

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

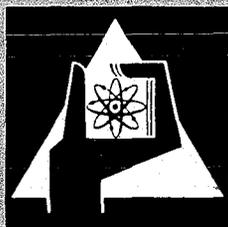
Juli 1971

KFK 1432

Institut für Reaktorentwicklung

**HEXAGON – Eine Systematik
zur Behandlung von Problemen in Sechseckanordnungen**

E. G. Schlechtendahl



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE

170111

Einige Beispiele für die Ordnung

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Juli 1971

KFK 1432

Institut für Reaktorentwicklung

HEXAGON - Eine Systematik zur Behandlung von
Problemen in Sechseckanordnungen

E.G.Schlechtendahl

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe



Zusammenfassung

Für die Berechnung technischer Probleme in der Sechseck -
konfiguration schneller Reaktoren sind Ortsangaben in kate-
sischen Koordinaten oder Zylinderkoordinaten nicht geeignet.
Es wurde eine Systematik entwickelt, die Ortsangaben unmittel-
bar auf der Basis der regelmäßigen Sechseckstrukturen gestattet.
Nachbarschaftsverhältnisse sind hiermit leicht darstellbar.
Es wurden Algorithmen entwickelt, die für verschiedene Symmetrie-
eigenschaften der Anordnung eine effektive Speicherung von
Informationen über eine regelmäßige Sechseckanordnung in einem
linearen Feld gestattet. Die zugehörigen Fortran-Routinen
werden beschrieben.

Abstract

Polar and Cartesian Coordinates are inadequate for the solution
of technical problems in the hexagonal geometry of fast reactor
cores. A consistent method for describing positions on the basis
of regular hexagonal structures was developed, which is especially
suitable for expressing neighbourhood relationships between
hexagons. A set of algorithms was develop, which allows effective
storage of information about regular hexagonal structures in a
linear array. The corresponding Fortran-routines are described.

1. Einleitung

Modelle zur Analyse technischer Probleme im Kern schneller Reaktoren müssen der 6-Eck- bzw. 3-Eckanordnung von Brennelementen und Brennstäben in geeigneter Weise angepaßt sein. Wegen der Unstetigkeit der meisten Zustandsgrößen (Temperaturen, Leistungsdichten etc.) sind Positionsangaben in kartesischen oder Zylinderkoordinaten mit Bezug auf die Mittellinie des Kern ungeeignet. Dies hängt damit zusammen, daß die Felder der technisch-physikalischen Zustandsgrößen im Reaktorkern heterogen sind: einerseits sind sie nur in Teilgebieten definiert (wie z.B. die Brennstofftemperatur nur im Brennstoff definiert ist), andererseits weisen sie Unstetigkeitsstellen auf (wie z.B. die auf eine Brennelementvolumeneinheit bezogene Leistungsdichte beim Übergang von einem Brennelement zu einem anderen, dessen mittlere Anreicherung verschieden ist.)

Eine geeignete Art der Positionsangabe dagegen würde zunächst das zu betrachtende Brennelement spezifizieren, dann den zu betrachtenden Brennstab in diesem Element, schließlich in diesem Brennstab die Ortsposition in Zylinderkoordinaten, die auf die Mittellinie dieses Stabes bezogen sind. Modelle dieser Art müssen zunächst das Problem der Identifikation einer zu betrachtenden Sechseckzelle lösen.

Neben dem Problem der Identifikation steht das Problem der Speicherung unter Benutzung der gebräuchlichsten Programmiersprache (Fortran).

2. Identifikation

Zwei Methoden der Identifikation sollen hier erläutert werden. Beiden gemeinsam ist, daß es in der Anordnung

eine Referenz-Zelle und
eine Referenz-Richtung

gibt. Als Referenz-Zelle bietet sich in der Praxis diejenige Sechseckzelle an, deren Mitte die Mittellinie der ganzen Anordnung enthält. Als ausgezeichnete Richtung wird eine der 6 Richtungen gewählt, die dadurch gekennzeichnet sind, daß auf ihnen die Mittelpunkte benachbarter Zellen liegen.

