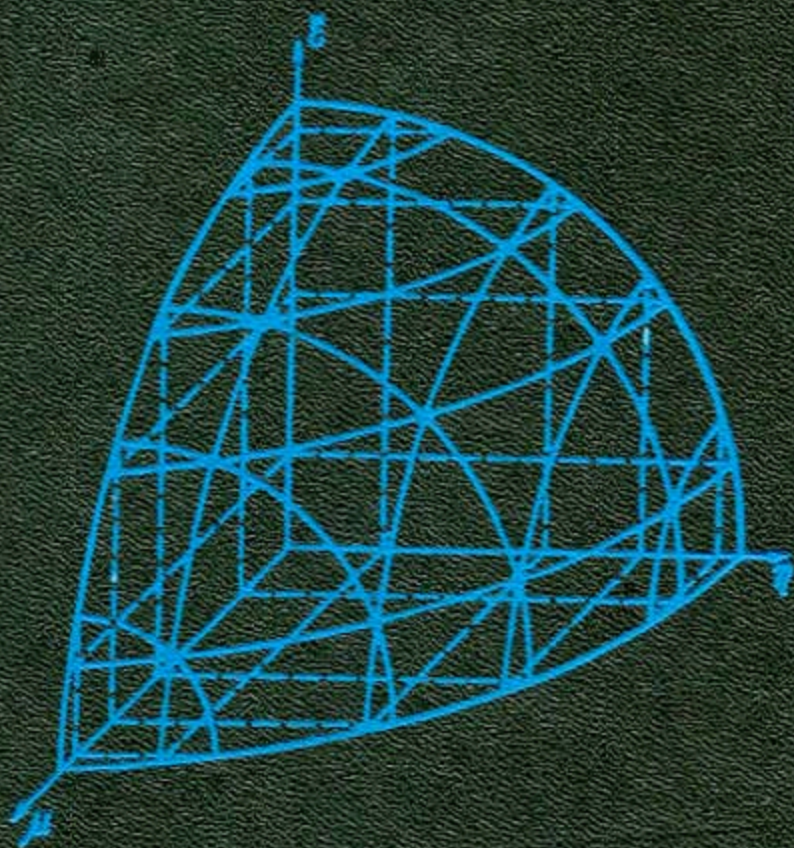


ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
МЕТОДЫ
В ФИЗИКЕ
РЕАКТОРОВ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ РЕАКТОРОВ

Сборник статей под редакцией
Х. ГРИНСПЕНА,
К. КЕЛБЕРА, Д. ОКРЕНТА
Перевод с английского



МОСКВА АТОМИЗДАТ 1972

COMPUTING METHODS IN REACTOR PHYSICS

EDITED BY
H. GREENSPAN, C. N. KELBER AND D. OKRENT

ARGONNE NATIONAL LABORATORY

GORDON AND BREACH SCIENCE PUBLISHERS
NEW YORK. LONDON. PARIS

Вычислительные методы в физике реакторов. Сб. статей. Под ред. Х. Гринспена, К. Келбера, Д. Окрента. Перев. с англ. М., Атомиздат, 1972, с. 372.

Книга представляет собой сборник обзоров по основным проблемам разработки, алгоритмизации и реализации на ЭВМ численных методов решения прикладных реакторных задач. В книге изложены диффузионное приближение для одномерных и двухмерных задач, метод дискретных ординат, метод сферических гармоник. Описываются переходные процессы в ядерных реакторах, исследуются процессы, сопровождающие гипотетическую ядерную аварию на реакторе, излагается решение задач, связанных с быстрым введением в реактор большой положительной реактивности. Даны основы современного математического аппарата для решения нейтронно-физических реакторных задач.

Рис. 47, табл. 17, библиогр. 653 названия.

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | | |
|--|--|-----|
| Глава 1. Одномерная теория диффузии. М. Батлер, Дж. Кук (перев. И. С. Слесарева) | | 3 |
| § 1.1. Вывод уравнений | | 3 |
| § 1.2. Аналитическое решение уравнений диффузии | | 10 |
| § 1.3. Численные методы решения многогрупповых диффузионных уравнений | | 17 |
| Обозначения | | 42 |
| Литература | | 44 |
| Глава 2. Теория диффузии в двух- и трехмерной геометрии. А. Хассит (перев. И. С. Слесарева) | | 50 |
| § 2.1. Введение | | 50 |
| § 2.2. Двухмерные задачи | | 51 |
| § 2.3. Типичная задача | | 53 |
| § 2.4. Конечно-разностные уравнения | | 54 |
| § 2.5. Разностные уравнения вблизи границ | | 59 |
| § 2.6. Задачи в различных геометриях | | 61 |
| § 2.7. Некоторые конечно-разностные задачи | | 63 |
| § 2.8. Применение теории возмущений | | 65 |
| § 2.9. Точность. Выбор сетки | | 67 |
| § 2.10. Некоторые свойства матриц | | 68 |
| § 2.11. Метод верхней релаксации | | 72 |
| § 2.12. Теория метода верхней релаксации | | 74 |
| § 2.13. Различные процессы верхней релаксации | | 77 |
| § 2.14. Методы переменных направлений | | 80 |
| § 2.15. Другие методы | | 82 |
| § 2.16. Практическое применение методов решения | | 86 |
| § 2.17. О решении двухмерных задач на ЭВМ | | 94 |
| § 2.18. Сравнение разных методов | | 96 |
| § 2.19. Трехмерные задачи | | 97 |
| Обозначения | | 99 |
| Литература | | 100 |
| Глава 3. Теория переноса. Метод дискретных ординат Б. Карлсон, К. Латрон (перев. А. Н. Шмелева) | | 102 |
| § 3.1. Формулировка уравнений дискретных ординат в терминах дискретных переменных | | 103 |
| § 3.2. Вывод уравнений дискретных ординат непосредственно из аналитической формы уравнения переноса | | 113 |
| § 3.3. Выбор угловых квадратурных коэффициентов | | 116 |
| § 3.4. Приближения и упрощения | | 120 |
| § 3.5. Решение уравнений дискретных ординат | | 124 |
| § 3.6. Принципы оценки решения | | 130 |
| § 3.7. Итерационные циклы и критерии сходимости | | 131 |
| § 3.8. Численный пример | | 136 |
| § 3.9. Обобщение метода дискретных ординат — интегральная транспортная теория | | 140 |
| § 3.10. Обобщение метода дискретных ординат — сопряженное уравнение переноса | | 149 |
| § 3.11. Нерешенные проблемы метода дискретных ординат | | 154 |
| Обозначения | | 155 |
| Литература | | 156 |

| | |
|--|-----|
| Глава 4. Методы сферических гармоник. P_L- и двойное P_L-приближения. | |
| <i>Е. Гелбард (перев. М. В. Федулова)</i> | 158 |
| § 4.1. P_L - и двойное P_L -приближения в плоской геометрии | 158 |
| § 4.2. Итерационные методы для пластин | 172 |
| § 4.3. Устойчивые неитерационные методы. Пластины | 182 |
| § 4.4. Сферы и цилиндры | 189 |
| § 4.5. Аналитический метод | 207 |
| § 4.6. Другие вопросы | 213 |
| Обозначения | 221 |
| Литература | 221 |
| Глава 5. Методы Монте-Карло в применении к решению реакторных задач. | |
| <i>М. Калос, Ф. Накач, Дж. Селник (перев. В. А. Кузьмичевой)</i> | 224 |
| § 5.1. Введение | 234 |
| § 5.2. Аналоговый метод Монте-Карло | 225 |
| § 5.3. Выборка по важности | 229 |
| § 5.4. Выборка по важности в задачах, связанных с переносом излучения в защите | 232 |
| § 5.5. Методы счета | 246 |
| § 5.6. Прочие методы | 250 |
| § 5.7. Задачи, связанные с оценкой реактивности | 253 |
| Приложение А. Получение случайных величин | 266 |
| Приложение Б. Геометрические проблемы | 270 |
| Обозначения | 272 |
| Литература | 273 |
| Глава 6. Расчеты кинетики реактора. Г. Флэтт (перев. М. В. Федулова) | 277 |
| § 6.1. Введение | 277 |
| § 6.2. Пространственно-независимая кинетика | 277 |
| § 6.3. Пространственно-зависимая кинетика | 301 |
| Приложение. Функции $C_n(x)$ | 315 |
| Обозначения | 318 |
| Литература | 319 |
| Глава 7. Комплексные нестационарные нейтронно-динамические задачи. | |
| <i>Р. Лазарус, В. Страттон, Т. Юз (перев. А. Н. Шмелева)</i> | 321 |
| § 7.1. Введение | 321 |
| § 7.2. Основные уравнения | 322 |
| § 7.3. Упрощенные модели | 323 |
| § 7.4. Решение с использованием ЭВМ | 325 |
| § 7.5. Сравнение с результатами эксперимента. | 329 |
| Приложение. Схема программы | 330 |
| Обозначения | 332 |
| Литература | 332 |
| Глава 8. Математические основы. Дж. Кук (перев. В. А. Кузьмичевой) | 333 |
| § 8.1. Введение | 333 |
| § 8.2. Стохастический процесс | 334 |
| § 8.3. Частично упорядоченные линейные пространства | 339 |
| § 8.4. Эволюционное уравнение Колмогорова | 340 |
| § 8.5. Интегро-дифференциальное транспортное уравнение | 343 |
| § 8.6. Интегральное транспортное уравнение | 348 |
| § 8.7. Многогрупповая система уравнений диффузии | 350 |
| § 8.8. Сопряженный поток | 353 |
| Приложение А. Эргодичность | 355 |
| Приложение Б. Существование и единственность стохастического процесса | 357 |
| Обозначения | 359 |
| Литература | 361 |
| Указатель | 366 |

Глава I

ОДНОМЕРНАЯ ТЕОРИЯ ДИФФУЗИИ

М. Батлер, Дж. Кук
(Аргоннская национальная лаборатория)

Одномерная теория диффузии нейтронов наиболее часто используется при расчетах реакторов с помощью электронно-вычислительных машин.

Решение уравнений одномерной диффузии является сравнительно простой задачей и вместе с тем точность этого метода в широком классе проблем реакторной техники достаточно высока. Разумно составленные программы, использующие теорию диффузии, требуют сравнительно мало машинного времени, не требуют большой оперативной памяти и высокой скорости счета. Это обусловлено главным образом присущей теории диффузии простотой, позволяющей использовать мощные прямые численные методы.

Сначала в гл. I с помощью метода сферических гармоник выводятся уравнения диффузионного приближения. Затем рассматривается уравнение в форме Гельмгольца для диффузионного приближения и обсуждаются его аналитические решения, полезные при изучении физики и выборе композиции ядерного реактора. Далее обсуждаются в историческом аспекте возможности вычислительных машин в применении к задачам физики реакторов. В последнем параграфе излагаются численные способы решения многогрупповых уравнений, выраженных в конечно-разностной форме, с помощью метода прогонки. Описаниями вычислительных алгоритмов и характеристик отдельных программ, использующих одномерную теорию диффузии, завершается этот параграф и вся глава.

Параграфы 1.2, 1.3 и разд. 1 3.4 написаны М. Батлером, остальные параграфы — Дж. Куком. Оба автора благодарят Дж. Батлера за полезные обсуждения изложенного материала.

