

METODO VARIACIONAL DE LOS ELEMENTOS FINITOS.  
APLICACION A UN PROBLEMA DE DIFUSION

T. OTERO J. VILARDELL

Se trata la aplicación de un método variacional de elementos finitos (Raleigh-Ritz) a la resolución de la ecuación de la difusión de neutrones en un medio absorbente con fuente distribuida.

Se analizan con cierto detalle los problemas de establecimiento del funcional, generación de malla y almacenamiento de la matriz.

Se ofrecen los resultados obtenidos para algunos casos concretos de geometría rectangular y cilíndrica, y comparación de las distribuciones teóricas que se pretendían aproximar.

### 1. INTRODUCCION

La mayoría de problemas en ingeniería, física o matemática aplicada pueden ser clasificados como discretos o continuos. Un sistema discreto consiste en un número finito de elementos interconectados, mientras un continuo abarca un fenómeno sobre una región continua.

Los sistemas continuos y discretos pueden ser cada uno subdivididos en problemas de equilibrio, valor propio y propagación:

- Problemas de equilibrio, en los que el estado del sistema permanece constante con el tiempo.
- Problemas de valor propio; pueden considerarse como extensiones de problemas de equilibrio en los cuales además de la correspondiente configuración de estado constante, deben también ser determinados valores específicos o críticos de ciertos parámetros.
- Problemas de propagación, que incluyen transitorios y fenómenos de estado no constante en los que un estado subsiguiente del sistema se relaciona con el estado inicial conocido.

Los problemas de continuo se aproximan a menudo como problemas discretos. El método de los elementos finitos es una manera de cum-

- T. Otero i J. Vilardell del Laboratori de Càlcul. Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona. Avgda. Diagonal, 647. Barcelona - 28.
- Article rebut el Juny del 1979.

plir esta transformación y resolver el sistema de ecuaciones resultante.

### 2. DESCRIPCION DEL METODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

El concepto fundamental del método de los elementos finitos es que cualquier cantidad continua puede ser aproximada por un modelo discreto compuesto de una serie de funciones continuas segmentadas definidas sobre un número finito de subdominios.

Estas funciones continuas se definen usando los valores de las cantidades continuas en un número finito de puntos de este dominio.

La situación más común se produce cuando las cantidades continuas son desconocidas y queremos determinar los valores de estas cantidades en ciertos puntos dentro del dominio, llamados puntos nodales o nodos.

#### 2.1 Discretización del dominio: definición de los puntos nodales y de los elementos

La discretización del dominio implica las decisiones sobre el número, tamaño y forma de los elementos o subregiones usados. Puede dividirse en tres partes generales:

- La división del cuerpo en elementos.

- Definición de los puntos nodales.

- La numeración de los elementos y los nodos

Se debe hacer un balance entre elegir elementos bastante pequeños para dar resultados válidos o elementos bastante grandes para reducir el esfuerzo de computación.

El tamaño de los elementos es un parámetro crucial dentro del método E.F., pudiendo llegar a desvirtuarse totalmente los resultados obtenidos si no está dentro del margen adecuado.

2.2 Tipos de elementos e interpolación polinómica

La región será dividida en subregiones. Por otro lado la función continua en toda la región será aproximada dentro de cada elemento por un polinomio. Estos dos hechos guardan una relación que es básica en el método de los E.F.: el número de nodos que definen un elemento debe ser igual al número de térmi-

nos del polinomio de interpolación.

Un tipo de elemento vendrá especificado por su forma geométrica, el número de nodos que lo definen y el polinomio de interpolación asociado. Según este último concepto, los elementos pueden ser clasificados en simplex, complex y multiplex. La figura 1 expone algunos ejemplos de elementos en dos dimensiones. En los multiplex la frontera del elemento debe ser paralela a los ejes de coordenadas para asegurar la continuidad.

El paso siguiente será determinar los coeficientes  $\alpha_i$  del polinomio de interpolación. - Veámoslo con un ejemplo en el elemento simplex de la Fig. 1.

Partimos de

$$\phi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \tag{1}$$

Si  $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), (X_3, Y_3)$  son los puntos nodales que definen el elemento y llamamos  $\phi_1, \phi_2, \phi_3$  a los valores de  $\phi$  en los nodos, podemos establecer el sistema de ecuaciones