2.1 Hex-Koordinaten

Eine Art der Identifikation orientiert sich an der ringartigen Anordnung der Sechseckzellen um ein Zentrum. Die Identifikation besteht aus einem Zahlenpaar

IR, IU.

Dieses Zahlenpaar wird im folgenden als Hex-Koordinaten bezeichnet. IR gibt an, auf welchem Ring die Zelle liegt, wobei zur Referenzzelle der Wert IR=0 gehört.

IU gibt an, um wieviel Zellen man auf dem Ring IR im Uhrzeigersinn von der Referenzrichtung aus weitergehen muß, um die betrachtete Zelle zu erreichen. (Siehe Abb.1). Zellen auf der Referenzrichtung haben den Wert IU=0. Es wird vereinbart, daß für negative Werte IR gilt:

$$(IR,n) = (-IR,n)$$

Ferner soll für negative und positive Werte von IU die Umlaufbeziehung

$$(IR,IU)=(IR,IU+6 \cdot k \cdot IR)$$

für beliebige ganzzahlige Werte k gelten. Zahlenpaare (IR, IU) mit $IR \geq 0$ und $0 \leq IU < 6 \cdot IR$ sind als normiert bezeichnet. Normierte Hex-Koordinaten sind den Sechseckzellen eindeutig zugeordnet. Die Speicherung in Rechteckfeldern (Fortran kennt nur diese) unter direkter Benutzung der Zellenidentifikation ist ungünstig (50% Speicherplatzvergeudung), da mit jedem "Ring" um die Mitte der Sechseckanordnung die Zahl der "Elemente pro Ring" steigt. Eine ökonomische Lösung ergibt sich durch Einführung einer Indexfunktion, die zu jeder Identifikation einen eindeutigen Index in einem eindimensionalen Feld berechnet, und zwar in einer Weise die Leerstellen im Innern des Feldes (abgesehen von Unregelmäßigkeiten der Umrandung, wie z.B. durch Kernverspannungskomponenten) vollständig vermeidet.

Da in der Praxis oft von Symmetrieeigenschaften Gebrauch gemacht werden kann, ist eine Speicherung, die solche Symmetriebedingungen nicht berücksichtigt immer noch unökonomisch. Aus Geometrie Gründen kann bei der in schnellen Reaktoren üblichen Anordnung ein Winkelausschnitt von 30° , 60° , 90° , 180° oder schließlich 360° das Problem vollständig beschreiben. Die Einführung einer Symmetriekennzahl K (12 bei 30° , 6 bei 60° , 4 bei 90° , 2 bei 180° , 1 bei 360°) in die Indexberechnungsfunktion trägt dieser Tatsache Rechnung. In Sonderfällen interessiert nur ein Ausschnitt von 0° (d.h. ein "Radius" bestehend aus nebeneinander in einer Linie angeordneten 6-Eck-Zellen). Dieser Anordnung ist jede andere Symmetriekennzahl zugeordnet.

2.2 Tri-Koordinaten

Der Nachteil der Hex-Koordinaten liegt darin, daß Nachbarschaftsverhältnisse in der Identifikation nicht deutlich in Erscheinung treten. In der Praxis ist es jedoch oft nötig, gerade die 6 Nachbarn einer betrachteten Zelle zu identifizieren (Beispiel: Berührungsproblem bei Verbiegung). Diese Nachbarschaftsverhältnisse lassen sich unter Benutzung eines Zahlentripels

I_1, I_2, I_3

leicht zum Ausdruck bringen. Dieses Zahlentripel wird im folgenden als Tri-Koordinaten bezeichnet. Die Werte I1, I2 und I3 geben an, daß man von der Referenzzelle aus I1 Elemente in der Referenzrichtung gehen muß, dann I2 Elemente in der um $+60^\circ$ geneigten Richtung, dann I3 in der um weitere 60° geneigten Richtung, um die betrachtete Zelle zu erreichen. (Siehe Abb.2).

