

TRANSPORT PROCESSES: NUMERICAL SOLUTION

J. Kruis¹, T. Krejčí¹, Z. Bittnar¹

Summary: *Description of transport processes in concrete structures is important topic in durability and reliability assessment of nuclear power plants. Mechanical behaviour, transport of heat and transport of moisture are coupled and they lead to nonstationary nonlinear problem. It must be solved numerically and the application of the Finite Element Method is used in this article. Linear and nonlinear problems are mentioned. The Newton-Raphson iterative method is used for solution of nonlinear algebraic equations. This article is continuation of the paper TRANSPORT PROCESSES: GOVERNING EQUATIONS.*

1. Úvod

Zjišťování spolehlivosti a životnosti kontejnmentů jaderných elektráren je ve středu pozornosti v mnoha zemích. Kontejnmenty chrání reaktor před vnějšími vlivy a zároveň chrání vnější prostředí před eventuální havárií reaktoru. Kromě mechanických vlastností jsou velmi podstatné vlastnosti řídicí transportní procesy. Protože se všechny uvedené vlastnosti navzájem ovlivňují, je třeba použít model pro sdružené úlohy. Spolupůsobení všech složek je velmi náročné, proto byly v minulosti vyvinuty zjednodušené verze materiálových modelů sdružujících pouze některé vlivy.

Volba vhodných neznámých v numerickém modelu je prvním problémem spojeným s řešením sdružené úlohy. V mechanické části problému je situace jednodušší, protože se vychází z deformační varianty metody konečných prvků, takže jako uzlové neznámé jsou zvolena uzlová posunutí. V části zabývající se přenosem tepla a vlhkosti je situace složitější a existuje na ni několik pohledů. Jendele (2002) ve své habilitaci uvádí dvě skupiny proměnných, přičemž teplota je zastoupena v obou z nich. V první skupině jsou hydraulické výšky (hydraulic heads) a ve druhé se pracuje s objemovými podíly (volumetric contents) vody a ostatních látek (NAPL - non-aqueous phase liquid chemical). Krejčí a kolektiv (2001) pracuje s teplotou a obsahem vody v pórech. V monografii Lewis & Schrefler (1990) se pracuje s teplotou, pórovým tlakem v kapalně fázi a pórovým tlakem v plynné fázi. Posledně jmenovaná formulace se jeví jako velmi výhodná a je použita i v této práci.

Všechny výchozí rovnice pro numerické řešení jsou uvedeny v článku Transport Processes: Governing Equations (T. Krejčí, J. Kruis, J. Šejnoha). Jedná se o zákon zachování

¹Ing. Jaroslav Kruis, Ph.D., Ing. Tomáš Krejčí, Prof. Ing. Zdeněk Bittnar, DrSc., Katedra stavební mechaniky, Stavební fakulta ČVUT, Thákurova 7, 166 29 Praha 6; tel. +420 2 2435 4369, tel. +420 2 2435 4309, tel. +420 2 2435 3869, e-mail: jk@cml.fsv.cvut.cz, e-mail: krejci@cml.fsv.cvut.cz, e-mail: bittnar@fsv.cvut.cz.

Tabulka 1: Různé skupiny proměnných.

Uzlové proměnné			
Schrefler, Majorana		Jendele	
$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_T \\ \mathbf{r}_{p_1} \\ \mathbf{r}_{p_2} \end{pmatrix}$	posunutí teplota pórový tlak v kapalině pórový tlak v plynu	$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_T \\ \mathbf{r}_{p_1} \\ \mathbf{r}_{p_2} \end{pmatrix}$	posuny teplota hydraul. výška plynu-vody hydraul. výška plynu-NAPL
Jendele		Šejnoha, Krejčí	
$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_T \\ \mathbf{r}_{p_1} \\ \mathbf{r}_{p_2} \end{pmatrix}$	posuny teplota obsah vody obsah NAPL	$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_T \\ \mathbf{r}_{p_1} \end{pmatrix}$	posuny teplota obsah vody

hmoty, zákon zachování energie, zákon zachování hybnosti a zákon zachování momentu hybnosti. Kromě těchto bilančních rovnic jsou uvedeny i konstitutivní vztahy, které tvoří nedílnou součást popisu problému.