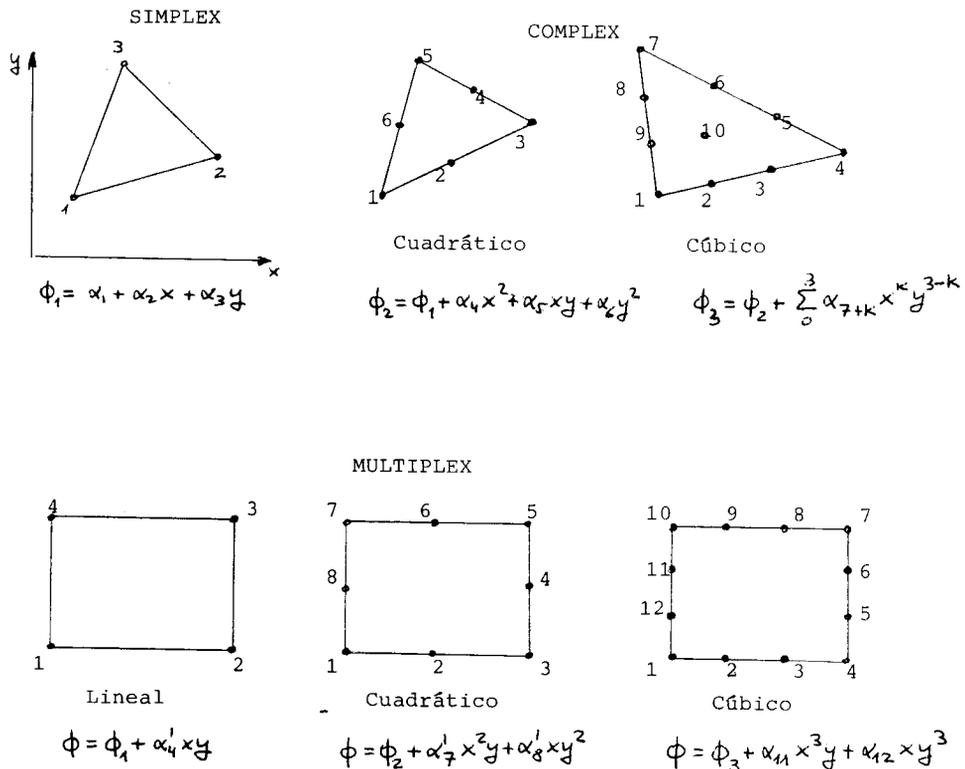


Fig. 1 Polinomios de interpolación para diversos elementos Bidimensionales

$$\left. \begin{aligned} \phi_1 &= \alpha_1 + \alpha_2 X_1 + \alpha_3 Y_1 \\ \phi_2 &= \alpha_1 + \alpha_2 X_2 + \alpha_3 Y_2 \\ \phi_3 &= \alpha_1 + \alpha_2 X_3 + \alpha_3 Y_3 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

del cual despejamos  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ . Sustituyendo estos valores en (1) obtendremos

$$\phi = N_1 \phi_1 + N_2 \phi_2 + N_3 \phi_3 \quad (3)$$

donde  $N_1, N_2, N_3$  son las llamadas funciones de forma que solo dependen de las coordenadas nodales y de las variables coordenadas. Podemos reestructurar (3) llamando

$$[N] = [N_1 \ N_2 \ N_3] \quad (4)$$

y,

$$\{\phi\} = \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{Bmatrix} \quad (5)$$

y nos quedará la expresión de la interpolación como

$$\phi = [N] \{\phi\} \quad (6)$$

### 2.3 Cálculo del funcional

Dos métodos alternativos de plantear un problema físico son:

- su descripción mediante ecuaciones diferenciales (ecuaciones de gobierno y condiciones de contorno)
- su planteamiento funcional.

El planteamiento funcional se basa en la minimización de una expresión integral, por ejemplo, la energía potencial en el caso de cálculo de estructuras /1/.

Si la expresión funcional de un problema es

$$F = \int_a^b f(y, y', x) dx \quad (7)$$

podemos obtener las ecuaciones de campo aplicando la ecuación de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0 \quad (8)$$

que será la condición a aplicar para comprobar si un funcional satisface o no una determinada ecuación diferencial.

### 2.4 Minimización del funcional

Al ser el funcional una expresión integral se cumple que

$$F = \sum_{e=1}^n F(e)$$

donde  $F(e)$  es el funcional elemental correspondiente al elemento  $e$ . Al usar la aproximación polinómica (6) correspondiente al elemento  $e$ , la expresión de  $F$  estará en función de las coordenadas nodales y de los valores nodales del elemento. Al realizar el sumatorio para todos los elementos el funcional  $F$  estará en función de las coordenadas nodales y de los valores nodales de todo el dominio de integración.

La minimización respecto a los valores nodales implica

$$\frac{\partial F}{\partial \{\phi\}} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F}{\partial \phi_1} = 0 \\ \text{-----} \\ \frac{\partial F}{\partial \phi_n} = 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

La resolución del sistema de ecuaciones (9) permitirá obtener los valores nodales  $\{\phi\}$ .

### 3. APLICACION A LA ECUACION DE LA DIFUSION

Se trata de resolver la ecuación de la difusión neutrónica para un solo grupo energético, régimen estacionario, empleando el método variacional de los elementos finitos. La ecuación diferencial es de la forma /3/, /4/

$$-D(r) \Delta \phi(r) + \Sigma_a(r) \phi(r) = S(r) \quad (10)$$

- $\phi$  flujo neutrónico
- $D$  coeficiente de difusión

$\Sigma_a$  sección eficaz máx. de absorción  
 S fuente de neutrones  
 r coordenadas geométricas

Como condición de contorno se debe cumplir:

- El flujo debe ser finito y positivo o nulo en todos los puntos del dominio.
- A través de una superficie que separe dos medios distintos en los que no exista una fuente de neutrones el flujo y la corriente han de ser continuas.
- En una interfase que separe un medio del vacío la corriente parcial que circule -- del vacío al medio ha de ser nula.

Los parámetros de la ecuación (10) D,  $\Sigma$ , S - se han considerado constantes dentro de un mismo elemento, aunque pudiendo variar de un elemento a otro.

### 3.1 Expresión del funcional empleado

1) Geometría rectangular: En el caso más general de tres dimensiones el funcional es

$$F = \int_v \left[ \frac{D}{2} \left[ \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \Sigma_a \phi^2 - S\phi \right] dv \quad (11)$$

La condición análoga a (8) para tres dimensiones es

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial \phi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial \phi_y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial f}{\partial \phi_z} \right) = 0 \quad (12)$$

De cuya aplicación resulta

$$-D \left[ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right] + \Sigma_a \phi = S \quad (13)$$

que es la ecuación de la difusión en tres dimensiones.

2) Geometría cilíndrica: El funcional es

$$F = \int_v \left[ \frac{D}{2} \left[ r \left( \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)^2 + r \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] + \frac{\Sigma_a}{2} r \phi^2 - S\phi \right] dv \quad (14)$$

Si siguiendo un proceso análogo al anterior se llega a

$$-D \left[ \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right] + \Sigma_a \phi = S \quad (15)$$

ecuación de la difusión en coordenadas cilíndricas.

