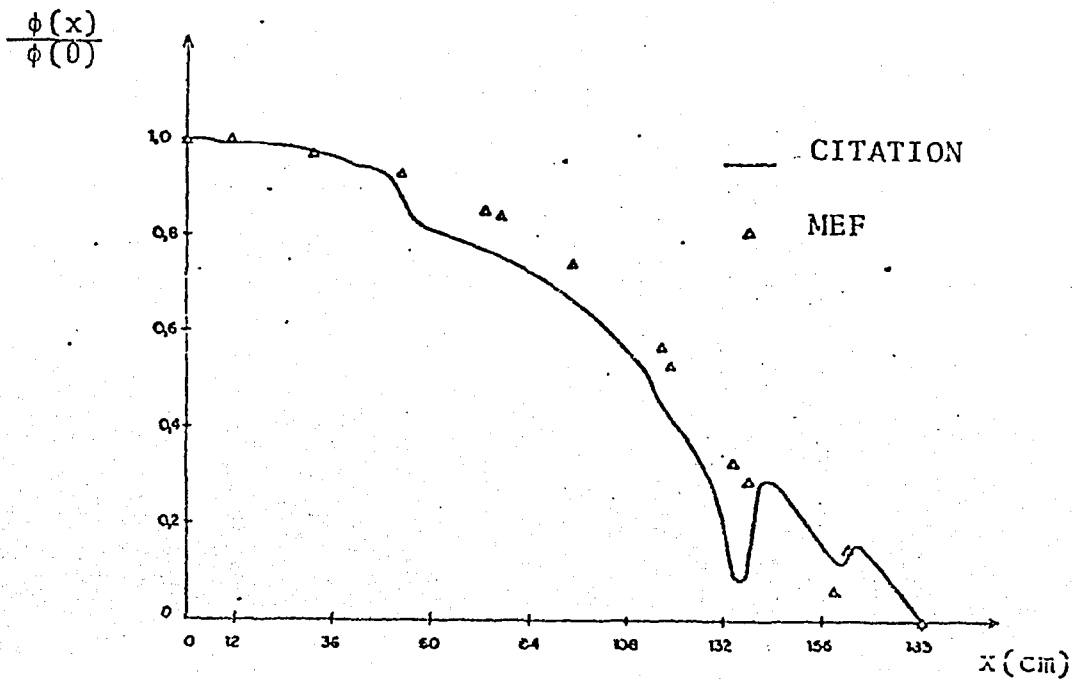


Fig. 4.4. Geometria do reator ZION-1.



O terceiro problema é o reator padrão 2D-IAEA de 4 zonas. A fig. 4.6 apresenta o núcleo do reator para a seção Z= 190 cm. A distribuição de fluxo térmico para y= 100,0cm é mostrado na fig. 4.7.