Wegen der Redundanz dieser Koordinaten (3 Angaben für nur 2 tatsächliche Freiheitsgrade) können viele verschiedene Zahlentripel dieselbe Zelle identifizieren. Beispiel: $(0,0,0) = (1,1,-1)$. Die 6 Nachbarn der Zelle $(I1, I2, I3)$ sind leicht zu identifizieren. Es sind dies die Zellen mit den Tri-Koordinaten

$$\begin{aligned} & (I1+1, I2, I3), (I1, I2+I3), (I1, I2, I3+1), \\ & (I1-1, I2, I3), (I1, I2-1, I3), (I1, I2, I3-1). \end{aligned}$$

3. Speicherung

Für die Speicherung der Daten in einem Sechseckraster sind je nach Symmetriebedingungen unterschiedlich große eindimensionale Felder erforderlich. Die Indexberechnungsfunktionen bilden stets die Referenzzelle auf den Index 1 ab. Danach folgen die weiteren Ringe beginnend mit den auf der Referenzrichtung liegenden Zellen. (Siehe Abb.3 bis 8). Der größte Index ist durch die Anzahl der Ringe r (Maximalbetrag von IR) und die Symmetriekennzahl K wie folgt zu ermitteln (mit p =größte ganze Zahl $r/2$):

K	Maximaler Index
1	$1+3 \cdot r(r+1)$
2	$1+r+3 \cdot \frac{r}{2}(r+1)$
4	$3 \cdot (p+1)^2 - \text{mod}(r, 2) \cdot (2+3 \cdot p)$
6	$1+r+\frac{r}{2}(r+1)$
12	$(1+p)(2+p) - \text{mod}(r, 2) \cdot (1+p)$
sonst	$r+1$

4. Umrechnungsroutinen

Der Anhang bringt eine Zusammenstellung der Umrechnungsroutinen, die den Übergang zwischen den verschiedenen Identifikationsmöglichkeiten einer Position (Tri=, Hex=, kartesische und Zylinder-Koordinaten) gestatten. Die kartesischen und die Zylinderkoordinaten sind dabei stets bezogen auf den Abstand zweier benachbarter Sechseckzellen (d.h. die Schlüsselweite der Zelle). Multiplikation mit diesem Längenmaßstab (oder umgekehrt die Division) ergibt den Übergang zu absoluten kartesischen und Zylinder-Koordinaten.

Zwei Punkte liefern den für die Speicherung erforderlichen Index für Hex= und Tri-Koordinaten.

Eine weitere Routine erleichtert die Berücksichtigung von Symmetriebedingungen bei kartesischen und Zylinderkoordinaten.

5. Anwendung auf Dreieckgeometrie

Die hier entwickelte Systematik und die im Anhang aufgelisteten Routinen können auch bei Problemen angewandt werden, deren Geometrie durch gleichzeitige Dreiecke charakterisiert ist. Hierzu müssen lediglich die Mitten der Sechseckzellen als Eckpunkte gleichseitiger Dreiecke interpretiert werden. (Vergl. Abb. 9)

A n h a n g

(Die unterstrichenen Argumente werden berechnet)

SUBROUTINE XYRFI(X,Y,R,FI)

Zweck: Berechnung der (bezogenen) Zylinderkoordinaten R und FI aus den (bezogenen) kartesischen Koordinaten X und Y

SUBROUTINE RFIXY(R,FI,X,Y)

Zweck: Berechnung der (bezogenen) kartesischen Koordinaten X und Y aus den (bezogenen) Zylinderkoordinaten R und FI

SUBROUTINE HEXTRI(IR,IU,I1,I2,I3)

Zweck: Berechnung der Tri-Koordinaten I1, I2 und I3 für das durch die Hex-Koordinaten IR und IU spezifizierte Hexagon

SUBROUTINE TRIHEX(I1,I2,I3,IR,IU)

Zweck: Berechnung der normierten Hex-Koordinaten IR und IU für das durch die Tri-Koordinaten I1, I2 und I3 spezifizierte Hexagon

SUBROUTINE HEXHEX(IR,IU,IRN,IUN)

Zweck: Berechnung normierter Hex-Koordinaten IRN und IUN aus den Hex-Koordinaten IR, IU

SUBROUTINE XYTRI(X,Y,I1,I2,I3,DX,DY)

Zweck: Berechnung der Tri-Koordinaten I1, I2 und I3 desjenigen Hexagons, in dem der Punkt mit den bezogenen kartesischen Koordinaten X und Y liegt, sowie der bezogenen kartesischen Koordinaten DX und DY relativ zur Mitte dieses Hexagons.