### 3.2 Notación matricial

Suponiendo que existieran diferentes coeficientes de difusión para cada dirección x, y, z el funcional (11) podría expresarse para un caso más general por

$$F = \int_v \left[ \frac{1}{2} \left[ D_{xx} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + D_{yy} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 + D_{zz} \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] + \Sigma_a \phi^2 - 2S\phi \right] dv \quad (16)$$

Definiendo las matrices /1/, /2/

$$\{g\}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} & \frac{\partial \phi}{\partial y} & \frac{\partial \phi}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$[D] = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (18)$$

podemos reescribir el funcional como

$$F = \int_v \left[ \frac{1}{2} \{g\}^T [D] \{g\} + \Sigma_a \phi^2 - 2S\phi \right] dv \quad (19)$$

y para el elemento (e)

$$F^{(e)} = \int_{v(e)} \left[ \frac{1}{2} \{g^{(e)}\}^T [D^{(e)}] \{g^{(e)}\} + \Sigma_a^{(e)} \phi^2 - 2S^{(e)} \phi \right] dv \quad (20)$$

verificándose

$$F = \sum_{e=1}^n F^{(e)} \quad (21)$$

Utilizando entonces la aproximación dentro del elemento

$$\phi^{(e)} = [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} \quad (22)$$

donde  $N^{(e)}$  son funciones de las coordenadas geométricas y  $\phi^{(e)}$  son valores nodales de la función incógnita (constantes respecto a las coordenadas)

$$\frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial x} = \left[ \frac{\partial}{\partial x} N^{(e)} \right] \{ \phi^{(e)} \} \quad (23)$$

Si suponemos un elemento con p nodos, tendremos

$$\begin{aligned} \{ \sigma^{(e)} \} &= \begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial N^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N^{(e)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^{(e)}}{\partial z} \end{Bmatrix} \{ \phi^{(e)} \} = \\ &= \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_p^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_p^{(e)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial z} & \dots & \frac{\partial N_p^{(e)}}{\partial z} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(e)} \\ \vdots \\ \phi_p^{(e)} \end{Bmatrix} = \\ &= [B^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} \end{aligned}$$

Sustituyendo la nueva expresión de  $\{ \sigma^{(e)} \}$  en (20)

$$\begin{aligned} F^{(e)} &= \int_{V^{(e)}} \frac{1}{2} \left[ \{ \phi^{(e)} \}^T [B^{(e)}]^T [D^{(e)}] [B^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} + \{ \phi^{(e)} \}^T [N^{(e)}]^T \Sigma_a [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} - 2S [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} \right] dv \quad (24) \end{aligned}$$

### 3.3 Expresión del funcional elemental minimizado

Reconsiderando la minimización del funcional

tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \{ \phi \}} &= \frac{\partial}{\partial \{ \phi \}} \sum_{e=1}^n F^{(e)} = \sum_{e=1}^n \frac{\partial}{\partial \{ \phi \}} F^{(e)} = \\ &= \sum_{e=1}^n \frac{\partial}{\partial \{ \phi^{(e)} \}} F^{(e)} \quad (25) \end{aligned}$$

Consideremos la derivación de cada término en (24)

$$\begin{aligned} * \frac{\partial}{\partial \{ \phi^{(e)} \}} \int_{V^{(e)}} \frac{1}{2} \{ \phi^{(e)} \}^T [B^{(e)}]^T [D^{(e)}] [B^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv &= \int_{V^{(e)}} [B^{(e)}]^T [D^{(e)}] [B^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv \\ &= \int_{V^{(e)}} [B^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv \quad (26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} * \frac{\partial}{\partial \{ \phi^{(e)} \}} \int_{V^{(e)}} \frac{1}{2} \{ \phi^{(e)} \}^T [N^{(e)}]^T \Sigma_a [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv &= \int_{V^{(e)}} [N^{(e)}]^T \Sigma_a [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv \\ &= \int_{V^{(e)}} S [N^{(e)}]^T \{ \phi^{(e)} \} dv \quad (27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} * \frac{\partial}{\partial \{ \phi^{(e)} \}} \int_{V^{(e)}} S [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} dv &= \int_{V^{(e)}} S [N^{(e)}]^T \{ \phi^{(e)} \} dv \quad (28) \end{aligned}$$

Imponiendo la minimización para cada elemento

$$\frac{\partial}{\partial \{ \phi^{(e)} \}} F^{(e)} = 0 \quad \forall e \quad (29)$$

queda, reagrupando sacando de la integral los términos constantes, y suponiendo

$$D_{xx} = D_{yy} = D_{zz} = D$$

$$\begin{aligned} \left\{ D \int_{V^{(e)}} [B^{(e)}]^T [B^{(e)}] dv + \Sigma_a \int_{V^{(e)}} [N^{(e)}]^T [N^{(e)}] dv \right\} \{ \phi^{(e)} \} &= S \int_{V^{(e)}} [N^{(e)}]^T \{ \phi^{(e)} \} dv \quad (30) \end{aligned}$$

que podemos representar por

$$[K^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} = \{ F^{(e)} \} \quad (31)$$

siendo el sistema global para toda la región,

$$[K] \{ \phi \} = \{ F \} \quad (32)$$

con

$$\left. \begin{aligned} [K] &= \sum_{e=1}^n [K^{(e)}] \\ \{ \phi \} &= \sum_{e=1}^n \{ \phi^{(e)} \} \\ \{ F \} &= \sum_{e=1}^n \{ F^{(e)} \} \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

donde se suele llamar a  $[K]$  la matriz de rigidez y a  $\{ F \}$  el vector fuerza, por analogía con el cálculo de estructuras.

### 3.4 Ejemplo ilustrativo

Supongamos la difusión de neutrones en una losa doblemente infinita de parámetros  $D$ ,  $\Sigma$ ,  $S$ . El problema está regido por la ecuación de campo monodimensional

$$-D \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \Sigma \phi(x) = S \quad (34)$$

Por simetría estudiaremos sólo la mitad de la región.