§ 1.1. ВЫВОД УРАВНЕНИЙ

1.1.1. Уравнение переноса. Большая часть этой книги посвящена решению различных приближений линеаризованного уравнения Больцмана

$$\frac{\partial F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - v \sum_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \int v' [\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) + v \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t)] F(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) dv' + Q(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), \quad (1.1)$$

являющегося математической моделью для описания переноса нейтронов. Ключом к пониманию теории служит фундаментальная теория микроскопических процессов [1—3]. Однако, подобно теории упругости и гидродинамике, эта теория может быть достаточно хорошо построена на макроскопическом уровне.

Нейтроны могут рассматриваться в виде среды нового сорта — нейтронного газа. Таким образом, уравнение (1.1) является систематическим «каталогом» всех возможных путей входа, выхода, генерации и поглощения этого газа в любой области. В каждой точке пространства может иметь место распределение скоростей нейтронов по всем направлениям. Плотность нейтронов на единицу объема фазового пространства в данный момент времени t представляется неотрицательной, интегрируемой функцией (или обобщенной функцией [4])

$F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, зависящей от координат \mathbf{x} и скорости \mathbf{v} , а не векторной или тензорной функцией лишь переменной \mathbf{x} . Основным упрощением теории является реалистическое допущение, что нейтроны взаимодействуют лишь с ядрами среды, через которую они движутся, и не взаимодействуют друг с другом. Все необходимые для существа дела свойства среды выражаются через макроскопические сечения Σ_{tot} , Σ_s и Σ_f , являющиеся функциями \mathbf{x} , \mathbf{v} и t , причем среднее число ν нейтронов, возникающих на один акт деления, обычно постоянно. Одно из важных свойств уравнения (1.1) — его линейность (неоднородная линейность в случае $Q \neq 0$) в тех часто встречающихся ситуациях, когда сечения могут быть заранее определены независимо от F . Большая часть теории состоит из анализа частных и конкретных примеров, соответствующих определенному классу [5] линейных операторов, которые фигурируют даже в задачах с запаздывающими нейтронами [6]. Нелинейность уравнения имеет место (см. гл. 6 и 7) только в случае сильного взаимодействия нейтронного газа со средой.

Движение нейтронов особенно легко описывается, если $\Sigma_{tot} = \Sigma_s = \Sigma_f = Q = 0$. Тогда, согласно первому закону Ньютона, $F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = F(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}, 0)$, где $F(\cdot, \cdot, 0)$ — начальное значение в момент времени $t = 0$. Следовательно, если функция F дифференцируема, то

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} F(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}, 0) = -\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}, 0) = \\ &= -\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), \end{aligned}$$

что является уравнением переноса в вакууме. При наличии какого-либо вещества скорость реакции с нейтронным газом в единицу времени равна $\nu \Sigma_{tot} F$. Реакция изменяет состояние (равномерное движение) газа. Этот член, следовательно, должен быть вычтен из правой части уравнения. С другой стороны, скорость появления газа в новом его состоянии равна

$$\int \nu' (\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t)) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}'$$

и обязана процессам рассеяния и деления нейтронов всех скоростей \mathbf{v}' в точке \mathbf{x} . Добавлением этого члена и источника нейтронов Q , если существует внешний источник, завершается формирование уравнения (1.1). Таким образом, можно получить уравнение переноса с помощью первого закона Ньютона и закона взаимодействия нейтронов с ядрами среды, характеризующего сечениями Σ , в \mathbf{v} -пространстве в точке \mathbf{x} и t . Целью такого вывода являлось представление мнемонического инструмента для оправдания математической модели. Уравнение (1.1) можно рассматривать как хорошо обоснованный фундамент теории и нет необходимости в выводе его из какой-либо более веской теории. Нашей задачей является исследование чисто математических свойств этого уравнения. В рамках принятой модели подразумевается, что существует математический объект — «количество нейтронного газа», но его свойства могут быть получены из уравнения, а не наоборот. Подобно «теплу», связанному с уравнением теплопроводности, в этом случае «субстанция» — это лишь удобный математический принцип для построения инвариантов. Будем считать нейтронный газ состоящим из частиц-точек. Чтобы сделать нашу модель достаточно хорошо определенной для вывода (1.1), будем в основном иметь дело с уравнениями, игнорирующими статистические флуктуации.

Член взаимодействия

$$\begin{aligned} (T_{int} F)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= -\nu \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \\ &+ \int \nu' (\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t)) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}' \end{aligned}$$

линейно зависит от сечений Σ и эта зависимость дважды используется при их исследованиях в экспериментах. Во-первых, с помощью экспериментов по рассеянию решение уравнения (1.1) эмпирически определяется во внешней среде по отношению к простым по форме телам, состоящим из чистых материа-

лов (изотопов)*. Затем макроскопические сечения смеси материалов можно рассчитать с помощью линейной суперпозиции сечений чистых материалов.

Когда уравнение (1.1) определено в неограниченном пространстве, граничные условия не нужны. Но реактор может быть ограничен выпуклой поверхностью. Тогда накладывают условие $F(\mathbf{x}_{\text{гр}}, \mathbf{v}_{\text{вх}}, t) = 0$ и прибавляют, если необходимо, внешние источники. Большое число независимых переменных в уравнении (1.1) приводит к тому, что численные расчеты становятся громоздкими. Поэтому (1.1) аппроксимируют более простыми уравнениями. Они получаются ограничением области определения оператора переноса $T = -\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{x}} + T_{\text{int}}$ некоторым линейным подпространством.

Так как многие линейные подпространства будут обсуждаться в дальнейшем, необходимо ввести единые обозначения [5]. Пусть $\mathcal{L}(\mathcal{S})$ — пространство всех определенных на \mathcal{S} функций, которые могут быть проинтегрированы с некоторым весом. Для уравнения (1.1) \mathcal{S} является шестимерным евклидовым пространством E_6 с элементом объема $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$. Для конечно-разностной аппроксимации \mathcal{S} будет представлять собой конечную систему взвешенных точек. Решения сопряженных уравнений [8] будут элементами дуального пространства ограниченных линейных функционалов на $\mathcal{L}(\mathcal{S})$. В любой конечной аппроксимации точки \mathcal{S} определяют естественный базис $\mathcal{L}(\mathcal{S})$ и дуальный базис дуального пространства. Оператор и сопряженный ему оператор могут быть представлены в этом биортогональном базисе некоторой матрицей, транспонированной по отношению к первой матрице (см. разд. 1.3.4).

1.1.2. Уравнения метода сферических гармоник. Уравнение (1.1) может быть представлено с помощью оператора T , определенного в предыдущем разделе, в следующей форме: $\frac{\partial F}{\partial t} = TF + Q$. Рассмотрим угловую зависимость Ω скорости $\mathbf{v} = |\mathbf{v}|\Omega = v\Omega$. Законы микроскопического рассеяния инвариантны по отношению к вращению. Кроме того, хорошим допущением обычно является изотропность распределения материалов в реакторе. Поэтому совершенно естественно изучать поведение T по отношению к разбиению пространства $\mathcal{L}(\{\Omega\})$ на его $(2l+1)$ -мерные подпространства $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$, инвариантные при неприводимых представлениях группы вращения [9].

Введем оператор проектирования I_l пространства $\mathcal{L}(\{\Omega\})$ на $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$, определенный как

$$(I_l g)(\Omega) = \frac{2l+1}{4\pi} \int d\Omega' P_l(\Omega\Omega') g(\Omega'),$$

где P_l — полиномы Лежандра l -го порядка. В методе сферических гармоник (см. гл. 4) все разложения $g = \sum_{l=0}^{\infty} I_l g$ ограничены суммой их проекции $(I_0 + \dots + I_n)g$ в конечномерном подпространстве

$$\mathcal{L}(\{\Omega\})_0 \oplus \dots \oplus \mathcal{L}(\{\Omega\})_n,$$

являющемся прямой суммой $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$ при некоторой фиксированной величине n . (В B_l -методе [10] g проектируются на те же подпространства, но ортогональные проекции определяются другим скалярным произведением, взвешен-

* Результатом измерений, собранных в форме таблицы, является матрица рассеяния S_{Σ} , где под Σ следует понимать все три сечения. Декомпозиция рассеивающего тела на два отдельных куска соответствует расчленению $\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2$ сечений в уравнении (1.1) на две независимые системы функций. Расчленение $S_{\Sigma_1 + \Sigma_2}$ на S_{Σ_1} и S_{Σ_2} изучалось Амбарцумяном, Чандрасекаром, Беллманом, Рибаричем и другими. Проблема может быть упрощена выбором такого малого размера рассеивающего тела, чтобы достаточно было учитывать лишь несколько соударений внутри тела.

Закон расчленения матриц S лежит в основе «метода прогонки», описанного в разд. 1.3.3 и используемого для решения одномерных уравнений диффузии. Если r является толщиной рассеивателя, то $dS_{\Sigma}(r)/dr$ удовлетворяет уравнению Рикатти, тесно связанному с (1.8) [7].

ным с помощью функции основной гармоник и полного сечения взаимодействия.)

Оператор T не коммутирует с $I_0 + \dots + I_n$, распространенным на $\mathcal{L}(E_6)$. Особого внимания заслуживает член утечки $-\Omega \cdot \nabla_x$. В методе сферических гармоник связь $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$ с $\mathcal{L}(\{\Omega\})_{l+1}$ осуществляется с помощью рекуррентного соотношения

$$\Omega \cdot \Omega_0 Y_l(\Omega) = Y_{l-1}(\Omega) + Y_{l+1}(\Omega).$$

Оператор T и уравнение (1.1) не преобразуют $\mathcal{L}(\{\Omega\})_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{L}(\{\Omega\})_n$ в себя. Наилучшая в некотором смысле аппроксимация оператора T , коммутирующая с $I_0 + \dots + I_n$, имеет вид

$$(I_0 + \dots + I_n)T(I_0 + \dots + I_n) + (I_{n+1} + \dots)T(I_{n+1} + \dots).$$

В этом случае n -я аппроксимация метода сферических гармоник заменяет оператор T той частью $(I_0 + \dots + I_n)T(I_0 + \dots + I_n)$ этого оператора, которая определена в $\mathcal{L}(\{\Omega\})_0 \oplus \dots \oplus \mathcal{L}(\{\Omega\})_n$. Формализм метода удобно представить в матричной форме $T_{ij} = I_i T I_j$, именно

$$(I_0 + \dots + I_n)T(I_0 + \dots + I_n) = \begin{pmatrix} T_{00} & \dots & T_{0n} \\ \vdots & & \vdots \\ T_{n0} & \dots & T_{nn} \end{pmatrix},$$

а Q необходимо заменить матрицей $\begin{pmatrix} I_0 Q \\ \vdots \\ I_n Q \end{pmatrix}$.