SUBROUTINE XYHEX(X,Y,IR,IU,DX,DY)

Zweck: Wie bei XYTRI, jedoch mit dem Unterschied, daß die normierten Hex-Koordinaten IR und IU von der Subroutine berechnet werden.

SUBROUTINE RFITRI (R,FI,I1,I2,I3,DR,DFI)

Zweck: Berechnung der Tri-Koordinaten I1, I2 und I3 desjenigen Hexagons, in dem der Punkt mit den bezogenen Zylinderkoordinaten R und FI liegt, sowie der bezogenen Zylinderkoordinaten DR, DFI des Punktes relativ zur Mitte dieses Hexagons.

SUBROUTINE RFIHEX(R,FI,IR,IU,DR,DFI)

Zweck: Wie bei RFITRI, jedoch mit dem Unterschied, daß die normierten Hex-Koordinaten IR und IU von den Subroutinen berechnet werden.

SUBROUTINE TRIXY(I1,I2,I3,X,Y)

Zweck: Berechnung der bezogenen kartesischen Koordinaten X und Y der Mitte des durch die Tri-Koordinaten I1,I2,I3 spezifizierten Hexagons.

SUBROUTINE HEXXY(IR,IU,X,Y)

Zweck: Berechnung der bezogenen kartesischen Koordinaten X und Y der Mitte des durch die Hex-Koordinaten IR und IU spezifizierten Hexagons.

SUBROUTINE TRIRFI(I1,I2,I3,R,FI)

Zweck: Berechnung der bezogenen Zylinderkoordinaten R und FI der Mitte des durch die Tri-Koordinaten I1,I2 und I3 spezifizierten Hexagons.

SUBROUTINE HEXRFI(IR,IU,R,FI)

Zweck: Berechnung der bezogenen Zylinderkoordinaten R und FI der Mitte des durch die Hex-Koordinaten IR und IU spezifizierten Hexagons.

SUBROUTINE SYMMTR(XMIN,XMAX,YMIN,YMAX,X,Y,XIN,YIN)

Zweck: Berechnung der im Bereich

$$XMIN \leq XIN \leq XMAX$$

$$YMIN \leq YIN \leq YMAX$$

liegenden Koordinaten XIN und YIN desjenigen Punktes der X-Y-Ebene, der dem Punkt mit den Koordinaten X und Y zugeordnet ist, wenn die Geraden

$$x = XMIN$$

$$x = XMAX$$

$$y = YMIN$$

$$y = YMAX$$

als Symmetriegeraden aufgefaßt werden.

Anmerkungen:

- a) Für $XMAX \geq XMIN$ wird $XIN = X$ gesetzt
- b) Für $YMAX \geq YMIN$ wird $YIN = Y$ gesetzt
- c) Die Routine kann auch für Zylinderkoordinaten benutzt werden.

Beispiele:

Eine Funktion sei symmetrisch bezüglich mit den Symmetriegeraden $\varphi = 0$ und $\varphi = \pi/6$. Der Aufruf CALL SYMMTR(0.,0.,0.,PI/6.,R,EPS,RIN) würde liefern (PI=3.141593 angenommen):

stets	RIN	=	R	
und	FIIN	=	EPS	bei $0 \leq EPS \leq \pi/6$
			$\pi/3$ -EPS	bei $\pi/6 \leq EPS \leq \pi/3$
			EPS- $\pi/3$	bei $\pi/3 \leq EPS \leq \pi/2$
			$2\pi/3$ -EPS	bei $\pi/2 \leq EPS \leq 2\pi/3$
				etc.

FUNCTION INDHEX (NSYMM,IR,IU)

Zweck: Berechnung eines Index (≥ 1) eines eindimensionalen Feldes, der dem durch die Hex-Koordinaten IR und IU spezifizierten Hexagon bei der spezifizierten Symmetrieziffer NSYMM eindeutig zugeordnet ist.

FUNCTION INDTRI (NSYMM,I1,I2,I3)

Zweck: wie bei INDHEX, jedoch mit dem Unterschied, daß hier das Hexagon durch sein Tri-Koordinaten spezifiziert wurde.