Tomamos el elemento simplex monodimensional

$$\phi^{(e)} = \alpha_1 + \alpha_2 x \quad (35)$$

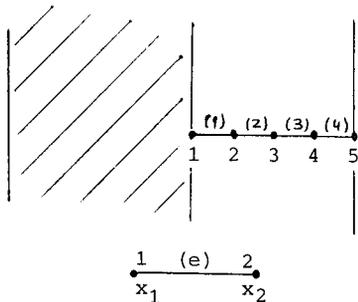


Figura 2.- Elementos monodimensionales

Imponiendo

$$\left. \begin{aligned} \phi_1 &= \alpha_1 + \alpha_2 x_1 \\ \phi_2 &= \alpha_1 + \alpha_2 x_2 \end{aligned} \right\} \alpha_1 = \frac{\phi_1 x_2 - \phi_2 x_1}{x_2 - x_1} \quad \left. \begin{aligned} \alpha_2 &= \frac{\phi_2 - \phi_1}{x_2 - x_1} \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Y sustituyendo (36) en (35) obtenemos las funciones en forma

$$\phi^{(e)} = [N^{(e)}] \{ \phi^{(e)} \} \quad (37)$$

con

$$\left. \begin{aligned} [N^{(e)}] &= [N_1^{(e)} \quad N_2^{(e)}] = \left[ \left[ \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} \right] \left[ \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \right] \right] \\ \{ \phi^{(e)} \} &= \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{Bmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

El planteamiento funcional equivalente a (34) sería el expresado por (24) siendo

$$\left. \begin{aligned} [D^{(e)}] &= D \\ [B^{(e)}] &= \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ x_2 - x_1 & x_2 - x_1 \end{bmatrix} \\ dv &= dx, \text{ considerando una unidad de superficie } \perp \text{ a } x \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

Efectuando las integraciones adecuadas se obtienen las expresiones de,

$$\left. \begin{aligned} [K^{(e)}] &= \left[ \frac{D}{x_2 - x_1} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\Sigma(x_2 - x_1)}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \right] \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

$$\{ F^{(e)} \} = \frac{S(x_2 - x_1)}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (41)$$

Vemos que las expresiones sólo dependen de

$$L^{(e)} = x_2 - x_1,$$

la longitud del elemento, y que las matrices elementales son simétricas.

Para el primer elemento tendríamos

$$\left. \begin{aligned}
 [K^{(1)}] &= \begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{11}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 \{F^{(1)}\} &= \begin{bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \right\} (42)$$

$$\left. \begin{aligned}
 [K] &= \begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)}+k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)}+k_{11}^{(3)} & k_{12}^{(3)} & 0 \\ 0 & 0 & k_{21}^{(3)} & k_{22}^{(3)}+k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(4)} \\ 0 & 0 & 0 & k_{21}^{(4)} & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix} \\
 \{F\} &= \begin{bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)}+f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)}+f_1^{(3)} \\ f_2^{(3)}+f_1^{(4)} \\ f_2^{(4)} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \right\} (44)$$

puesto que los nodos 3, 4, 5 no intervienen en el sistema de ecuaciones elemental del primer elemento.

Para el segundo elemento obtendríamos

$$\left. \begin{aligned}
 [K^{(2)}] &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 \{F^{(2)}\} &= \begin{bmatrix} 0 \\ f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \right\} (43)$$

El sistema global obtenido sumando las matrices elementales sería

#### 4. CARACTERES DE LA SOLUCION DIGITAL

##### 4.1 Datos de entrada: parámetros y malla

Para el caso de ser parámetros constantes sobre toda la región se leerán una sola vez al principio del programa.

En caso de ser variables, cada vez que se calcula un elemento se efectúa una llamada a un subprograma, con lo que el cambio de una función de variación de los parámetros a otra se reduce a rediseñar dicho subprograma.

La malla elemental es el resultado del proceso de discretización del dominio de aplicación de la ecuación diferencial. Está definida por tres características: número de elementos, número de nodos, anchura de la semibanda.

Para cada elemento se dispondrá de la información siguiente:

- número del elemento
- nodos globales que lo forman (ordenados)
- coordenadas de éstos

El único concepto que merece especial aten--

ción es el de la anchura de semibanda. Como puede apreciarse en el ejemplo expuesto, la matriz global resultante  $K$  es una matriz - banda (elementos no nulos cerca de la diagonal). Como la matriz será además simétrica - la información significativa está comprendida entre la diagonal principal y una paralela a ella que contenga el elemento no nulo - más alejado. La distancia entre la diagonal y esta paralela es la anchura de la semibanda.

$$\begin{matrix} \updownarrow \\ \left[ \begin{array}{cccccc} x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & x & 0 & x & 0 & 0 \\ x & x & x & x & 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & x & x & 0 & 0 & x \\ 0 & x & 0 & 0 & x & 0 & x \\ 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x & x & x \end{array} \right] \end{matrix}$$

La numeración de los nodos globales es arbitraria: pero de ella depende la anchura de - la semibanda. En el ejemplo con una numeración 12345 obtuvimos en (44) una matriz de - semibanda 2. Si la numeración fuera 14325, - obtendríamos para el primer elemento (nodos 1 y 4):

$$[K^{(1)}] = \begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & 0 & 0 & k_{12}^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{21}^{(1)} & 0 & 0 & k_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (45)$$

y la matriz global sería

$$[K] = \begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & 0 & 0 & k_{11}^{(1)} & 0 \\ 0 & k_{22}^{(3)} + k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(3)} & 0 & k_{12}^{(4)} \\ 0 & k_{21}^{(3)} & k_{22}^{(2)} + k_{11}^{(3)} & k_{12}^{(2)} & 0 \\ k_{21}^{(1)} & 0 & k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(1)} + k_{11}^{(2)} & 0 \\ 0 & k_{21}^{(4)} & 0 & 0 & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix} \quad (46)$$

con una semibanda igual a 4.