Уравнение переноса нейтронов, записанное относительно потока нейтронов $\Phi = vF$, имеет вид

$$\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (-\Omega \cdot \nabla_x - T_{tot} + T_s + vT_f) \Phi + Q,$$

где

$$\begin{aligned} (T_{tot} \Phi)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t); \\ (T_s \Phi)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \int \Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}'; \\ (T_f \Phi)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \int \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}'. \end{aligned}$$

Выражение $(\Omega \cdot \nabla_x)_{mn}$, представленное в матричной форме, равно нулю, исключая $m = n \pm 1$. Более того, так как мы впредь будем считать распределение материалов реактора изотропным, операторы рассеяния и деления будут коммутировать с вращением Ω и, следовательно, $(T_{tot})_{mn} = (T_s)_{mn} = (vT_f)_{mn} = 0$, за исключением случая $m = n$ (лемма Шура [11]). Таким образом, однородный оператор переноса имеет блочную тридиагональную форму с элементами $(-T_{tot} + T_s + vT_f)_{ll}$ на диагонали и околодиагональными членами $-(\Omega \cdot \nabla_x)_{l, l \pm 1}$. Все другие элементы матрицы равны нулю. Только член $-(\Omega \cdot \nabla_x)_{l, l \pm 1}$ осуществляет связь между различными $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$, препятствуя коммутации с $I_0 + \dots + I_n$.

$T_s + vT_f$ — это интегральный оператор с ядром, зависящим от \mathbf{x} , v , Ω , v' , Ω' и t , причем Ω и Ω' могут появляться только в комбинации $\Omega \cdot \Omega'$. Ядро выражения $(T_s + vT_f)_{ll}$ является l -м членом разложения

$$(T_s + vT_f)(\mathbf{x}, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) = \sum_{l=0}^{\infty} (T_s + vT_f)_{ll}(\mathbf{x}, v, v', t) P_l(\Omega \cdot \Omega').$$

При ограничении пространством $\mathcal{L}(\{\Omega\})_l$ ядро есть функция лишь \mathbf{x} , v , v' и t .

Ввиду того, что T_{tot} также коммутирует со всеми вращениями пространства \mathbf{v} , функция $\Sigma_{tot}(\mathbf{x}, v, \Omega, t)$ не может зависеть от Ω .

В гл. 4 содержится более полное обсуждение метода сферических гармоник. Здесь этот метод представлен как переходная ступень от уравнения Больцмана к уравнениям диффузии.

1.1.3. Уравнение диффузии. В методе сферических гармоник при $n = 1$ осуществляется замена оператора T оператором $(I_0 + I_1) T (I_0 + I_1)$. Тогда

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{00} & (-\Omega \cdot \nabla_x)_{01} \\ (-\Omega \cdot \nabla_x)_{10} & (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Q_0 \\ Q_1 \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_0(x, v, t) &= \frac{1}{4\pi} \int \Phi(x, v, \Omega', t) d\Omega'; \quad Q_0(x, v, t) = \frac{1}{4\pi} \int Q(x, v, \Omega', t) d\Omega'; \\ \Phi_1(x, v, \Omega, t) &= \frac{3}{4\pi} \int \Omega \cdot \Omega' \Phi(x, v, \Omega', t) d\Omega'; \\ Q_1(x, v, \Omega, t) &= \frac{3}{4\pi} \int \Omega \cdot \Omega' Q(x, v, \Omega', t) d\Omega', \end{aligned}$$

так как $P_0(x) = 1$ и $P_1(x) = x$. Записывая это матричное уравнение в виде системы уравнений относительно двух неизвестных, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \Phi_0}{\partial t} &= (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{00} \Phi_0 - \frac{1}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \cdot \nabla_x \Phi_1 + Q_0; \\ \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \Phi_1}{\partial t} &= -\frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Omega \cdot \Omega' \Omega' \cdot \nabla_x \Phi_0 + (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11} \Phi_1 + Q_1. \end{aligned}$$

С учетом (при интегрировании) специфики члена $\frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \Omega'^*$ первое уравнение преобразуется к виду

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \cdot \nabla_x \Phi_1 &= -\frac{1}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \cdot \nabla_x \frac{3}{4\pi} \int \Omega'' \cdot \Omega'' \Phi(x, v, \Omega'', t) d\Omega'' = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \nabla_x \cdot \int d\Omega'' \frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \Omega' \cdot \Omega'' \Phi = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \nabla_x \cdot \int d\Omega'' \Omega'' \Phi = -\frac{1}{4\pi} \nabla_x \cdot \mathbf{J}, \end{aligned}$$

где $\mathbf{J}(x, v, t) = \int d\Omega \Omega \Phi(x, v, \Omega, t)$ — ток нейтронов. Аналогично для второго уравнения

$$-\frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Omega \cdot \Omega' \Omega' \cdot \nabla_x \Phi_0 = -\Omega \cdot \nabla_x \Phi_0.$$

Так как это уравнение справедливо для всех Ω , можно вынести $3\Omega \cdot$ и написать его в векторной форме $[3\Omega$ коммутирует с выражением $(-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11}$, которое в пространстве $\mathcal{L}(\{\Omega\})$ действует только [12] на (x, v) -зависимость потока $\Phi(x, v, \Omega)$, как отмечалось в конце разд. 1.1.2]. Прделав эти преобразования, получим два уравнения для скалярного потока $\varphi = 4\pi \Phi_0$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{00} \varphi - \nabla_x \cdot \mathbf{J} + 4\pi Q_0; \\ \frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} &= -\frac{1}{3} \nabla_x \varphi + (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11} \mathbf{J} + 4\pi \mathbf{Q}_1. \end{aligned}$$

Оценка члена $\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}$ [13] во втором уравнении показывает, что им можно пренебречь в силу физических соображений. После этого нетрудно получить уравнение диффузионного приближения, разрешая

$$0 = -\frac{1}{3} \nabla_x \varphi + (-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11} \mathbf{J} + 4\pi \mathbf{Q}_1$$

* $\Omega' \cdot \Omega'$ является линейным преобразованием $v \rightarrow \Omega' \cdot (\Omega' v)$.

относительно J и подставляя решение в первое уравнение:

$$\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{1}{3T_{tr}} \nabla \Phi + (-T_{tot} + T_s + vT_f) \Phi + 4\pi \left(Q_0 - \nabla \cdot \frac{1}{T_{tr}} Q_1 \right),$$

где $T_{tr} = (T_{tot} - T_s)_{11}$. Здесь мы пренебрегли вкладом $(vT_f)_{11}$ в T_{tr} [14]. В момент времени, предшествующий делению, в среде образуется компаунд-ядро с временем жизни, достаточно большим, чтобы потерялась информация о параметрах налетающего нейтрона. Таким образом, эмиссия нейтронов изотропна в системе центра масс. Для тяжелых ядер она изотропна с хорошим приближением также и в лабораторной системе координат и $(vT_f)_{11} = 0$ для $l \geq 1$. Индексы в выражении $(-T_{tot} + T_s + vT_f)_{11}$ могут быть опущены, так как оператор этот преобразует $\mathcal{L}(\{\Omega\})_1$ в себя.

При выводе уравнения диффузии мы неявно предполагали, что оператор T_{tr} всегда имеет обратный. Однако это допущение не всегда выполняется. Но $T_{tr}J$ равно нулю при отличном от нуля J только в пустоте, где все сечения равны нулю. Решение задач с пустотами нельзя искать в рамках теории диффузии, а следует пользоваться специальными методами. Кроме того, область \mathcal{R} в E_3 , в которой $\Sigma_{tot} > 0$, должна быть выпуклой. Можно показать*, что оператор $(T_{tr})^{-1}$ существует на множестве $\mathcal{L}(\mathcal{R} \times E_3)_1$ тогда и только тогда, когда $\Sigma_{tot} > 0$ на $\mathcal{R} \times E_3$ (за исключением множества меры нуль), и что этот обратный оператор является ограниченным, если сечение Σ_{tot} отлично от нуля и средний косинус $\bar{\mu}(x, v, v', t)$ угла рассеяния (информирующий о наличии процесса рассеяния) не равен единице. В этом случае можно выразить J через Φ и два связанных уравнения P_1 -метода сведутся к одному уравнению теории диффузии, записанному относительно независимой от Ω функции Φ .

* Обратная матрица будет существовать, если $\|T_{tot}\Phi_1 - T_s\Phi_1\| > 0$ для Φ_1 при $l=1$ в пространстве $\mathcal{L}(\mathcal{R} \times E_3)$. С помощью неравенства треугольника достаточно показать, что $\|T_s\Phi_1\| < \|T_{tot}\Phi_1\|$:

$$\begin{aligned} \|T_s\Phi_1\| &= \int_{\mathcal{R} \times E_3} dx dv d\Omega \left| \int dv' d\Omega' \Sigma_s(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) \Phi_1(x, v', \Omega', t) \right| < \\ &< \int dv' \int dx dv d\Omega \left| \int d\Omega' \Sigma_s(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) \Phi_1(x, v', \Omega', t) \right|. \end{aligned}$$

Но $\Sigma_s(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) = \sum_{l=0}^{\infty} \Sigma_{s,l}(x, v, v', t) P_l(\Omega \cdot \Omega')$ и, кроме того, $\Sigma_{s,1}(x, v, v', t) =$

$$= \frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Sigma_s(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) \Omega \cdot \Omega' = \frac{3}{4\pi} \Sigma_s^r(x, v, v', t) \bar{\mu}(x, v, v', t) \text{ не зависит от } \Omega, \text{ где } \Sigma_s^r(x, v, v', t) = \int d\Omega' \Sigma_s(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) \bar{\mu}(x, v, v', t) \text{ (} \bar{\mu} = 0, \text{ если } \Sigma_s^r = 0\text{)}.$$

$$\|T_s\Phi_1\| < \int dv' \int dx dv d\Omega \left| \int d\Omega' \Sigma_s^r(x, v, v', t) \bar{\mu}(x, v, v', t) \frac{3\Omega \cdot \Omega'}{4\pi} \Phi_1(x, v', \Omega', t) \right| =$$

$$= \int dv' \int dx dv d\Omega \left| \Sigma_s^r(x, v, v', t) \bar{\mu}(x, v, v', t) \Phi_1(x, v', \Omega, t) \right|, \text{ так как } \int d\Omega' \frac{3\Omega \cdot \Omega'}{4\pi} \times$$

$\times \Phi_1(x, v', \Omega', t) = (I_1 \Phi_1)(x, v', \Omega, t) = \Phi_1(x, v', \Omega, t)$. По определению $|\bar{\mu}(x, v, v', t)| < 1$.

Поэтому $\|T_s\Phi_1\| < \int dv' \int dx dv d\Omega \Sigma_s^r(x, v, v', t) |\Phi_1(x, v', \Omega, t)|$, так как $\Sigma_s^r(x, v, v', t) \geq 0$ из-за неотрицательности T_s . Операция умножения на $\int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t)$ дает скорость процесса рассеяния в точке x, v', t . Эта скорость меньше или равна скорости всех возможных реакций взаимодействия, поэтому

$$\|T_s\Phi_1\| < \int dx dv' d\Omega \Sigma_{tot}(x, v', \Omega, t) |\Phi_1(x, v', \Omega, t)| = \|T_{tot}\Phi_1\|. \text{ В этой цепочке возможных неравенств одно из последних двух является точным, поскольку в любой рассматриваемой точке или } \int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t) > 0 \text{ и тогда } \int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t) >$$

$> \int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t) \bar{\mu}(x, v, v', t)$ [рассеяние строго назад, т. е. $\bar{\mu}(x, v, v', t) = -1$, возможно на множестве (x, v, v') меры нуль, чистое рассеяние вперед отсутствует по определению], или $\int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t) = 0$ и тогда $\Sigma_{tot}(x, v', \Omega, t) > \int dv \Sigma_s^r(x, v, v', t)$.