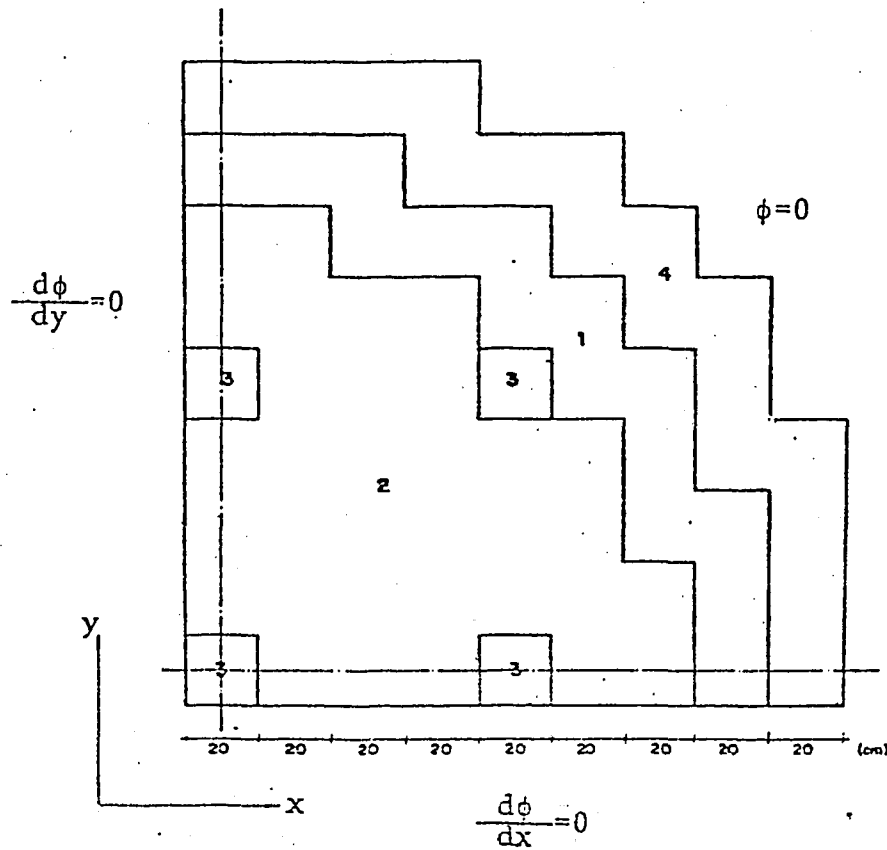


Fig. 4.6 - Geometria do reator 2D-IAEA

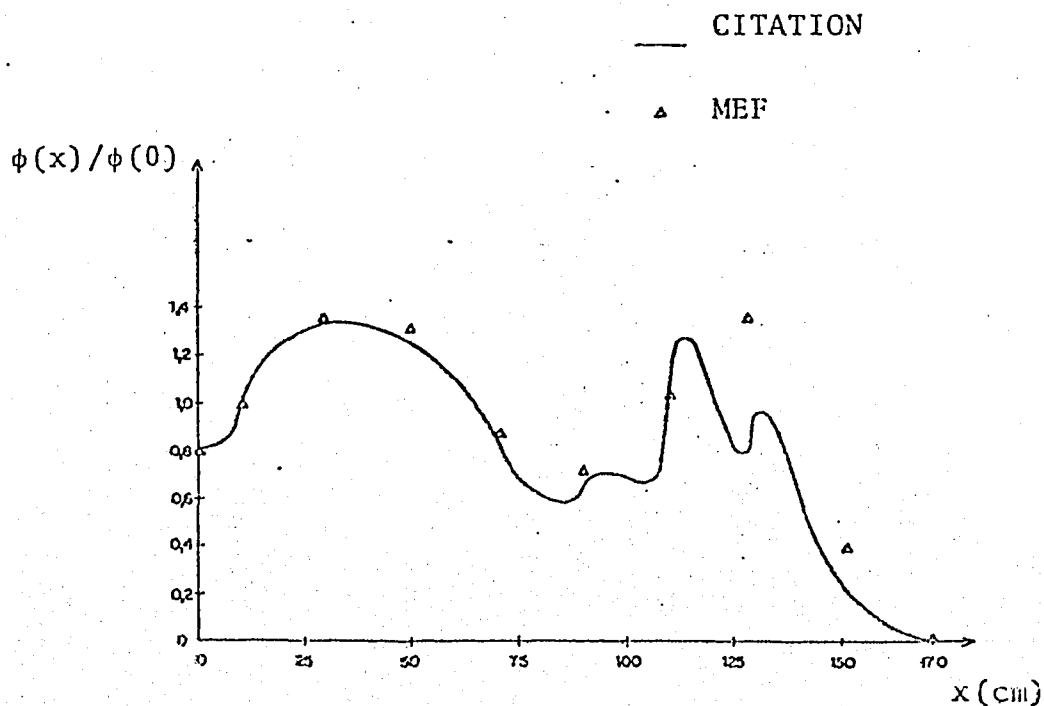


Fig. 4.7 - Fluxo térmico do 2D-IAEA.

Problema	Malha	MEF	Referencia	Erro relativo
1	6 x 6	0.89860	0.89679	0.202%
	8 x 8	0.89560		0.133%
2	13 x 13	1.27506	1.27514	0.0065%
3	9 x 9	1.05009	1.053999	1,556%
	13 x 13	1.03506		0.1026%

Tab. 4.2 - Valores do fator de multiplicação dos problemas em 2D.

5. CONCLUSÃO

Com relação ao autovalor K_{ef} os resultados foram satisfatórios em ambas as geometrias, obtendo-se boa precisão com malhas largas comparadas ao método das diferenças finitas. Entretanto para os parâmetros diferenciais não se obteve bons resultados para regiões que apresentam grandes heterogeneidades. Isto foi devido ao fato de ter-se utilizado funções de interpolação lineares que não conseguem descrever adequadamente regiões de grande variação no valor do fluxo. Isto poderá ser contornado com a utilização de funções de maior ordem, como funções quadráticas e cúbicas, e elementos triangulares que descrevem mais adequadamente regiões de grandes heterogeneidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BISWAS, D.; RAM, K.S.; RAO, S.S. Applications of 'natural coordinate system' in the finite element solution of multigroup neutron diffusion equation. Ann. Nucl. Energy, 3 : 465-69, 1976.
2. FOWLER, T.B.; VONDY, D.R.; CUNNINGHAM, M.G.W. Nuclear reactor core analysis code : CITATION. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Laboratory, 1971. (ORNL-TM-2496-Rev. 2).
3. FRANKE, H.P. Studies on the numerical solution of three-dimensional stationary diffusion equations using the

- finite element method. Stuttgart Univ., Germany F.R., Inst. fuer Kernenergetik, 1976. (IKE-4-53).
4. FRANKE, H.P. Three-dimensional reactor physics calculations with the finite element method. Atomkernenergie, 30 (2) : 88-94, 1977.
 5. HUEBNER, K.H. The finite element method for engineers. New York, Wiley - Interscience, 1975.
 6. KANG, C.M. & HANSEN, K.F. Finite element methods for reactor analysis. Nucl. Sci. Eng., 51 : 456-95, 1973.
 7. KANG, C.M. & HANSEN, K.F. Finite element methods for space time reactor analysis. Cambridge, Massachusetts Institute of Technology, 1971. (MIT-3903-5).
 8. NAKATA, H. The finite element response matrix method for coarse mesh reactor analysis. Michigan, 1981. (Ph D. thesis, University of Michigan).
 9. ONO, S. Aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de difusão em estado estacionário. São Paulo, IPEN, 1982. (Dissertação de Mestrado).
 10. SEMENZA, L.A.; LEWIS, E.E.; ROSSOW, E.C. The application of the finite element method to the multigroup neutron diffusion equation. Nucl. Sci. Eng. 47: 302-310, 1972.
 11. WILLIAM, S, M.M.R. & GODDARD, J.H.A. eds. Finite element methods in radiation physics: proceedings of an international seminar held at Imperial College of Science and Technology, London University 23-24 April 1981. In: Ann. Nucl. Energy, 8 (11/12): 539-722, 1981.
 12. ZIENKIEWICZ, O.C. The finite element method. London, McGraw-Hill, 1977.