2. Numerické řešení

V příspěvku Krejčí a kolektiv (2003) je v kapitole *Diskretizace řídicích rovnic* uvedena soustava obecně nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic, které lze psát ve tvaru

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{uu} & \mathbf{C}_{uT} & \mathbf{C}_{up_1} & \mathbf{C}_{up_2} \\ \mathbf{C}_{Tu} & \mathbf{C}_{TT} & \mathbf{C}_{Tp_1} & \mathbf{C}_{Tp_2} \\ \mathbf{C}_{p_1u} & \mathbf{C}_{p_1T} & \mathbf{C}_{p_1p_1} & \mathbf{C}_{p_1p_2} \\ \mathbf{C}_{p_2u} & \mathbf{C}_{p_2T} & \mathbf{C}_{p_2p_1} & \mathbf{C}_{p_2p_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{r}}_u \\ \dot{\mathbf{r}}_T \\ \dot{\mathbf{r}}_{p_1} \\ \dot{\mathbf{r}}_{p_2} \end{pmatrix} + \\
 & + \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{uT} & \mathbf{K}_{up_1} & \mathbf{K}_{up_2} \\ \mathbf{K}_{Tu} & \mathbf{K}_{TT} & \mathbf{K}_{Tp_1} & \mathbf{K}_{Tp_2} \\ \mathbf{K}_{p_1u} & \mathbf{K}_{p_1T} & \mathbf{K}_{p_1p_1} & \mathbf{K}_{p_1p_2} \\ \mathbf{K}_{p_2u} & \mathbf{K}_{p_2T} & \mathbf{K}_{p_2p_1} & \mathbf{K}_{p_2p_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_T \\ \mathbf{r}_{p_1} \\ \mathbf{r}_{p_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_u \\ \mathbf{f}_T \\ \mathbf{f}_{p_1} \\ \mathbf{f}_{p_2} \end{pmatrix}. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Indexy u označují uzlová posunutí, T je zvoleno pro teplotu, p_1 a p_2 jsou pórové tlaky. Soustavu diferenciálních rovnic (1) je třeba ještě diskretizovat v čase. K tomu se používají zejména ty diferenční náhrady, které vedou na implicitní algoritmus. To je výhodné z hlediska nepodmíněné stability řešení.

Ze soustavy rovnic (1) lze zanedbáním některých účinků získat jednotlivé jednodušší případy jako je problém mechaniky (soustava podmínek rovnováhy)

$$\mathbf{K}_{uu}\mathbf{r}_u = \mathbf{f}_u$$

nebo problém vedení tepla

$$\mathbf{C}_{TT}\dot{\mathbf{r}}_T + \mathbf{K}_{TT}\mathbf{r}_T = \mathbf{f}_T.$$

Sdružené úlohy vedou na numerické problémy, které jsou způsobeny značně rozdílnými materiálovými charakteristikami. To se projevuje tak, že prvky matice tuhosti jsou řádu 10^9

$$\mathbf{K}_{uu} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & 10^9 & \\ & & \ddots \end{pmatrix},$$

prvky matice vodivosti jsou řádu 10^1

$$\mathbf{K}_{TT} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & 10^1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix},$$

a prvky matice vodivosti vlhkosti jsou řádu 10^{-6}

$$\mathbf{K}_{p_1 p_1} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & 10^{-6} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}.$$

V blocích \mathbf{K}_{uT} a \mathbf{K}_{up_1} jsou pak na jednom řádku značně rozdílná čísla a není možné matici snadno normovat.

Soustava diferenciálních rovnic (1) je obvykle velmi rozsáhlá, protože každý uzel obsahuje v této formulaci 6 neznámých. Jedná se o 3 posuny, teplotu a dva pórové tlaky. Sekvenční zpracování reálných úloh pak naráží na téměř nepřekonatelné potíže s pamětí počítače a strojovým časem. Proto se v současné době pracuje na paralelizaci počítačového programu, která by měla zmíněné potíže výrazně zmírnit.

Kromě numerických potíží způsobených řádově rozdílnými hodnotami materiálových parametrů se u sdružených úloh vyskytuje problém s nesymetrií. Je to proto, že některé mimodiagonální bloky v maticích vodivosti a kapacity nejsou symetrické. U některých modelů jsou dokonce některé mimodiagonální bloky nulové. Nesymetrie matic vyskytujících se v řešeném problému vede pochopitelně k větším nárokům na paměť, protože běžně užívané techniky ukládání pracují jen s horní nebo dolní částí matice. Nesymetrie má také vliv na výběr metody řešení soustavy rovnic, protože mnoho metod je zkonstruovaných pro symetrické matice (\mathbf{LDL}^T rozklad, metoda sdružených gradientů apod.).