Следовательно, $\|T_s\Phi_1\| < \|T_{tot}\Phi_1\|$. Если эти условия соблюдаются, то $(T_{tr})^{-1}$ не только существует, но даже ограничен.

В областях, где $\Sigma_{f,11}$ и Q_1 равны нулю, связь между потоком и током нейтронов дается законом Фика

$$\mathbf{J} = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \nabla\varphi.$$

До сих пор мы предполагали только, что отношение Σ_e/Σ_{tot} мало и мы описываем поле на расстоянии по крайней мере нескольких длин свободного пробега нейтронов от источников и от границ разрыва свойств среды [15]. Кроме того, мы полагали dJ/dt равным нулю [13]. Смысл этих приближений не был точно проанализирован. Ситуация по отношению к $1/(3\Sigma_{tr})$ еще хуже. Эта величина теперь должна быть аппроксимирована оператором D , диагональным по всем переменным: $(D\varphi)(\mathbf{x}, v, t) = D(\mathbf{x}, v, t)\varphi(\mathbf{x}, v, t)$ для некоторой функции $D(\mathbf{x}, v, t)$. T_{tot} является диагональным оператором и не зависит от Ω . Трудности, связанные с оператором $(T_s)_{11}$, отчасти уменьшаются, если учесть тот факт, что неупругое рассеяние существенно изотропно из-за образования компаунд-ядра. (Даже при наличии анизотропии она проявляется лишь в четных l .) Таким образом, $(\Sigma_s)_{11} \approx (\Sigma_e)_{11}$ и $\Sigma_{tr} \approx \Sigma_{tot} - (\Sigma_e)_{11}$ в рамках одного и того же приближения [16]. Упругое рассеяние является в основном задачей классической механики. И хотя угловая зависимость сечений может изменяться, особенно вблизи резонанса, часто делается допущение об их изотропности в системе центра масс (рассеяние на твердой сфере) [17, 18]. Значит, величину $\bar{\mu}_0(\mathbf{x}, v, t) = \int d\nu' \bar{\mu}(\mathbf{x}, v, \nu', t)$ можно рассчитать точно [19]. Для рассеяния на чистом изотопе $\bar{\mu}_0 = 2/3A$, где A — массовое число ядра рассеяния. Для смеси изотопов $\bar{\mu}_0$ является суммой, взвешенной с помощью макроскопических сечений. Если предположить также, что потеря энергии нейтроном после одного соударения с ядром среды достаточно мала (тяжелые ядра), то сечение $\Sigma_e(\mathbf{x}, v, \nu', \Omega \cdot \Omega', t)$ приближенно равно $\Sigma_e'(\mathbf{x}, v, \Omega \cdot \Omega', t) \delta(v - \nu')$. Тогда

$$\begin{aligned} (T_e \mathbf{J})(\mathbf{x}, v, t) \cdot \Omega &\approx \int d\Omega' \Sigma_e'(\mathbf{x}, v, \Omega \cdot \Omega', t) \mathbf{J}(\mathbf{x}, v, t) \cdot \Omega' = \\ &= \int d\Omega' \Sigma_{e,1}'(\mathbf{x}, v, t) (\Omega \cdot \Omega') \mathbf{J}(\mathbf{x}, v, t) \cdot \Omega'. \end{aligned}$$

Как известно, $\frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Omega' \Omega' = I$. Поэтому

$$(T_e \mathbf{J})(\mathbf{x}, v, t) \cdot \Omega = \frac{4\pi}{3} \Sigma_{e,1}'(\mathbf{x}, v, t) \mathbf{J}(\mathbf{x}, v, t) \cdot \Omega.$$

Далее

$$\begin{aligned} \Sigma_{e,1}'(\mathbf{x}, v, t) &= \frac{3}{4\pi} \int d\Omega' \Sigma_e'(\mathbf{x}, v, \Omega \cdot \Omega', t) \Omega \cdot \Omega' = \\ &= \frac{3}{4\pi} \Sigma_e'(\mathbf{x}, v, t) \bar{\mu}_0(\mathbf{x}, v, t). \end{aligned}$$

Итак, $(T_e)_{11} \approx \Sigma_e' \bar{\mu}_0$. В этом приближении T_{tr} является диагонализированным оператором и, следовательно, легко обратимым:

$$D = \frac{1}{3(\Sigma_{tot} - \Sigma_e' \bar{\mu}_0)}.$$

Использование этого выражения приводит к диффузионно-возрастному уравнению Ферми [20, 21], которое часто применяется в анализе физики тепловых реакторов, не содержащих легких элементов в качестве замедлителя, например, реакторов с графитовым замедлителем. Диффузионно-возрастное уравнение не используется, если замедлителем являются водородсодержащие материалы, при столкновении с ядрами которых нейтрон может потерять всю энергию независимо от того, какой энергией он обладал.

Уравнения возраста могут быть модифицированы для расчета реакторов при наличии легких ядер [22, 23]. Однако в случае, когда деление в надтепло-

вой области становится существенным, лучше пользоваться многогрупповой теорией. При этом весь диапазон скоростей нейтронов $0 \leq v < \infty$ разбивается на конечное число сегментов, «групп» нейтронов, представленных дискретными скоростями нейтронов v_1, v_2, \dots, v_G , пронумерованных сверху вниз в порядке убывания энергии (возрастания летаргии). Функция φ_g усредняется по g -му сегменту определенным способом. Операторы $1/3T_{tr}; T_s; vT_f$ и T_{tot} становятся матричными функциями x . Обычно такие функции должны иметь непрерывные ограниченные частные производные 1-го порядка в каждой из отдельных открытых областей, сумма которых вместе с границами является выпуклой ограниченной областью \mathcal{R} . Уравнение диффузии становится системой из G связанных линейных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\frac{1}{v_g} \cdot \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} = \nabla \cdot D_g \nabla \varphi_g + \sum_{g'} (T_s + vT_f)_{g, g'} \varphi_{g'} - \Sigma_{tot, g} \varphi_g + Q_{0, g}, \quad (1.2)$$

справедливых в каждой подобласти области \mathcal{R} . На границах областей функции φ_g и $D_g \frac{\partial \varphi_g}{\partial n}$ должны быть непрерывными. Здесь $\frac{\partial \varphi_g}{\partial n}$ является производной по нормали к границе и $D_g > 0$ — существенно ненулевая функция, имеющая непрерывные ограниченные частные производные 2-го порядка в каждой подобласти. На границе области \mathcal{R} : $\varphi_g + \beta_g \frac{\partial \varphi_g}{\partial n_{наружу}} = 0$ (экстраполированная граничная точка) с кусочно-непрерывной функцией β_g . Для получения D недиагональные элементы $1/3T_{tr}$ исключаются с помощью пока еще математически неформализованных аргументов в том случае, когда возможна большая потеря энергии на одно столкновение. На существующей стадии развития теории эта дискретная аппроксимация непрерывной энергетической переменной не может быть оправдана только численным анализом (за исключением возрастной теории непрерывного замедления). На практике обычно задается форма многогрупповых уравнений и затем величина D_i подгоняется по результатам эксперимента [24, 25].

Хабетлер и Мартино представили [26] точный механизм получения многогрупповых уравнений диффузии. Их результаты, подтверждающие существование и единственность фундаментального решения прямого уравнения и фундаментальных собственных функций сопряженного уравнения, представляются наиболее завершенным исследованием одномерных моделей.

§ 1.2. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ

Поскольку весь материал этого параграфа при необходимости его дополнения можно найти в доступной литературе [27—34], обсуждение проводится в сжатой форме, и, где это возможно, результаты сведены в таблицы.

1.2.1. Одногрупповая теория. Одногрупповая теория основана на предположении, что статическое распределение нейтронов разделимо по пространственным переменным и по энергии. Эта предпосылка справедлива в ряде физических задач. Двумя из них, имеющими важное значение с исторической точки зрения, являются задачи о распределении нейтронов в плоских однозонных реакторах и в больших системах с тепловым спектром. Без рассмотрения замедления и в отсутствие внешнего источника уравнение диффузии (1.2), полученное в предыдущем параграфе, для критического реактора может быть записано в виде

$$DV^2 \varphi(X) - \Sigma_A \varphi(X) + v \Sigma_F \varphi(X) = 0, \quad (1.3)$$

где $D (= \frac{1}{3\Sigma_{tr}})$, Σ_A , Σ_F и v — соответственно коэффициент диффузии, макроскопические сечения захвата и деления и число нейтронов, генерируемых на одно деление, для гомогенной среды.

Вейнберг и Вигнер [27] называют уравнение (1.3) уравнением реактора. Другая часто используемая форма записи есть

$$\nabla^2 \varphi + \frac{k-1}{L^2} \varphi = 0,$$

где $L^2 (= D/\Sigma_A)$ — квадрат длины диффузии и $k (= \nu\Sigma_F/\Sigma_A)$ — коэффициент размножения или число нейтронов, генерируемых на один поглощенный нейтрон. Величину $(k-1)/L^2$ или $(\nu\Sigma_F - \Sigma_A)/D$, определяемую материальными свойствами среды, обычно называют материальным параметром. Уравнение реактора идентично по форме уравнению Гельмгольца

$$\nabla^2 \psi + B^2 \psi = 0.$$

Принимая условие, что решение (поток нейтронов) равно нулю на экстраполированной границе, можно получить собственное значение B^2 и соответствующее ему распределение нейтронов — собственную функцию. Для критического реактора интерес представляют в основном лишь фундаментальное собственное значение и соответствующая ему собственная функция*, так как требуется найти решение, неотрицательное всюду в пределах экстраполированных границ. Фундаментальное собственное число B^2 , определяемое формой реактора и его размерами, называется геометрическим параметром или баклингом (или лапласианом); термин баклинг был, вероятно, заимствован из расчетов критической нагрузки гибких опор [35], сделанных Эйлером. Величина $B^2 = \frac{-\nabla^2 \varphi}{\varphi}$ характеризует кривизну нейтронного потока в каждой точке реактора. Показано, что уравнение критичности, определяющее необходимое соотношение между материальными и геометрическими свойствами критического реактора, должно иметь для одногрупповой теории следующий вид:

$$\frac{k-1}{L^2} = B^2,$$

т. е. материальный и геометрический параметры должны быть равны между собой.

В табл. 1.1 даны фундаментальные собственные числа для решений уравнения Гельмгольца, относящиеся к трем стандартным геометриям реактора. Соответствующая собственная функция каждого из решений может быть получена из 1-й колонки табл. 1.2 при подстановке b вместо a .

Таблица 1.1

Геометрические параметры B^2

| Бесконечный плоский цилиндр | Бесконечный правый цилиндр | Сфера |
|-----------------------------|---|---------------------|
| $\frac{\pi^2}{(2b)^2}$ | $\frac{j_{0,1}^2}{b^2} \approx \frac{(2,405)^2}{b^2}$ | $\frac{\pi^2}{b^2}$ |

Примечание. b — полутолщина реактора, включая длину экстраполяции; $j_{0,1}$ — минимальный корень уравнения $J_0(x) = 0$, где J_0 — функция Бесселя.