Obsérvese (45) que la anchura de semibanda - siempre será igual a la mayor diferencia entre los números de dos nodos pertenecientes a un mismo elemento más una unidad. Es por - tanto una característica intrínseca a la ma - lla.

Para problemas bi y tridimensionales el problema de generar los datos de la malla empieza a tener una envergadura tal, que es impracticable su resolución manual. Para ello se dispuso de sendos subprogramas que generaran los elementos simplex de dos y tres dimensiones: triángulos y tetraedros con nodos sólo en los vértices.

#### 4.2 Generación de mallas

La generación de malla bidimensional se basa en definir regiones por elementos multiplex cuadráticos (8 nodos). Pueden especificarse varias regiones interconectadas. Cada región se divide en una malla de cuadriláteros especificando un número de filas y de columnas - (3 y 5 respectivamente en el caso de la fig. 3). Con ello se generan una serie de nodos - intermedios. Después cada cuadrilátero se divide en triángulos por la diagonal más corta.

Para la malla tridimensional se parte de elementos simplex bidimensionales (triángulos) y se generan los tridimensionales (tetraedros). Los elementos de la malla bidimensional se - generan de manera que sus nudos estén ordenados en sentido contrareloj. Se consideran en - tonces  $n$  planos paralelos  $P_1 \dots P_n$  separados entre sí por distancias  $h_1, \dots, h_n$  y en ellos triangularizaciones homólogas a la del plano base  $P_0$  de manera que dos triángulos homólogos en dos planos consecutivos definan un --

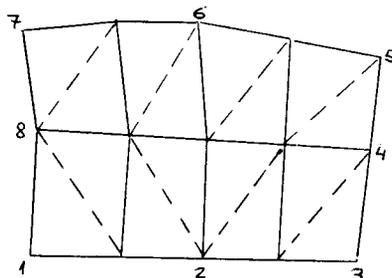


Figura 3.- Generación de los elementos bidimensionales.



El proceso no es ahora una suma de matrices sino un ensamblaje cuya clase está en la numeración de los nodos. A cada casilla de la matriz global se le irán sumando las contribuciones de cada elemento. Para el caso simplex monodimensional un nodo puede pertenecer como máximo a dos elementos; en el caso bidimensional, obteniendo triángulos a base de dividir por la diagonal más corta (ver -- fig. 3) una malla de cuadriláteros, un nodo pertenece como máximo a seis elementos (aunque siguiendo otro método podrían ser teóricamente infinitos).

Hemos visto que la matriz generada por el método de elementos finitos es una matriz banda simétrica, cuya anchura de semibanda puede ser reducida optimizando la numeración de los nodos globales.

El número de elementos potencialmente no nulos puede saberse una vez generada la malla y antes de empezar a calcular y ensamblar -- las matrices elementales. Es evidente que será suficiente una matriz rectangular de número nodos X anchura de semibanda para almacenar toda la información significativa que -- tenga K. Para el ejemplo anterior quedaría el caso de la fig. 6.

Aunque quedarán algunas posiciones no utilizadas, la matriz rectangular es una aproximación a la optimización del almacenamiento de una matriz banda. En 16 KB podríamos almacenar un sistema de 200 nudos con una anchura de semibanda igual a 20 (utilizando números reales de precisión sencilla).

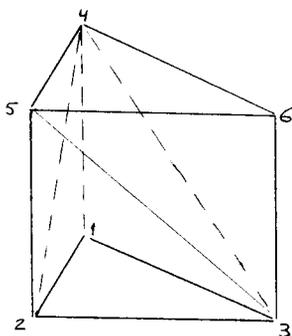


Figura 5.- Ordenacion de los nodos

#### 4.4 Forma de resolución del sistema de ecuaciones global

Se emplea el método de eliminación de Gauss, con la posibilidad de modificar el sistema -- si se conoce el valor de la función incógnita en algún nodo, o añadiendo valores puntuales al vector fuerza (serían fuentes nodales).

La ventaja fundamental del método de eliminación de Gauss es que las transformaciones -- que necesita no hacen variar las necesidades de almacenamiento de la matriz global. Estas transformaciones pasan de

$$[K]\{\phi\} = \{F\}$$

a

$$[\bar{K}_T]\{\phi\} = \{F_T\}$$

donde  $[\bar{K}_T]$  es una matriz triangular superior y  $\{F_T\}$  es un vector consistente con las transformaciones realizadas en  $[K]$  para triangularla. Podemos asegurar que  $[\bar{K}_T]$  no necesita más capacidad de almacenamiento que  $[K]$  -- debido a las siguientes propiedades:

- 1) En las transformaciones sucesivas hasta -- llegar a la matriz triangular se conserva la simetría.
- 2) Los valores nulos permanecen nulos en cada transformación.

Por todo lo dicho, el algoritmo general del proceso será:

SI es preciso ENTONCES generar los elementos de la malla. Leer número de elementos, número de nudos global y anchura de semibanda de la matriz.

SI son constantes para todos los elementos, ENTONCES leer parámetros D,  $\Sigma$ , S.

$k_{11}^{(1)}$	$k_{22}^{(1)} + k_{11}^{(2)}$	$k_{22}^{(2)} + k_{11}^{(3)}$	$k_{22}^{(3)} + k_{11}^{(4)}$	$k_{22}^{(4)}$
$k_{12}^{(1)}$	$k_{12}^{(2)}$	$k_{12}^{(3)}$	$k_{12}^{(4)}$	X

Figura 6.- Almacenamiento de la matriz banda.

HACER PARA cada elemento

INICIO

Leer los nodos que lo componen, y sus coordenadas.

SI varían de un elemento a otro ENTONCES leer parámetros  $D$ ,  $\Sigma$ ,  $S$ .

Calcular la matriz  $[K^{(e)}]$  y el vector  $\{F^{(e)}\}$

Insertar  $[K^{(e)}]$  a  $[K]$  y  $\{F^{(e)}\}$  a  $\{F\}$

FIN

Leer condiciones de contorno: valores conocidos de  $\{\phi\}$  y de  $\{F\}$ .