V některých případech je možné použít lineární materiálové modely, což se projeví zjednodušením diferenciálních rovnic z nelineárních na lineární. Soustava lineárních diferenciálních rovnic má tedy tvar

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{r}} + \mathbf{K}\mathbf{r} = \mathbf{f}, \quad (2)$$

kde \mathbf{C} je matice kapacity, \mathbf{K} je matice vodivosti, \mathbf{r} je vektor neznámých uzlových veličin a \mathbf{f} je vektor pravé strany. Tečka značí derivaci podle času. Časová diskretizace se uvažuje ve známém tvaru

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + \Delta t \mathbf{v}_{n+\alpha}, \quad (3)$$

Tabulka 2: Algoritmus paralelního zpracování.

- výpočet matic $\mathbf{K}_n^{(i)}$, $\mathbf{C}_n^{(i)}$ a vektoru $\mathbf{F}_n^{(i)}$ na podoblastech
- výpočet pomocného vektoru $\mathbf{K}_n^{(i)} (\mathbf{r}_n^{(i)} + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_n^{(i)})$
- výpočet matice $\mathbf{C}_n^{(i)} + \Delta t\alpha\mathbf{K}_n^{(i)}$
- výpočet vektoru $\mathbf{F}_{n+1}^{(i)} - \mathbf{K}_n^{(i)} (\mathbf{r}_n^{(i)} + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_n^{(i)})$

řešení soustavy rovnic $(\mathbf{C}_n + \Delta t\alpha\mathbf{K}_n) \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{K}_n (\mathbf{r}_n + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_n)$
--

- výpočet vektoru $\mathbf{v}_{n+\alpha}^{(i)} = (1 - \alpha)\mathbf{v}_n^{(i)} + \alpha\mathbf{v}_{n+1}^{(i)}$
- výpočet vektoru $\mathbf{r}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{r}_n^{(i)} + \Delta t\mathbf{v}_{n+\alpha}^{(i)}$

$$\mathbf{v}_{n+\alpha} = (1 - \alpha)\mathbf{v}_n + \alpha\mathbf{v}_{n+1}, \quad (4)$$

což po dosazení do soustavy (2) vede na formulaci

$$(\mathbf{C} + \Delta t\alpha\mathbf{K}) \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{K} (\mathbf{r}_n + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_n). \quad (5)$$

Soustava (5) je soustava lineárních algebraických rovnic a jak již bylo naznačeno, pro reálné problémy obsahuje velké množství neznámých. Paralelizace tohoto problému byla implementována na základě doménové dekompozice. Původní oblast (konstrukce) se rozdělí na menší podoblasti (subkonstrukce), na kterých se provádějí všechny výpočty. Pochopitelně, že je třeba zajistit spojitost řešení na hranicích podoblastí. Schema paralelního řešení soustavy rovnic (5) je zachyceno v tabulce 2.

Všechny kroky kromě zarámovaného se provádějí na jednotlivých podoblastech zcela nezávisle na ostatních částech problému. To je výhodné, protože nedochází ke komunikaci mezi jednotlivými procesory, což je slabým místem každého paralelního výpočtu. Pouze řešení redukovaného problému, který je popsán rovnicí v rámečku, vyžaduje výměnu dat mezi procesory. Jak již bylo uvedeno dříve, všechny výpočty se provádějí na nesymetrických maticích a podle toho musí být upraven i paralelní řešič.

Soustava diferenciálních rovnic (1) je ale obecně nelineární. Proto i po časové diskretizaci budou algebraické rovnice nelineární. Jejich řešení se provádí Newtonovou-Raphsonovou metodou, která převádí řešení nelineární úlohy na sled úloh lineárních. Na paralelizaci nelineární úlohy se v současné době pracuje, protože nestačí pouze převzít hotovou část z lineárních úloh.

Pro ilustraci je uveden příklad vysychání betonového vzorku, jehož materiálové parametry jsou uvedeny v tabulce 3. Sorpční izoterma se předpokládá ve tvaru

$$w = w_h \left(1 - \frac{\log \phi}{A} \right)^{\frac{-1}{n}} \quad (6)$$

Tabulka 3: Materiálové charakteristiky.

parametry Bažantovy křivky permeability vodní páry $a_0=0.2$ $n=16.0$ $\phi_c=0.75$
permeabilita vodní páry v nasyceném stavu $\delta_{wet}^{gw} = 1.0e-11$ [s]
parametry sorpční izotermy $w_h=0.062$ $n=5.235602$ $A=2.79e-05$
hustota 2400.0 kg/m ³

a křivka permeability

$$\frac{\delta_{wet}^{gw}}{\delta_{wet}^{gw}} = a_0 + \frac{1 - a_0}{1 + \left(\frac{1 - \phi}{1 - \phi_c}\right)^n}. \quad (7)$$

V předcházejících rovnicích je ϕ relativní vlhkost, w_h hmotnostní obsah vody v nasyceném stavu a w hmotnostní obsah vody. Hodnoty relativní vlhkosti v různých místech vzorku v závislosti na čase jsou uvedeny na obrázku 1.