Одногрупповая теория может быть также применена для расчета эффективной добавки отражателя или «асимптотических» распределений нейтронов в реакторах с отражателем или в многозонных реакторах. В таких случаях поток нейтронов в каждой гомогенной зоне можно рассматривать как решение уравнения реактора. В случае неразмножающей среды оно может быть записано в виде

$$D\nabla^2 \varphi - \Sigma_A \varphi = 0,$$

где $D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$ и Σ_A — коэффициент диффузии и макроскопическое сечение поглощения в неразмножающей среде. С точностью до знака уравнение имеет

* Собственная функция, отвечающая минимальному по модулю собственному числу B^2 . — Прим. перев.

ту же форму, что и рассмотренное ранее уравнение Гельмгольца, и может быть представлено как

$$\nabla^2 \psi - \kappa^2 \psi = 0,$$

где $\kappa^2 = 1/L^2$ есть величина, обратная квадрату длины диффузии в среде и равная Σ_A/D .

Применение граничных условий симметрии в центре и равенство нулю потока нейтронов на экстраполированной границе вместе с условиями непрерывности потока ϕ и тока $D\phi'$ нейтронов дают возможность получить уравнение критичности, связывающее материальные и геометрические свойства реактора. В табл. 1.2 суммированы решения одногрупповой теории для стандартных геометрий. Постоянные A и F определяются условиями непрерывности на границах зон и заданием уровня мощности реактора.

Т а б л и ц а 1.2

Решения одногрупповой теории

| Геометрия | Поток | | Уравнение критичности | Поток ϕ_R в бесконечном отражателе | Уравнение критичности |
|--------------------------------|--|---|--|--|---|
| | ϕ_C в активной зоне | ϕ_R в конечном отражателе | | | |
| Бесконечный слой | $A \cos Bx$ ($ x < a$) | $F \operatorname{sh} (b - x)$ ($a < x < b$) | $\operatorname{tg} Ba = \frac{D_R \kappa}{D_C B} \operatorname{cth} \kappa (b - a)$ | $Fe^{-\kappa x }$ ($ x > a$) | $\operatorname{tg} Ba = \frac{D_R \kappa}{D_C B}$ |
| Бесконечный правильный цилиндр | $A J_0(Br)$ ($r < a$) | $F \left[K_0(\kappa r) \times \frac{K_0(\kappa b)}{I_0(\kappa b)} \times I_0(\kappa r) \right]$ ($a < r < b$) | $\frac{J_1(Ba)}{J_0(Ba)} = \frac{D_R \kappa}{D_C B} \times \left[\frac{K_1(\kappa a) + \frac{K_0(\kappa b)}{I_0(\kappa b)} I_1(\kappa a)}{K_0(\kappa a) - \frac{K_0(\kappa b)}{I_0(\kappa b)} I_0(\kappa a)} \right]$ | $FK_0(\kappa r)$ ($r > a$) | $\frac{J_1(Ba)}{J_0(Ba)} = \frac{D_R \kappa K_1(\kappa a)}{D_C B K_0(\kappa a)}$ |
| Сфера | $\frac{A \sin(Br)}{Br}$ ($r < a$) | $\frac{F \operatorname{sh} \kappa (b - r)}{\kappa r}$ ($a < r < b$) | $\operatorname{ctg} Ba = \frac{1}{Ba} \left(1 - \frac{D_R}{D_C} \right) - \frac{D_R \kappa}{D_C B} \operatorname{cth} \kappa (b - a)$ | $\frac{Fe^{-\kappa r}}{\kappa r}$ ($r > a$) | $\operatorname{ctg} Ba = 1 - \frac{D_R}{D_C} (\kappa a + 1) = \frac{D_R \kappa}{D_C B}$ |

Примечание. a — полутолщина активной зоны; b — полутолщина реактора, включая длину экстраполяции.

1.2.2. Двухгрупповая модель. Следующим, более точным после одногрупповой теории приближением является двухгрупповая модель, которая благодаря простоте и одновременно высокой точности интенсивно использовалась при конструировании установок и в исследовательских расчетах. Разделение всей энергетической оси на тепловую и нетепловую группы позволяет более правильно отразить картину физического явления и, значит, рамки такого подхода становятся шире. В двухгрупповой модели одно балансное уравнение одногрупповой теории заменено парой уравнений, описывающих поведение двух групп нейтронов — быстрой группы (т. е. нейтронов, испытывающих замедление) и тепловой группы, а именно:

$$\left. \begin{aligned} D_1 \nabla^2 \phi_1 - \Sigma_{R,1} \phi_1 + \nu \Sigma_{F,2} \phi_2 &= 0; \\ D_2 \nabla^2 \phi_2 - \Sigma_{A,2} \phi_2 + \rho \Sigma_{R,1} \phi_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

Здесь величины D , Σ_F , Σ_A и ν определены при обсуждении одногрупповой теории, а индексы 1 и 2 использованы для того, чтобы различить быструю и тепловую группы соответственно. $\Sigma_{R,1}$ обозначает макроскопическое сечение замедления для нейтронов быстрой группы; член $\Sigma_{R,1}\Phi_1$ представляет скорость ухода нейтронов из быстрой группы. Член источника медленных или тепловых нейтронов $\rho\Sigma_{R,1}\Phi_1$ соответствует той части быстрых нейтронов, которые в процессе замедления избегают резонансного захвата и, следовательно, присоединяются к тепловой группе.

Вероятность избежать резонансного захвата ρ рассматривается как не зависящая от энергии величина. Член источника тепловых нейтронов пропорционален потоку быстрых нейтронов, а член источника в быстрой группе $\nu\Sigma_{F,2}\Phi_2$, в свою очередь, пропорционален потоку в тепловой группе и может быть достаточно хорошо представлен в форме $\frac{k}{p}\Sigma_{A,2}\Phi_2$.

Как и в случае одногрупповой модели, обычно используются условия симметрии в центре и равенство нулю потока нейтронов на экстраполированной границе реактора. Длина экстраполяции здесь предполагается постоянной (не зависящей от энергии). Допустим, что распределения как быстрых, так и тепловых нейтронов могут быть представлены в виде линейных комбинаций волновых функций, удовлетворяющих уравнению

$$\nabla^2 \psi + B^2 \psi = 0.$$

Подстановкой этого выражения в двухгрупповые дифференциальные уравнения получены следующие два линейных однородных уравнения:

$$-(D_1 B^2 + \Sigma_{R,1}) \psi_1 + \frac{k}{p} \Sigma_{A,2} \psi_2 = 0$$

и

$$\rho \Sigma_{R,1} \psi_1 - (D_2 B^2 + \Sigma_{A,2}) \psi_2 = 0,$$

из которых видно, что нетривиальное решение существует только при условии

$$(D_1 B^2 + \Sigma_{R,1})(D_2 B^2 + \Sigma_{A,2}) - k \Sigma_{A,2} \Sigma_{R,1} = 0.$$

Это характеристическое уравнение квадратично относительно B^2 :

$$B^4 + \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \right) B^2 - \frac{(k-1)}{L^2 \tau} = 0.$$

Оно имеет два решения:

$$\mu_1^2 = \frac{1}{2} \left[- \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \right) + \sqrt{\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \right)^2 + \frac{4(k-1)}{L^2 \tau}} \right]$$

и

$$-\mu_2^2 = \frac{1}{2} \left[- \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \right) - \sqrt{\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{L^2} \right)^2 + \frac{4(k-1)}{L^2 \tau}} \right].$$

Величины $L^2 = D_2/\Sigma_{A,2}$ и $\tau = D_1/\Sigma_{R,1}$ называют длиной диффузии для тепловой группы и «возрастом» Ферми для быстрой группы соответственно.

Общие решения двухгрупповых уравнений для распределения нейтронов записываются в виде линейной комбинации двух функций T и U :

$$\Phi_1 = AT + CU; \quad \Phi_2 = S_1 AT + S_2 CU,$$

где T и U определяются как решения, соответствующие μ_1^2 и $-\mu_2^2$:

$$\nabla^2 T + \mu_1^2 T = 0 \quad \text{и} \quad \nabla^2 U - \mu_2^2 U = 0.$$

Коэффициенты S получаются в виде

$$S_1 = \frac{\rho \Sigma_{R,1}}{D_2 \mu_1^2 + \Sigma_{A,2}} = \frac{D_1 \mu_1^2 + \Sigma_{R,1}}{\frac{k}{\rho} \Sigma_{A,2}}$$

и

$$S_2 = \frac{\rho \Sigma_{R,1}}{-D_2 \mu_2^2 + \Sigma_{A,2}} = \frac{-D_1 \mu_2^2 + \Sigma_{R,1}}{\frac{k}{\rho} \Sigma_{A,2}}$$

Функции T и U зависят от геометрии. Они даны в виде компонент потока для стандартных геометрий в табл. 1.3.

Т а б л и ц а 1.3

Решения двухгрупповой теории

| Геометрия | Поток | | |
|--------------------------------|--|--|--|
| | компоненты потока в активной зоне | компоненты потока в конечном отражателе | компоненты потока в бесконечном отражателе |
| Бесконечный слой | $\begin{aligned} \Phi_{1C} &= A \cos \mu_1 x + C \operatorname{ch} \mu_2 x \\ \Phi_{2C} &= S_1 A \cos \mu_1 x + S_2 C \operatorname{ch} \mu_2 x \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F \operatorname{sh} \kappa_1 (b - x) \\ \Phi_{2R} &= G \operatorname{sh} \kappa_2 (b - x) + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F e^{-\kappa_1 x } \\ \Phi_{2R} &= G e^{-\kappa_2 x } + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ |
| Бесконечный правильный цилиндр | $\begin{aligned} \Phi_{1C} &= A J_0(\mu_1 r) + C I_0(\mu_2 r) \\ \Phi_{2C} &= S_1 A J_0(\mu_1 r) + S_2 C I_0(\mu_2 r) \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F \left[K_0(\kappa_1 r) - \frac{K_0(\kappa_1 b)}{I_0(\kappa_1 b)} I_0(\kappa_1 r) \right] \\ \Phi_{2R} &= G \left[K_0(\kappa_2 r) - \frac{I_0(\kappa_2 b)}{K_0(\kappa_2 b)} I_0(\kappa_2 r) \right] + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F K_0(\kappa_1 r) \\ \Phi_{2R} &= G K_0(\kappa_2 r) + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ |
| Сфера | $\begin{aligned} \Phi_{1C} &= A \frac{\sin(\mu_1 r)}{\mu_1 r} + C \frac{\operatorname{sh}(\mu_2 r)}{\mu_2 r} \\ \Phi_{2C} &= S_1 A \frac{\sin(\mu_1 r)}{\mu_1 r} + S_2 C \frac{\operatorname{sh}(\mu_2 r)}{\mu_2 r} \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F \frac{\operatorname{sh} \kappa_1 (b-r)}{\kappa_1 r} \\ \Phi_{2R} &= G \frac{\operatorname{sh} \kappa_2 (b-r)}{\kappa_2 r} + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ | $\begin{aligned} \Phi_{1R} &= F \frac{e^{-\kappa_1 r}}{\kappa_1 r} \\ \Phi_{2R} &= G \frac{e^{-\kappa_2 r}}{\kappa_2 r} + S_3 \Phi_{1R} \end{aligned}$ |

Примечание. a — полутолщина активной зоны; b — полутолщина реактора, включая длину экстраполяции.