Resolver el sistema  $[K]\{\phi\} = \{F\}$ .

Escribir los resultados  $\{\phi\}$ .

## 5. HIPOTESIS Y RESULTADOS OBTENIDOS

### 5.1 Hipótesis simplicativas

Los elementos utilizados han sido simplex. - Las condiciones de contorno en este caso no pueden exigirse tal como se expusieron en la definición del problema (párrafo 3). La condición b) de continuidad del flujo está garantizada por el método de elementos finitos, mientras que la continuidad de la corriente (proporcional a la primera derivada del flujo) se debería imponer. En concreto, con elementos simplex esto no es posible, puesto -- que imponer la continuidad de la derivada implicaría que la pendiente de los segmentos de recta que aproximan la función fuera para todos ellos la misma.

La condición c) se sustituye por una aproximación consistente en suponer que el flujo se anula en una superficie exterior extrapolada que está a una distancia  $\delta$  de la real, siendo  $\delta$  del orden de magnitud de  $D$ . Esta -- condición no influye en el funcional y es -- más cómoda de aplicar. Para regiones donde -- las dimensiones sean mucho mayores que  $D$  la aproximación da buenos resultados.

### 5.2 Casos analizados

Se examinaron las geometrías rectangular y - cilíndrica en los casos mono, bi y tridimensional, con posibilidad de escoger entre parámetros constantes o variables.

Algunos de los resultados quedan recogidos - en las tablas 1 ÷ 5. Como puede observarse - se obtienen aproximaciones bastante aceptables, aún con elementos simplex y pocos nodos, en los casos monodimensionales. En el - caso bidimensional debe reducirse la distancia entre nodos para obtener resultados de - parecida precisión. Lo mismo debería hacerse al pasar del caso bidimensional al tridimensional. De lo contrario nos encontraremos en la situación de la tabla 5, con valores menos precisos y unas típicas oscilaciones alrededor del origen de coordenadas. El origen de estas oscilaciones es, normalmente, el tamaño excesivamente grande de los elementos, el cambio brusco en el tamaño de dos elementos contiguos, o el tamaño excesivamente pequeño de los mismos, que influye en la validez de la ecuación diferencial aplicada (según los parámetros). Por último, no debe olvidarse el peligro de errores en los datos - de entrada, difícilmente detectables, que a menudo producen oscilaciones locales de origen inexplicable.

Como indica la figura 7 las simetrías permiten simplificar el estudio a un número reducido de nodos.

Los valores teóricos de las tablas 1 y 2 están obtenidos aplicando las fórmulas que, para estos casos, pueden deducirse analíticamente /3/. En los casos de las tablas 3, 4, 5, con la fuente variable, se han aproximado para su comparación los resultados a los teóricos para fuente multiplicativa, que en el caso más general de tres dimensiones establecen

$$\phi = \phi \cos \frac{\pi X}{2a} \cos \frac{\pi Y}{2b} \cos \frac{\pi Z}{2c} \quad (48)$$

siendo  $a$ ,  $b$ ,  $c$  las dimensiones de un paralelepípedo recto cuyo centro coincide con el origen del sistema de coordenadas, y el valor en el origen a determinar en general a partir de la potencia extraída. En la deducción de (10) se supone una fuente multiplicativa que cumple

$$S(\vec{r}) = K \phi(\vec{r}) \quad (49)$$

La aproximación por elementos finitos consistió en sustituir el resultado (48) en (49),

Tabla 1.- Geometría rectangular, fuente constante, funcional monodimensional.

\*\*\*\*\*  
 \* FLUJOS NODALES \*  
 \*\*\*\*\*

NODO	COORD	CASO 1	
		FLUJO	FLUJO TEOR
FUENTE S=1.0			
1	.00	99.995	99.991
2	5.00	99.992	99.990
3	10.00	99.975	99.960
4	15.00	99.919	99.878
5	20.00	99.734	99.627
6	25.00	99.129	98.858
7	30.00	97.149	96.506
8	35.00	90.668	89.312
9	40.00	69.451	67.308
10	45.00	.000	0.0

Tabla 2.- Geometría cilíndrica, fuente constante, funcional monodimensional.

\*\*\*\*\*  
 \* FLUJOS NODALES \*  
 \*\*\*\*\*

NODO	COORD	CASO 1	
		FLUJO	FLUJO TEOR
FUENTE S=1.0			
1	.00	99.985	99.987
2	5.00	99.979	99.983
3	10.00	99.962	99.965
4	15.00	99.916	99.916
5	20.00	99.795	99.781
6	25.00	99.464	99.408
7	30.00	98.541	98.389
8	35.00	95.913	95.438
9	40.00	88.315	86.946
10	45.00	66.033	62.355
11	50.00	.000	-9.242

Tabla 3.- Geometría rectangular, fuente variable, funcional monodimensional.

\*\*\*\*\*  
 \* FLUJOS NODALES \*  
 \*\*\*\*\*

NODO	COORD	CASO 1	
		FLUJO	FLUJO TEOR
1	.00	98.161	98.161
2	5.00	96.952	96.952
3	10.00	93.357	93.357
4	15.00	87.472	87.462
5	20.00	79.414	79.414
6	25.00	69.410	69.410
7	30.00	57.698	57.698
8	35.00	44.564	44.564
9	40.00	30.334	30.334
10	45.00	15.356	15.356
11	50.00	.000	0.0

ELEM	D	SIGMA	S
1	2.000E-01	1.000E-02	9.969E-01
2	2.000E-01	1.000E-02	9.724E-01
3	2.000E-01	1.000E-02	9.239E-01
4	2.000E-01	1.000E-02	8.526E-01
5	2.000E-01	1.000E-02	7.604E-01
6	2.000E-01	1.000E-02	6.494E-01
7	2.000E-01	1.000E-02	5.225E-01
8	2.000E-01	1.000E-02	3.827E-01
9	2.000E-01	1.000E-02	2.334E-01
10	2.000E-01	1.000E-02	7.846E-02

Tabla 4.- Geometria rectangular, fuente variable, funcional bidimensional.