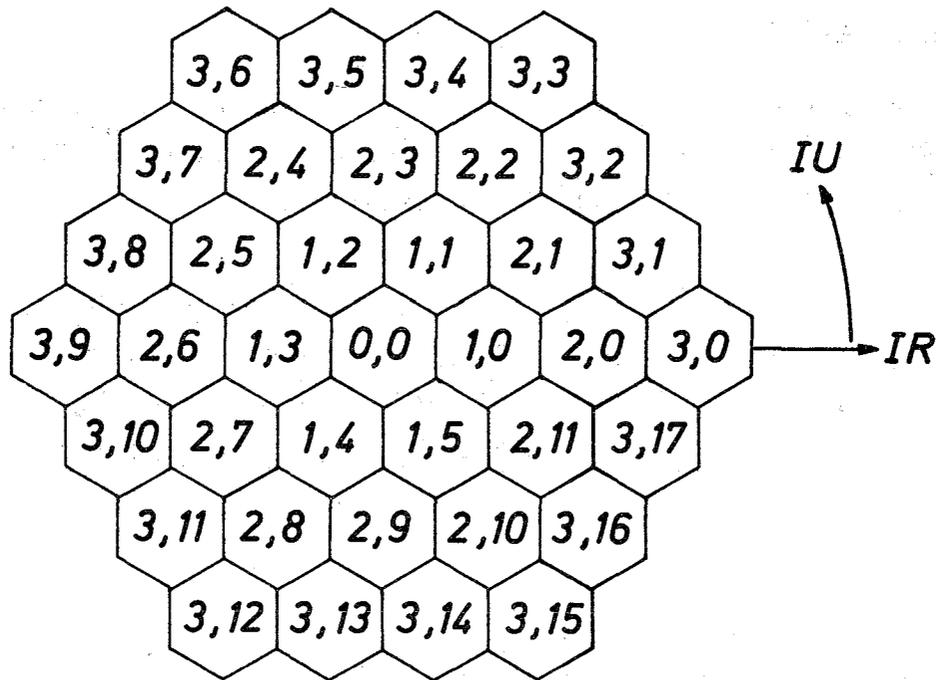


Abb. 1 Hex-Koordinaten einer Sechseckanordnung

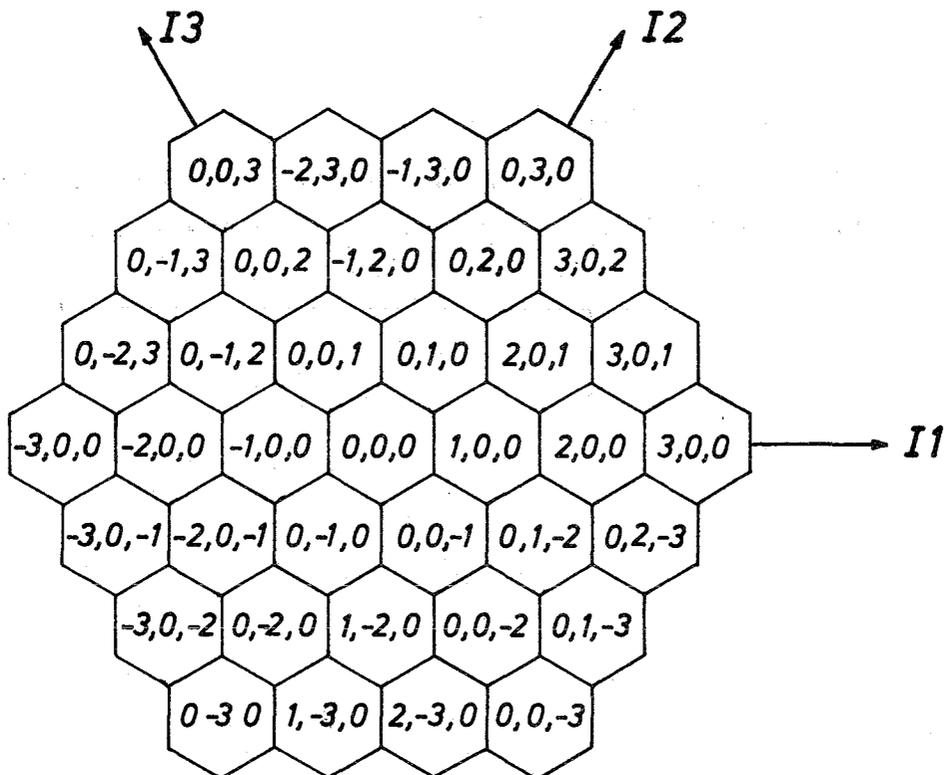


Abb. 2 Tri-Koordinaten einer Sechseckanordnung

Speicherindex für Sechseckanordnung