Уравнения, использованные для описания поля в неразмножающей зоне или отражателе, в рамках двухгрупповой модели имеют вид:

$$\begin{aligned} D_1 \nabla^2 \Phi_1 - \Sigma_{R,1} \Phi_1 &= 0; \\ D_2 \nabla^2 \Phi_2 - \Sigma_{A,2} \Phi_2 + \rho \Sigma_{R,1} \Phi_1 &= 0. \end{aligned}$$

Общее решение для нейтронов быстрой группы в этом случае может быть написано сразу же:

$$\varphi_1 = FV.$$

Здесь использована функция V , определенная как решение волнового уравнения $\nabla^2 V - \kappa_1^2 V = 0$ при $\kappa_1^2 = \Sigma_{R,1}/D_1$. Для тепловой группы κ_2^2 определяется как $\Sigma_{A,2}/D_2$, и поток нейтронов записывается в виде линейной комбинации двух функций W и V :

$$\varphi_2 = GW + S_3 FV,$$

где функция W является решением уравнения

$$\nabla^2 W - \kappa_2^2 W = 0.$$

Величина S_3 рассчитывается с помощью формулы

$$S_3 = \rho \Sigma_{R,1}/D_2 (\kappa_2^2 - \kappa_1^2).$$

Функции V и W показаны как компоненты потока для трех стандартных геометрий в табл. 1.3.

Условие критичности для типичной двухзонной задачи «активная зона — отражатель» может, следовательно, быть записано посредством четырех уравнений: двух для активной зоны и двух для отражателя, с четырьмя неизвестными A, C, F, G , определяемыми с помощью условий непрерывности потока и тока нейтронов на границе сред вместе с заданием уровня мощности. Уравнения представимы в форме детерминанта:

$$\begin{vmatrix} T & U & -V & 0 \\ D_{1C} T' & D_{1C} U' & -D_{1R} V' & 0 \\ S_1 T & S_2 U & -S_3 V & -W \\ S_1 D_{2C} T' & S_2 D_{2C} U' & -S_3 D_{2R} V' & -D_{2R} W \end{vmatrix} = 0.$$

Штрихом обозначены первые производные; все функции и производные вычисляются на поверхности x или $r = a$. Это уравнение может быть приведено к виду

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \\ D_{1C} \bar{T} & D_{1C} \bar{U} & -D_{1R} \bar{V} & 0 \\ S_1 & S_2 & -S_3 & -\bar{W} \\ S_1 D_{2C} \bar{T} & S_2 D_{2C} \bar{U} & -S_3 D_{2R} \bar{V} & -D_{2R} \bar{W} \end{vmatrix} = 0,$$

где чертой отмечены величины, определенные как отношение производной к функции, т. е. $\bar{T} = T'/T$ и т. п. Это условие критичности определяет взаимосвязь между материальными и геометрическими свойствами двухзонного реактора. Знание материальных или геометрических свойств позволяет рассчитать неизвестные свойства с помощью этого уравнения. Прямое его решение в принципе возможно, но является утомительной процедурой, требующей большого объема вычислительной работы. Поэтому перед тем, как решать такие задачи, много усилий было затрачено на создание специальных расчетных методов [36, 37] и форм [38] для осуществления этой цели.

Табл. 1.3 содержит выражения для потоков быстрых и тепловых нейтронов в двухзонной задаче для трех стандартных геометрий — бесконечной плоской пластины, бесконечного правильного цилиндра и сферы. В библиографии [39, 40] можно найти двухгрупповые аналитические решения для других геометрий.

1.2.3. Многогрупповой формализм. Очевидное обобщение двухгрупповой модели приводит к трех-, четырех- и вообще многогрупповому формализму, в котором весь энергетический диапазон разбит на большое число групп. Это

§ 1.3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ МНОГОГРУППОВЫХ ДИФFUЗИОННЫХ УРАВНЕНИЙ

1.3.1. Метод итераций источника. В условиях неприменимости аналитических методов расчеты реакторов часто основываются на процедуре итераций источника. Основана ли расчетная модель на уравнении диффузии, на кинетическом уравнении или на приближенной конечно-разностной схеме, временная зависимость поля (в задаче без внешнего источника) определяется линейным уравнением вида $\partial\varphi/\partial t = A\varphi$. Предположим, что A не зависит от времени и поэтому общее решение может быть записано в экспоненциальной форме e^{At} . Исходя из физического смысла решения [66—69], можно предположить существование единственной функции $\varphi_{max} > 0$ и такой вещественной величины α , что $e^{At}\varphi_{max} = e^{\alpha t}\varphi_{max}$ и $e^{At}\varphi_0/\|e^{At}\varphi_0\| \rightarrow \varphi_{max}$ для произвольной $\varphi_0 > 0$. Тем самым становится возможной реализация итерационной процедуры для расчета фундаментального решения φ_{max} и периода реактора α^{-1} , основанной на свойствах, которым уравнения (если они правильно сформулированы) обязаны своему стохастическому происхождению [70]. Эти свойства естественным образом проявляются в теории преобразований частично упорядоченных линейных пространств [71] — преобразований, которые сохраняют положительность равномерно (в некотором смысле) [72—75]. Для численного расчета [76, 77] нам нужна лишь первоначальная конечно-разностная формулировка этой теории, разработанная Перроном и Фробениусом и изложенная в нескольких хороших книгах по матричной теории [78—80]. Лучшее из них подходит для наших целей книга Варги «Матричный итерационный анализ» [78]. Предполагая, что она доступна любому математику, занимающемуся численным решением уравнений диффузии нейтронов, будем часто ссылаться на эту книгу и многие доказательства здесь опустим. Однако, стоит доказать простую теорему Фробениуса, которая прекрасно иллюстрирует тот факт, что «геометрия» функционального пространства часто вносит ясность в доказательства.

Теорема. Квадратная матрица P с неотрицательными элементами имеет хотя бы одно неотрицательное собственное значение.

Доказательство [81] (рис. 1.1). Частично упорядоченное линейное пространство есть множество всех строк (или векторов) из n вещественных чисел. По определению два вектора $\varphi = (a_1, \dots, a_n)$ и $\psi = (b_1, \dots, b_n)$ удовлетворяют неравенству $\varphi \geq \psi$ тогда и только тогда, когда $a_i \geq b_i$ для всех i .

Базисные векторы $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $e_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, ..., $e_n = (0, 0, \dots, 0, 1)$ определяют выпуклое множество \mathbf{G} для всех векторов вида $c_1e_1 + c_2e_2 + \dots + c_n e_n$, $c_i \geq 0$, $c_1 + \dots + c_n = 1$. Каждый ненулевой вектор $\varphi \geq 0$ определяет одну точку, где \mathbf{G} пронизывается полуплоскостью в направлении φ . Тогда $P\varphi \geq 0$ также определяет такую точку (кроме случая $P\varphi = 0$ для некоторого φ и $\lambda = 0$, являющегося рассматриваемым собственным значением). Таким образом, P порождает непрерывное преобразование \mathbf{G} в себя. Но каждое непрерывное преобразование такого множества в себя должно оставлять некоторую точку неподвижной согласно теореме Брауэра о фиксированной точке [81, 82]. (В частном случае для $n = 2$ доказательство особенно легко провести [83].) Таким образом, для некоторого φ получили, проходящие через φ и $P\varphi$, должны пересекать \mathbf{G} в одной и той же точке, т. е. φ и $P\varphi$ должны быть параллельны: $P\varphi = \lambda\varphi$.

Когда $P = e^{A\Delta t}$ является конечной аппроксимацией эволюционного оператора, могут быть предложены более сильные гипотезы. Матрица будет неприводимой [84] в смысле Фробениуса и даже примитивной [85] (снова в пред-

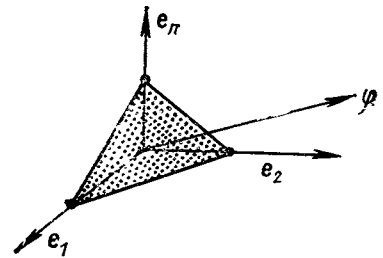


Рис. 1.1. Базисные векторы.

положении, что наследуются некоторые естественные свойства стохастической модели [86]). Кроме того, можно сделать заключение [87]: существует одно наибольшее собственное значение $\lambda_{max} = e^{at}$. Все остальные собственные значения меньше по модулю. Собственное пространство, натянутое на λ_{max} , является одномерным и содержит φ_{max} , все координаты которой положительны. Так, в стационарном состоянии $\alpha = 0$, а e^{At} имеет в качестве спектра внутренность круга единичного радиуса в комплексной плоскости, за исключением одной изолированной точки на границе $\lambda_{max} = 1$. При $t \rightarrow +\infty$ спектр, за исключением этой одной точки, смещается и геометрически стягивается к нулю.

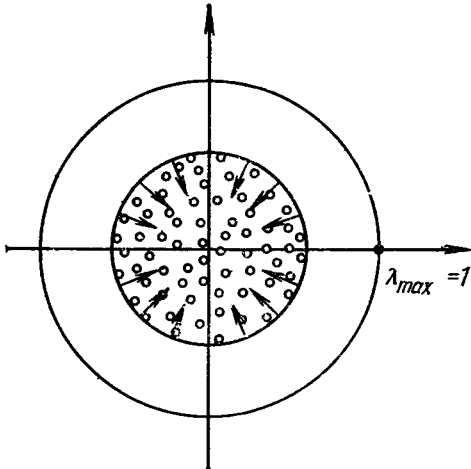


Рис. 1.2. Комплексная плоскость.

Все гармоники исчезают, и остается критический поток φ_{max} , который нигде не равен нулю (рис. 1.2).

В рамках чистой теории операторов динамика реактора может быть сведена к статике квазикритического реактора искусственной подгонкой сечений захвата или деления или среднего числа нейтронов ν на одно деление таким образом, чтобы $\alpha = 0$. В этом разделе затронем вопросы численного решения главной проблемы статики реактора: нахождения $\varphi_{max} > 0$, удовлетворяющего уравнению $e^{At}\varphi_{max} = \varphi_{max}$. Если удастся рассчитать e^{At} , то критический поток может быть найден естественной итерационной процедурой, описанной выше. Но выражение e^{At} само является наиболее

общим решением эволюционного уравнения, и его оценка является наиболее трудоемкой задачей.

Метод итерации источника деления имитирует развитие потока искусственным образом. Во-первых, выражение $e^{At}\varphi_{max} = \varphi_{max}$ превращается дифференцированием в $A\varphi_{max} = 0$. Затем A представляется в виде суммы $A = A_1 + A_2$ так, что существует обратный оператор A_1^{-1} и $-A_1^{-1}A_2$ является примитивным [85] оператором. Уравнение $(A_1 + A_2)\varphi = 0$ заменяется уравнением $-A_1^{-1}A_2\varphi = \varphi$, и это последнее решается итерационным методом Келлога

$$\frac{(-A_1^{-1}A_2)^n \varphi_0}{\|(-A_1^{-1}A_2)^n \varphi_0\|} \rightarrow \varphi_{max}$$

для некоторого пробного вектора $\varphi_0 > 0$.