NODO	COORDENADA X	COORDENADA Y	FLUJO	FLUJO TEOR.
1	15.00	15.00	.000	0.0
2	12.00	15.00	.000	0.0
3	9.00	15.00	.000	0.0
4	6.00	15.00	.000	0.0
5	3.00	15.00	.000	0.0
6	.00	15.00	.000	0.0
7	12.00	12.00	6.636	6.750
8	9.00	12.00	12.518	12.840
9	6.00	12.00	17.340	17.673
10	3.00	12.00	20.275	20.776
11	.00	12.00	20.949	21.845
12	9.00	9.00	24.003	24.423
13	6.00	9.00	33.012	33.616
14	3.00	9.00	38.691	39.518
15	.00	9.00	40.315	41.552
16	6.00	6.00	45.458	46.269
17	3.00	6.00	53.399	54.392
18	.00	6.00	55.920	57.191
19	3.00	3.00	62.917	63.942
20	.00	3.00	66.246	67.232
21	.00	.00	70.692	70.692

ELEM	D	SIGMA	S
1	2.000E-01	1.000E-02	2.173E-02
2	2.000E-01	1.000E-02	8.457E-02
3	2.000E-01	1.000E-02	5.227E-02
4	2.000E-01	1.000E-02	1.391E-01
5	2.000E-01	1.000E-02	7.768E-02
6	2.000E-01	1.000E-02	1.801E-01
7	2.000E-01	1.000E-02	9.549E-02
8	2.000E-01	1.000E-02	2.034E-01
9	2.000E-01	1.000E-02	1.040E-01
10	2.000E-01	1.000E-02	2.034E-01
11	2.000E-01	1.000E-02	3.346E-01
12	2.000E-01	1.000E-02	3.023E-01
13	2.000E-01	1.000E-02	4.330E-01
14	2.000E-01	1.000E-02	3.716E-01
15	2.000E-01	1.000E-02	4.891E-01
16	2.000E-01	1.000E-02	4.045E-01
17	2.000E-01	1.000E-02	4.973E-01
18	2.000E-01	1.000E-02	6.436E-01
19	2.000E-01	1.000E-02	6.113E-01
20	2.000E-01	1.000E-02	7.269E-01
21	2.000E-01	1.000E-02	6.655E-01
22	2.000E-01	1.000E-02	7.912E-01
23	2.000E-01	1.000E-02	8.963E-01
24	2.000E-01	1.000E-02	8.613E-01
25	2.000E-01	1.000E-02	9.728E-01

Tabla 5.- Primeros cincuenta nodos. Geometria rectangular, fuente variable, funcional tridimensional.

NODO	COORD X	COORD Y	COORD Z	FLUJO	FLUJO TEOR.
1	15.00	15.00	3.00	.000	
2	12.00	15.00	.00	.000	
3	9.00	15.00	.00	.000	
4	6.00	15.00	.00	.000	
5	3.00	15.00	.00	.000	
6	.00	15.00	.00	.000	
7	12.00	12.00	.00	11.159	8.874
8	9.00	12.00	.00	20.145	16.880
9	6.00	12.00	.00	27.052	23.234
10	3.00	12.00	.00	31.509	27.313
11	.00	12.00	.00	33.783	28.718
12	9.00	9.00	.00	39.835	32.108
13	6.00	9.00	.00	52.446	44.193
14	3.00	9.00	.00	59.922	51.952
15	.00	9.00	.00	61.527	61.527
16	6.00	6.00	.00	73.871	60.826
17	3.00	6.00	.00	82.462	71.505
18	.00	6.00	.00	82.334	75.185
19	3.00	3.00	.00	97.371	84.060
20	.00	3.00	.00	93.894	88.385
21	.00	.00	.00	92.934	92.934
22	15.00	15.00	3.00	.000	
23	12.00	15.00	3.00	.000	
24	9.00	15.00	3.00	.000	
25	6.00	15.00	3.00	.000	
26	3.00	15.00	3.00	.000	
27	.00	15.00	3.00	.000	
28	12.00	12.00	3.00	10.661	8.440
29	9.00	12.00	3.00	19.052	16.054
30	6.00	12.00	3.00	25.681	22.096
31	3.00	12.00	3.00	29.932	25.976
32	.00	12.00	3.00	31.334	27.213
33	9.00	9.00	3.00	36.919	30.536
34	6.00	9.00	3.00	49.227	42.030
35	3.00	9.00	3.00	57.009	49.409
36	.00	9.00	3.00	59.432	51.952
37	6.00	6.00	3.00	67.986	67.986
38	3.00	6.00	3.00	78.203	78.203
39	.00	6.00	3.00	81.054	71.505
40	3.00	3.00	3.00	90.547	79.945
41	.00	3.00	3.00	92.887	84.060
42	.00	.00	3.00	89.980	88.385
43	15.00	15.00	6.00	.000	
44	12.00	15.00	6.00	.000	
45	9.00	15.00	6.00	.000	
46	6.00	15.00	6.00	.000	
47	3.00	15.00	6.00	.000	
48	.00	15.00	6.00	.000	
49	12.00	12.00	6.00	8.952	7.180
50	9.00	12.00	6.00	15.944	13.656

$$S(x,y,z) = S_0 \cdot \cos \frac{\pi x}{2a} \cdot \cos \frac{\pi y}{2b} \cdot \cos \frac{\pi z}{2c} \quad (50)$$

y suponer para un elemento determinado una fuente uniformemente distribuida igual al valor de  $S(x,y,z)$  para su centro geométrico  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  con

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i; \quad \bar{z} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i \quad (51)$$

Se hacen coincidir los valores de  $\phi_0$  teórico y su valor obtenido en la aproximación por elementos finitos para poder comparar las formas de ambas distribuciones. Hay que señalar que la resolución de la ecuación de la difusión con fuente multiplicativa es un problema de valor propio (problema de la criticidad) y que lo único que se pretende con esta aplicación particular es verificar la validez de la forma de las funciones flujo obtenidas.