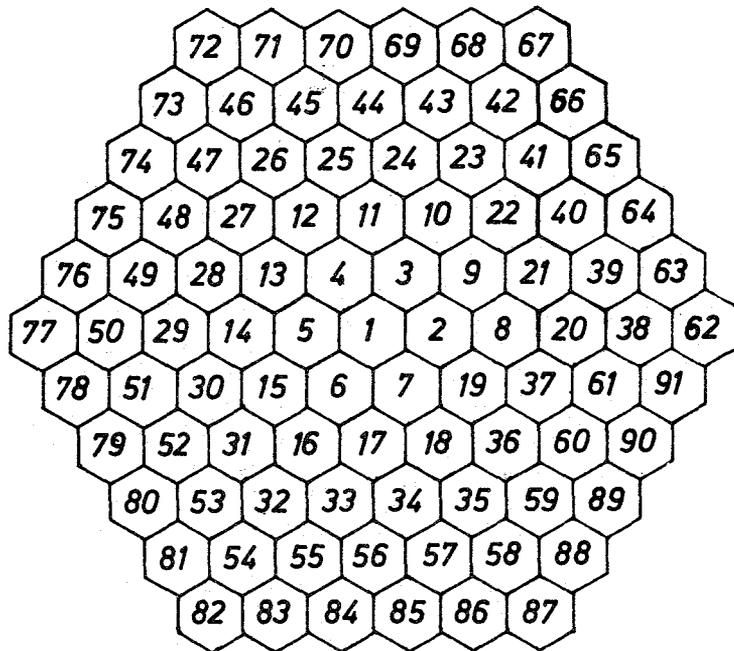


Abb. 3 Symmetriekennzahl = 1

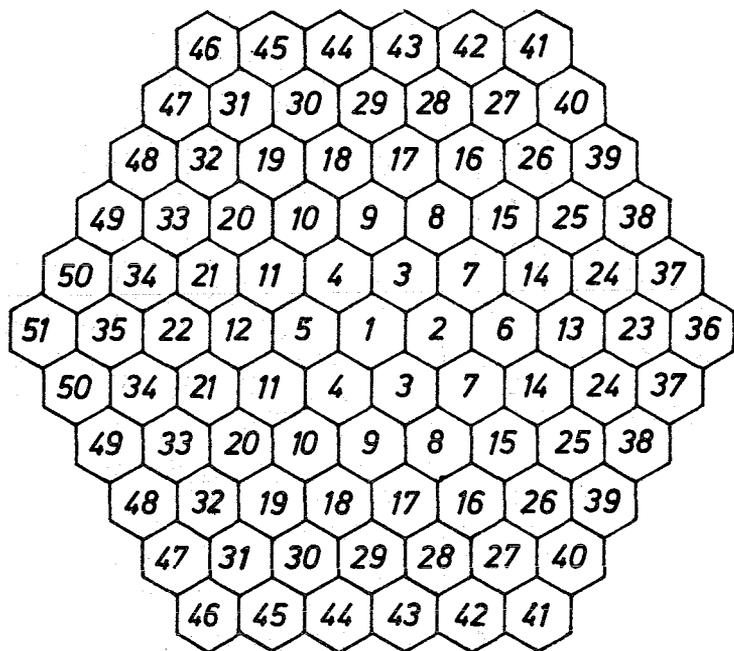


Abb. 4 Symmetriekennzahl = 2

Speicherindex für Sechseckanordnung