Условия, накладываемые на A_1 и A_2 , удовлетворяются, как показывает следующий анализ. Пусть A_1 есть оператор миграции нейтронов, полученный в предположении, что $\nu = 0$ в операторе A , а A_2 — оператор источника деления, который только что был вычтен из A . Можно показать*, что функция Грина $-A_1^{-1}$ существует. $-A_1^{-1}A_2\varphi$ характеризует стационарное состояние, которое имеет место, если $A_2\varphi$ может считаться фиксированным внешним источником ($\varphi = \varphi_{max}$).

Эти общие рассуждения не подменяют трудностей численного анализа. К счастью, такой анализ, включая случай $Q \neq 0$ (см. разд. 1.3.4), уже описан в литературе, к которой может быть отослан читатель [89].

* A_1 — образ бесконечно малого источника процесса Маркова без деления (см. гл. 8); $-A_1^{-1}\delta$ — стационарное распределение при наличии единичного источника $Q = \delta$ является образом условного распределения вероятности в пространстве популяций и, следовательно, неотрицательно. Использование этой вероятностной интерпретации налагает ограничения на обычные методы получения дискретных приближений. Примером служит ограничение разностными схемами «положительного типа» (к счастью, такие численные схемы всегда устойчивы [88]). В терминологии Варги $-A_1$ является M -матрицей.

Будем называть шаг от φ до $-A_1^{-1}A_2\varphi$ «внешней итерацией», отличая ее от «внутренних итераций», которые могут быть необходимы, чтобы найти каждое выражение $-A_1^{-1}A_2\varphi$ в тех случаях, когда A_1^{-1} трудно получить прямым расчетом. Такая ситуация реализуется не только в многомерных, но даже и в одномерных задачах с термализацией или в уравнениях с производными высоких порядков.

Вместо того чтобы применять последовательно операторы $(-A_1^{-1}A_2)^n$ к пробному вектору, можно ускорить сходимость, используя некоторую другую последовательность полиномов в матрице $(-A_1^{-1}A_2)$. Полиномы Чебышева, предложенные Фландерсоном и Шортли для этой цели, все еще часто используются [90—93]. Доказательства их эффективности в теории реакторов не могут основываться на диагонализации итерируемой матрицы, так как это допущение не может быть сделано для многогрупповой диффузии нейтронов. Тем не менее, опыт численных расчетов показывает, что метод дает хорошие результаты.

1.3.2. Конечно-разностная аппроксимация. Обратим теперь внимание на проблему обращения оператора миграции нейтронов. Будем обсуждать задачу многогрупповой диффузии нейтронов, задавая неотрицательными функциями Q и ψ (из последней внешней итерации). Функция φ должна удовлетворять уравнению $(\nabla \cdot D \nabla - T_{tot} + T_s)\varphi + S = 0$, где $S = \nu T_f \psi + Q$. По отношению к индексу группы g , оператор-матрица $\nabla \cdot D \nabla - T_{tot}$ является (блочно-)диагональным, т. е. $(\nabla \cdot D \nabla - T_{tot})_{gg'} = 0$ для $g \neq g'$. Наоборот, $T_{s,gg'} = 0$, если $g = g'$, так как рассеяние внутри группы, если оно имеет место, не играет роли и не может быть вычтено из T_{tot} . Введем два оператора:

$$(T_s^d)_{gg'} = \begin{cases} 0, & \text{если } g \leq g', \\ T_{s,gg'}, & \text{если } g > g', \end{cases}$$

$$(T_s^u)_{gg'} = \begin{cases} T_{s,gg'}, & \text{если } g < g', \\ 0, & \text{если } g \geq g'. \end{cases}$$

Тогда

$$T_s = T_s^d + T_s^u.$$

Функцию $\varphi = \lim_{m \rightarrow \infty} \varphi^{(m)}$ обычно находят посредством (см. разд. 1.3.4, рис. 1.3) внутренних итераций Гаусса—Зейделя, т. е.

$$\varphi^{(m+1)} = -(\nabla \cdot D \nabla - T_{tot} + T_s^u)^{-1} (T_s^d \varphi^{(m)} + S),$$

причем этот способ может быть изменен введением релаксационного коэффициента. Свойства сходимости таких алгоритмов можно проанализировать на основе формализма регулярного расщепления, разработанного Варгой [94]. [Для двухмерных задач, когда начинают сказываться пределы памяти машины, Хассит (см. разд. 2.15.2) предложил другой алгоритм. Внутренняя итерация по группам проводится перед внутренней итерацией на линии пространственных узловых точек [95].] Когда $T_s^u = 0$, внутренняя итерация по группам не является необходимой. T_s есть строго нижняя (блочно-)треугольная матрица. Расчет функции φ_g зависит только от значения $\varphi_{g'}$ при $g' < g$, которая к этому моменту уже определена. Необходимо только решить уравнение $(\nabla \cdot D_g \nabla - T_{tot,g}) \varphi_g + s_g = 0$ при $s_g = \sum_{g'=1}^{g-1} T_{s,gg'} \varphi_{g'} + S_g$. Требуется лишь одна прогонка по группам сверху (при $g = 1$) вниз, чтобы полностью получить все функции φ .

Наиболее трудным аспектом расчета, которому будет посвящена оставшаяся часть этого раздела, является обращение оператора $\nabla \cdot D_g \nabla - T_{tot,g}$, действующего на φ_g . Поскольку здесь будут рассмотрены вопросы, касающиеся некоторой произвольной группы, опустим индекс g .

В следующей главе мы рассмотрим задачу, в которой переменные не разделяются и нельзя представить D , Σ_{tot} и S зависящими лишь от одной координаты. Двух- и трехмерные задачи сопряжены со значительно большими трудностями, чем одномерные задачи настоящей главы. Здесь же происходит замена оператора $\nabla \cdot D \nabla$ обычным дифференцированием $r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr}$ в декартовой ($N = 1$), цилиндрической ($N = 2$) или сферической ($N = 3$) системах координат*.

Тогда

$$\nabla \cdot D \nabla = r^{1-N} \frac{\partial}{\partial r} r^{N-1} D(r) \frac{\partial}{\partial r} + C \left(r, r_2, r_3, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3} \right).$$

Приближенные решения для конечномерных плоскопараллельных и цилиндрических реакторов можно получить, используя факторизацию (условное разделение переменных [100]) $\varphi(r, r_2, r_3) = \varphi^{(1)}(r)\varphi^{(2)}(r_2, r_3)$, где $\varphi^{(2)}$ является собственной функцией уравнения $C\varphi^{(2)} = -b^2(r)\varphi^{(2)}$, однозначно определяемой условиями неотрицательности решения, симметрии и граничными условиями. Предположим, например, что сечения зависят только от вертикальной координаты $r = z$ и не зависят от двух горизонтальных координат $r_2 = x$ и $r_3 = y$ внутри системы с границей $\sqrt{x^2 + y^2} = a$ (цилиндрическая пластина или реактор в форме блина). Радиальная зависимость потока может быть найдена в виде бесселевой функции $\varphi^{(2)}(x, y) = J_0\left(\frac{j_{0,1}}{a} \sqrt{x^2 + y^2}\right)$, где $j_{0,1}$ — первый нуль функции J_0 . Горизонтальная утечка интерпретируется в форме поглощения $b^2(r) = D(r) \frac{j_{0,1}^2}{a^2}$ и добавляется к сечению Σ_{tot} . Аналогично для прямоугольной пластины зависимость потока от координат x, y представляется в виде косинусов, для конечных цилиндров с переменными свойствами сечений по радиусу вертикальная зависимость потока представляется косинусом. Факторизация может быть использована даже при наиболее общей зависимости формы потока от координат.

* Простота одномерных алгоритмов способствует поиску однопараметрических семейств поверхностей $x^{(1)} = \text{const}$, так что оператор $\nabla \cdot D \nabla - \Sigma_{tot}$, действующий на функции переменной $x^{(1)}$, превращается в обычный дифференциальный оператор с коэффициентами, зависящими только от $x^{(1)}$. Возможно, удастся разделить оператор Гельмгольца $\nabla^2 + k^2$ в восьми других системах координат (кроме декартовой, цилиндрической или сферической).

Задаваясь некоторым однопараметрическим семейством поверхностей $x^{(1)} = \text{const}$, можно найти два добавочных семейства $x^{(2)} = \text{const}$ и $x^{(3)} = \text{const}$ и образовать криволинейную систему координат, для которой $g^{ij} = 0$, если $i = 1 \neq j$ (полуортогональную систему) [96]. Тогда $\nabla^2 = \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^{(i)}} \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^{(j)}}$ [97] превращается в сумму $\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^{(1)}} \sqrt{g} g^{11} \frac{\partial}{\partial x^{(1)}} + \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,j=2}^3 \frac{\partial}{\partial x^{(i)}} \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^{(j)}}$. Первый член в предыдущем выражении не должен содержать $x^{(2)}$ и $x^{(3)}$. Так как он равен $\frac{1}{\sqrt{g}} \sqrt{g} g^{11} \frac{\partial}{\partial x^{(1)}} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{11})}{\partial x^{(1)}} \frac{\partial}{\partial x^{(1)}}$, то g^{11} и $\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{11})}{\partial x^{(1)}}$ не зависят от $x^{(2)}$ и $x^{(3)}$. Иными словами, $x^{(1)}$ должна быть такой функцией, что выражения $(\nabla x^{(1)})^2$ и $\nabla^2 x^{(1)}$ зависят только от $x^{(1)}$. Говорят, что такие функции определяют изопараметрическое семейство поверхностей (параллельных друг другу и имеющих постоянную среднюю кривизну). К сожалению, было доказано [98, 99], что, за исключением плоскостей, цилиндров и сфер, не может существовать других примеров, даже в ограниченной области. (Конечно, аналитические решения в других различных эллиптических координатных системах все же могут быть получены для некоторых идеализированных случаев.)

Функция $\varphi^{(2)}$ зависит только от геометрии и может быть рассчитана раз и навсегда, прежде чем начнется итерационный процесс. Тогда

$$\begin{aligned} & (\nabla \cdot D \nabla - \Sigma_{tot}) \varphi^{(1)} \varphi^{(2)} = \\ & = \left(r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D(r) \frac{d\varphi^{(1)}}{dr} - \Sigma_{tot} \varphi^{(1)} \right) \varphi^{(2)} - \varphi^{(1)} b^2 \varphi^{(2)}. \end{aligned}$$

После преобразования результирующее одномерное уравнение

$$r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D(r) \frac{d}{dr} \varphi(r) - \sigma(r) \varphi(r) + s(r) = 0$$

должно быть решено относительно $\varphi^{(1)}$. В уравнении мы опустили индекс и обозначили $\sigma = \Sigma_{tot} + b^2$. Для наиболее общих граничных условий отношение $b(r)/D(r) = B$ является постоянной величиной (см. разд. 1.3.4).