### 5.3 Fuentes planas, lineales y puntuales

En la expresión (41) del ejemplo, si llamamos

$$L^{(e)} = x_2 - x_1,$$

a la longitud del elemento tendremos,

$$\{F^{(e)}\} = \frac{SL^{(e)}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (52)$$

Para los elementos simplex bi- y tridimensionales puede verificarse que obtendríamos las expresiones análogas

$$\{F^{(e)}\} = \frac{SA^{(e)}}{3} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (53)$$

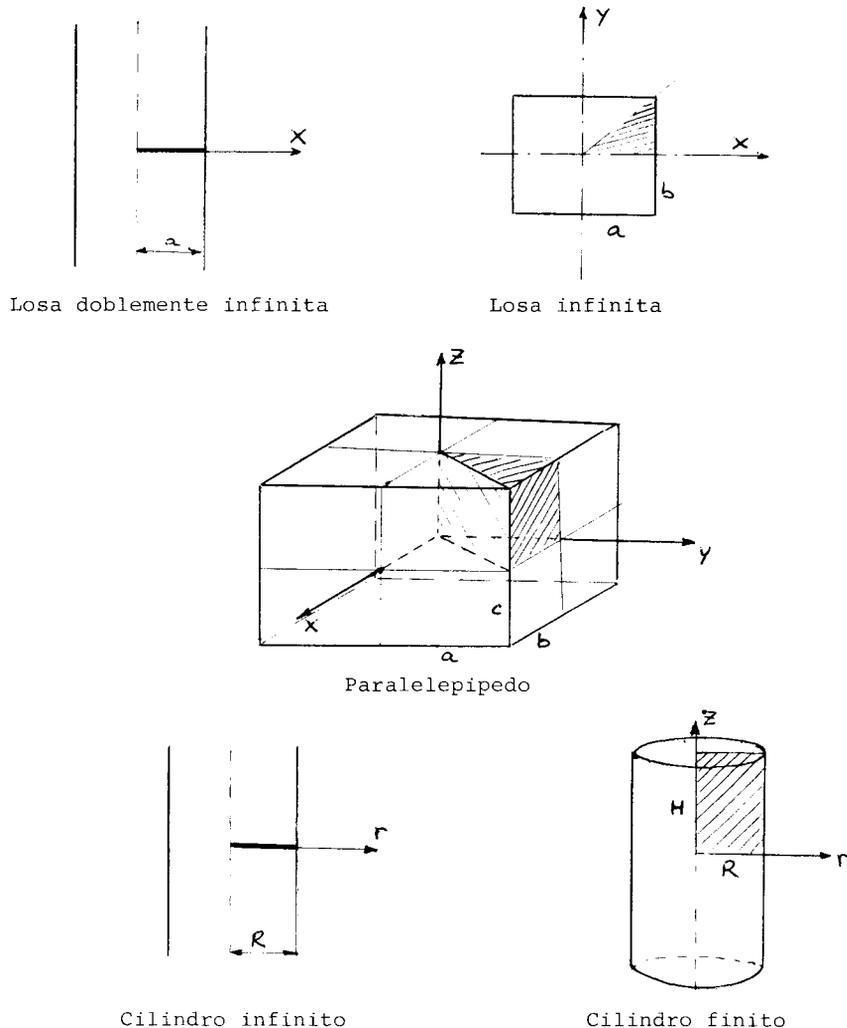


Figura 7.- Importancia de las simetrías

$$\left\{ F^{(e)} \right\} = \frac{SV^{(e)}}{4} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (54)$$

Ello indica que a cada nodo se le adjudica la parte proporcional de la fuente distribuida situada en cada uno de los elementos de los que forma parte. El vector fuerza depende, por tanto, exclusivamente de la fuente. Un valor añadido a un sólo nodo será una "fuente nodal".

El significado físico de una fuente nodal dependerá de la simetría del problema.

## 6. CONCLUSIONES

Los programas realizados permiten el estudio de la función solución de la ecuación de la difusión neutrónica bajo condiciones muy diversas: zonas heterogéneas y fuentes locales o distribuidas con diferentes enriquecimientos. Con el diseño de la malla adecuada puede examinarse cualquier tipo de geometría.

Los límites se sitúan principalmente en tres planos:

- El almacenamiento de la matriz en memoria central, causa de una gran rapidez de ejecución, impone limitaciones al tamaño de la malla a analizar.
- Los límites propios de la ecuación de la difusión que es una aproximación al problema real.
- La aproximación polinómica que se realiza en el interior de cada elemento conocidos los valores en los nodos. Los errores que esta aproximación en el flujo produce son mayores cuantos menos elementos se consideran, y por ello aparecen en mayor escala en elementos tridimensionales (Tabla 5).

## 7. RECONOCIMIENTO

Los autores quieren agradecer al Laboratorio de Cálcul de la ETSEIB el haber puesto a su

alcance todos los medios de que dispone sin cuyo concurso la realización de este trabajo no hubiera sido posible.

## 8. BIBLIOGRAFIA

- /1/ ZIENKIEWICZ, O.C. "The finite element method in structural and continuum mechanics". Mc Graw-Hill Publishing Company - Limited. London. 1967.
- /2/ SEGERLIND, L.J. "Applied finite element analysis". John Wiley and Sons Inc. New Yor. 1976.
- /3/ ALONSO, A. "Apuntes de Tecnología Nuclear". E.TS.E.I.B. Barcelona. Curso 1977-78.
- /4/ CARO, R. "Física de reactores nucleares". Sección de Publicaciones de la J.E.N. Madrid. 1976.