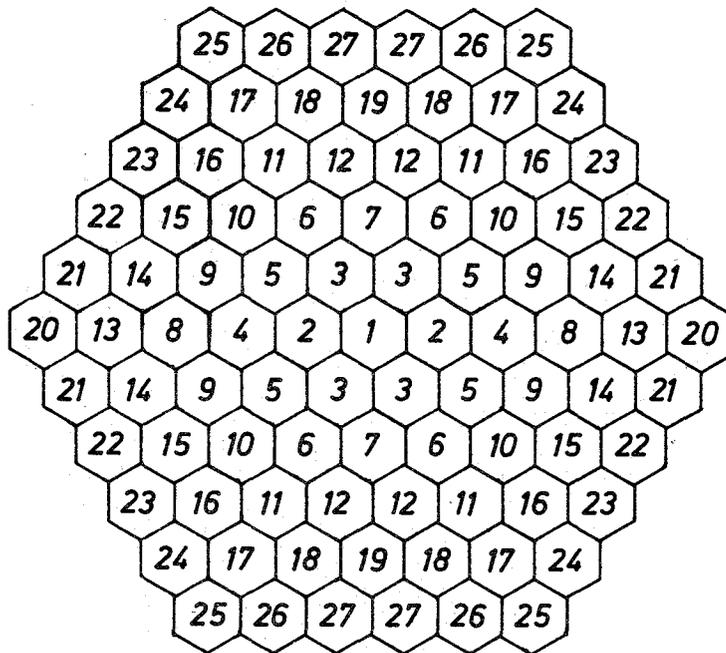


Abb. 5 Symmetriekennzahl = 4

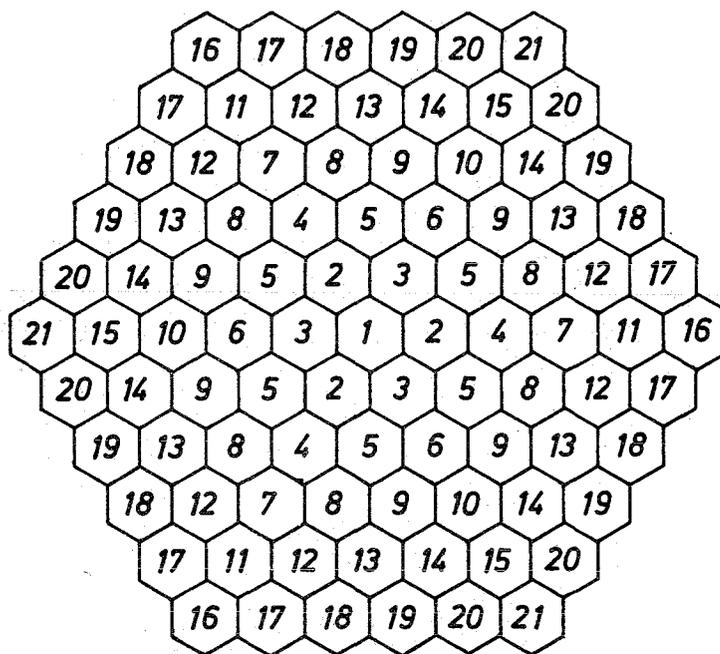


Abb. 6 Symmetriekennzahl = 6

Speicherindex für Sechseckanordnung

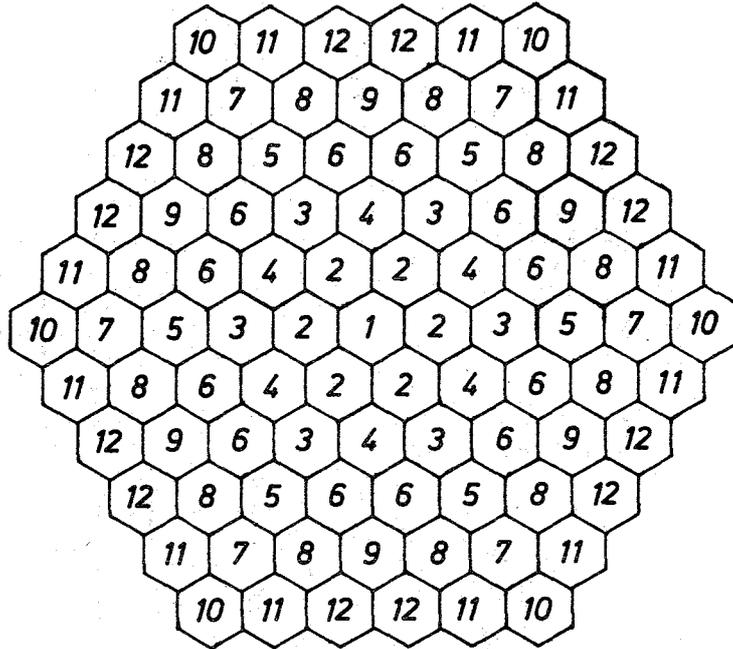