3. Poděkování

Tato práce byla podporována projektem MŠMT číslo 210000003.

4. Literatura

Jendele, L. (2002) *Multiphase flow analysis in partially and fully saturated soils*. A habilitation thesis, Czech Technical University.

Krejčí, T., Kruis, J., Šejnoha, J. (2003) *Transport Processes: Governing Equations*. Inženýrská mechanika.

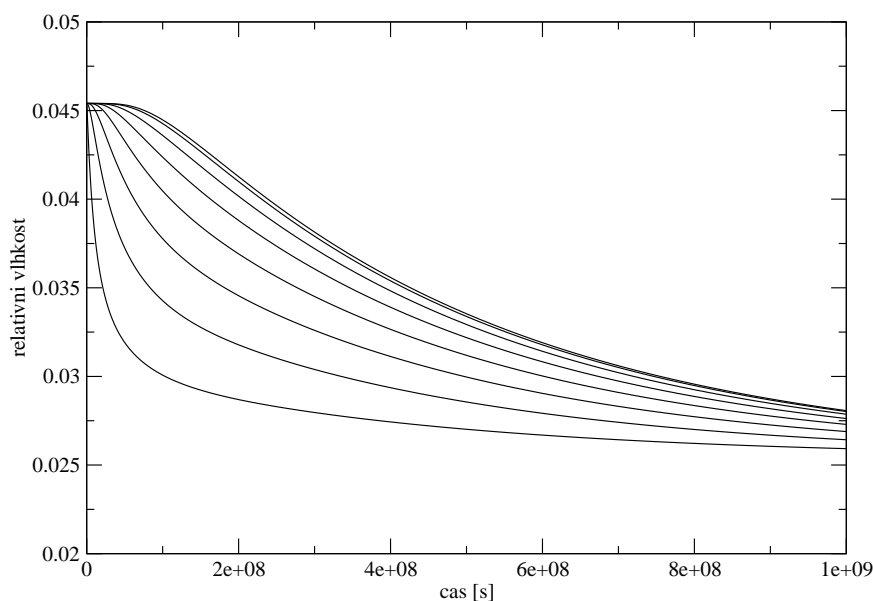
Krejčí, T., Nový, T., Sehnoutek, L., Šejnoha, J. (2001) Structure - Subsoil Interaction in view of Transport Processes in Porous Media. *CTU Reports*, 1(5).

Kruis, J. & Bittnar, Z. (2000) Domain Decomposition Methods in Structural Mechanics, in: *Engineering mechanics 2000*, (J. Náprstek & J. Minster eds.), pp. 105-110.

Kruis, J. & Bittnar, Z. (2000) Advantages of Parallel Algorithms in Structural Mechanics, in: *Developments in Engineering Computational Technology*, (B. H. V. Topping eds.), Civil-Comp Press, Edinburgh, UK, pp. 219-227.

Kruis, J. & Bittnar, Z. (2001) Řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic z MKP na paralelních počítačích, in: *Výpočty konstrukcí metodou konečných prvků*, (J. Plešek, D. Gabriel eds.), Ústav termomechaniky AV ČR, pp. 73-84.

Vysychani vzorku



Obrázek 1: Vysychání vzorku.

Lewis, R.W., Schrefler, B.A. (1990) *The finite element method in static and dynamic deformation and consolidation of porous media*. John Wiley & Sons, Chicester-Toronto (492).

Papadrakakis, M. (1997) *Parallel Solution Methods in Computational Mechanics*. John Wiley & sons.

Papadrakakis, M. & Topping, B.H.V. (1999) *Innovative Computational Methods for Structural Mechanics*. Saxe-Coburg Publications, Edinburgh.

Pedersen, C.R. (1990) *Combined heat and moisture transfer in exposed building constructions*. Ph-D-thesis, Technical University of Denmark, Lingby.