Abb. 7 Symmetriekennzahl = 12

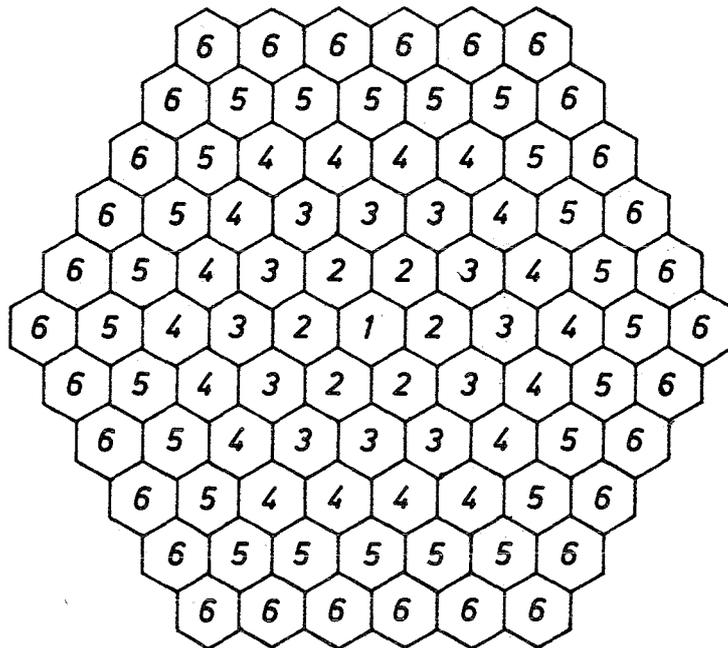


Abb. 8 Symmetriekennzahl = 0

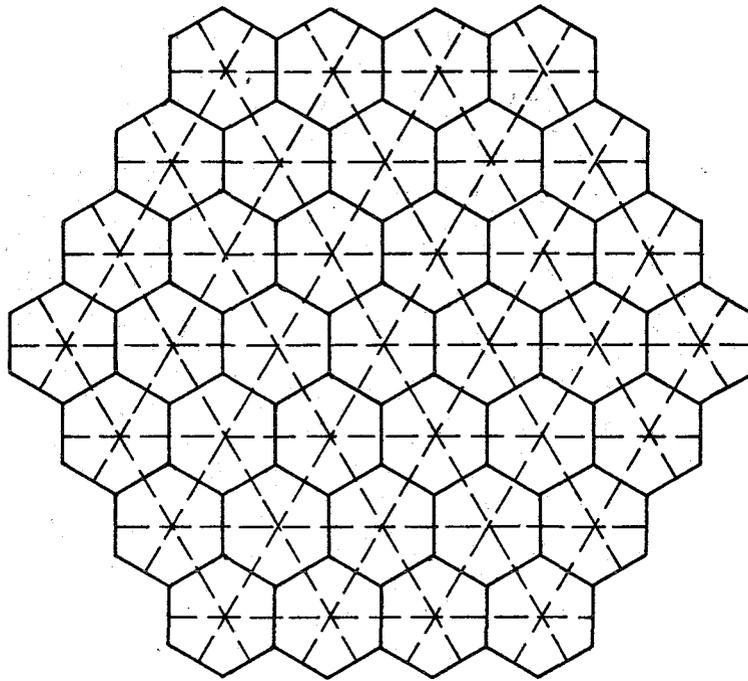


Abb. 9 *Übergang auf Dreiecksgeometrie*