Уравнение справедливо на конечном интервале $[r_a, r_b]$ со следующими условиями в конечных точках: $\alpha_a \varphi(r_a) - \beta_a \varphi'(r_a) = \gamma_a$; $\alpha_b \varphi(r_b) + \beta_b \varphi'(r_b) = \gamma_b$; $\alpha_a \geq 0$; $\beta_a \geq 0$; $\alpha_a + \beta_a > 0$; $\alpha_b \geq 0$; $\beta_b \geq 0$; $\alpha_b + \beta_b > 0$ (см. разд. 1.3.4, *Условия на внутренних и внешних границах*). Параметры D и σ должны быть положительными, кусочно-гладкими функциями (с непрерывными производными всюду, кроме, может быть, конечного числа точек разрыва, где существуют односторонние пределы для производных), причем коэффициент диффузии D не должен быть равным нулю. Условия в точках разрыва и однородные условия на границах системы (положим, $\gamma = 0$) автоматически включаются в уравнение, если определить $-r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} + \sigma$ как квазидифференциальный оператор [101, 102]. Область его определения, следовательно, содержит только такие функции, для которых функция $r^{N-1} D \varphi'$ абсолютно непрерывна всюду и $\alpha_a \varphi(r_a) - \beta_a \varphi'(r_a) = 0$, $\alpha_b \varphi(r_b) + \beta_b \varphi'(r_b) = 0$. Можно показать, что обратный ему оператор существует и, действуя на неотрицательные, интегрируемые функции s , преобразует их в неотрицательные решения $\varphi_{\text{однор}}$. Тогда $\varphi_{\text{неоднор}}$ единственным образом определяется расширением этого оператора на случай $-r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} + \sigma \varphi_{\text{неоднор}} = 0$ с неоднородными граничными условиями. Окончательно легко получить $\varphi = \varphi_{\text{однор}} + \varphi_{\text{неоднор}}$.

Следующим шагом является вывод простой конечно-разностной аппроксимации этого дифференциального уравнения. Чтобы можно было использовать координаты Лагранжа, которые применяются в расчетах безопасности реакторов (см. гл. 7), введем переменную ширину интервалов конечно-разностной сетки. Другими словами, конечно-разностное уравнение и метод решения остаются абсолютно теми же, что описаны Эрлихом и Гурвицем [42] в их первой работе по созданию одномерных многогрупповых диффузионных алгоритмов.

Ток нейтронов $J(r)$ в точке r представляется в виде $J = r^{N-1} D(r) \varphi'(r)$. Уравнение второго порядка эквивалентно двум уравнениям первого порядка относительно двух неизвестных

$$\frac{d}{dr} J = (\sigma \varphi - s) r^{N-1}; \quad \frac{d}{dr} \varphi = J / r^{N-1} D.$$

Пусть r_k — узлы конечно-разностной сетки, на которой аппроксимируется функция φ , включая все внутренние и внешние границы. Вспомогательная функция J будет определена на вспомогательной системе узловых точек $r_{k+1/2} = \frac{1}{2}(r_k + r_{k+1})$, расположенных в середине интервалов основной сетки $[r_k, r_{k+1}]$.

Заменим теперь два дифференциальных уравнения интегральными

$$J_{k+1/2} - J_{k-1/2} = \int_{r_{k-1/2}}^{r_{k+1/2}} (\sigma\varphi - s) r^{N-1} dr,$$

$$\varphi_{k+1} - \varphi_k = \int_{r_k}^{r_{k+1}} \frac{J dr}{r^{N-1} D},$$

где для любой функции $f_k = f(r_k)$. Эти точные уравнения могут быть представлены в приближенной форме, если аппроксимировать подынтегральные выражения. Так как φ и J имеют ограниченные производные (односторонние на границах раздела сред), то мы заменим их в интервале: $(r_{k-1/2}, r_{k+1/2})$ их значениями при r_k . Величины σ и s могут иметь разрывы в точке r_k , если эта точка находится на границе между двумя различными зонами, но, во всяком случае, требуется существование их пределов с правой и левой сторон границы. Итак, аппроксимируем первый интеграл следующим выражением:

$$J_{k+1/2} - J_{k-1/2} = \int_{r_{k-1/2}}^{r_k} + \int_{r_k}^{r_{k+1/2}} = (\sigma_k^- \varphi_k - s_k^-) r_k^{N-1} \frac{\Delta r_{k-1/2}}{2} +$$

$$+ (\sigma_k^+ \varphi_k - s_k^+) r_k^{N-1} \frac{\Delta r_{k+1/2}}{2},$$

где $\Delta r_{k+1/2} = r_k - r_{k-1}$. Все функции имеют ограниченные производные в интервале (r_k, r_{k+1}) . Аппроксимируем их под знаком интеграла с помощью значений этих функций в точке $r_{k+1/2}$:

$$\varphi_{k+1} - \varphi_k = \int_{r_k}^{r_{k+1}} = \frac{J_{k+1/2} \Delta r_{k+1/2}}{D_{k+1/2} r_{k+1/2}^{N-1}}.$$

Теперь исключим J . Разрешая второе уравнение относительно $J_{k+1/2}$ и подставляя в первое уравнение, получим

$$\frac{D_{k+1/2} r_{k+1/2}^{N-1}}{\Delta r_{k+1/2}} (\varphi_{k+1} - \varphi_k) - \frac{D_{k-1/2} r_{k-1/2}^{N-1}}{\Delta r_{k-1/2}} (\varphi_k - \varphi_{k-1}) =$$

$$= \frac{\sigma_k^- \Delta r_{k-1/2} + \sigma_k^+ \Delta r_{k+1/2}}{2} r_k^{N-1} \varphi_k - \frac{s_k^- r_{k-1/2} + s_k^+ r_{k+1/2}}{2} r_k^{N-1}. \quad (1.5)$$

После преобразований получим трехточечную рекуррентную формулу для φ_k в виде

$$a_k \varphi_{k+1} - b_k \varphi_k + c_k \varphi_{k-1} = -d_k, \quad (1.6)$$

где $a_k = D_{k+1/2} / \Delta r_{k+1/2}$, $c_k = a_{k-1}$,

$$b_k = a_k + c_k + \frac{1}{2} (\sigma_k^- \Delta r_{k-1/2} + \sigma_k^+ \Delta r_{k+1/2}) r_k^{N-1}$$

и

$$d_k = \frac{1}{2} (s_k^- \Delta r_{k-1/2} + s_k^+ \Delta r_{k+1/2}) r_k^{N-1}.$$

Член второго порядка — наиболее чувствительная часть этой аппроксимации. Предположим, что D и φ имеют ограниченные вторую и третью производные

соответственно в некоторой окрестности r_k . Тогда согласно разложению Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

$$\begin{aligned} & \frac{(Dr^{N-1})_{k+1/2} \frac{\varphi_{k+1} - \varphi_k}{\Delta r_{k+1/2}} - (Dr^{N-1})_{k-1/2} \frac{\varphi_k - \varphi_{k-1}}{\Delta r_{k-1/2}}}{\frac{1}{2} (\Delta r_{k-1/2} + \Delta r_{k+1/2})} = \\ & = \frac{(Dr^{N-1})_{k+1/2} (\varphi'_{k+1/2} + O(\Delta r_{k+1/2}^2)) - (Dr^{N-1})_{k-1/2} (\varphi'_{k-1/2} + O(\Delta r_{k-1/2}^2))}{\frac{1}{2} (\Delta r_{k-1/2} + \Delta r_{k+1/2})} = \\ & = \frac{(Dr^{N-1} \varphi')_{k+1/2} - (Dr^{N-1} \varphi')_{k-1/2}}{\frac{1}{2} (\Delta r_{k-1/2} + \Delta r_{k+1/2})} + O(\max \Delta r_{k\pm 1/2}) = \\ & = (Dr^{N-1} \varphi')'_k + O(\max \Delta r_{k\pm 1/2}). \end{aligned}$$

Аппроксимация имеет точность первого порядка относительно $\max \Delta r_{k\pm 1/2}$. Однако этот локальный критерий нельзя считать наиболее подходящим. Поскольку измеряемые величины соответствуют усредненным с весом функциям φ (а не их значениям в некоторых точках), то должны использоваться критерии, которые отвечают слабой топологии на пространстве функций (равномерная сходимости не является обязательно сильной).

Полный анализ ошибок округления для этого уравнения был представлен А. Н. Тихоновым и А. А. Самарским в большой статье, посвященной исследованию сеток с постоянной длиной интервалов [104], и в более поздних работах, касающихся сеток с переменной длиной интервалов [105, 106]. Они рассмотрели также схемы с любым произвольным порядком точности расчета [106, 107], но опыт реакторных расчетов показывает, что в этом нет особой необходимости для рассматриваемых задач.

Разрывы в сечениях на границах раздела зон являются одним из основных источников ошибок. Поэтому желательно приложить некоторые добавочные усилия и потратить машинное время на расчет по специальному алгоритму. Этот алгоритм используется в достаточно редких узловых точках, там, где проходит граница между зонами.

Функция J непрерывна и выражение $D(r)r^{N-1}$ отлично от нуля на любой внутренней границе ($r^{N-1} = 0$ является границей). Поэтому $((D(r)r^{N-1})^{-1})_k^\pm$ и, следовательно, $\left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_k^\pm$ должны там существовать. В силу непрерывности $J_k^- = J_k^+$, так что $D_k^- \left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_k^- = D_k^+ \left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_k^+$. Чтобы получить конечно-разностную аппроксимацию производной $\left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_k^\pm$ для подстановки в это уравнение, расширим каждую зону за ее границы путем линейной экстраполяции величин D , σ и s . Затем рассчитаем фиктивную функцию $\varphi(r_k \pm \Delta r_{k\mp 1/2}) = \varphi_{k\pm}$ в этой фиктивной зоне с помощью соотношений

$$\begin{aligned} & \frac{D_k^-}{\Delta r_{k-1/2}} r_{k+1/2}^{N-1} (\varphi_{k+} - \varphi_k) - r_{k-1/2}^{N-1} (\varphi_k - \varphi_{k-}) = \\ & = \frac{\sigma_k^- + \sigma_k^+}{2} \Delta r_{k-1/2} r_k^{N-1} \varphi_k - \frac{s_k^- + s_k^+}{2} \Delta r_{k-1/2} r_k^{N-1}; \end{aligned} \quad (+)$$

$$\begin{aligned} & \frac{D_k^+}{\Delta r_{k+1/2}} r_{k+1/2}^{N-1} (\varphi_{k+1} - \varphi_k) - r_{k-1/2}^{N-1} (\varphi_k - \varphi_{k-}) = \\ & = \frac{\sigma_k^- + \sigma_k^+}{2} \Delta r_{k+1/2} r_k^{N-1} \varphi_k - \frac{s_k^- + s_k^+}{2} \Delta r_{k+1/2} r_k^{N-1}. \end{aligned} \quad (-)$$

Разрешим выражения (\pm) относительно $\varphi_{k\pm}$ и подставим в разностную аппроксимацию $D_k^- (\varphi_{k+} - \varphi_{k-1}) / (2\Delta r_{k-1/2}) = D_k^+ (\varphi_{k+1} - \varphi_{k-}) / (2\Delta r_{k+1/2})$ закона сохранения нейтронов при переходе через границу зоны. В результате получим трехчленную формулу относительно φ_{k-1} , φ_k и φ_{k+1} , подобную приведенной выше. Производные, содержащиеся в граничном условии, могут быть преобразованы аналогичным образом.

В случае кусочно-постоянной функции D можно с помощью преобразования Пуассона перейти от сферического случая ($N = 3$) к плоскому ($N = 1$):

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} &= \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \cdot \frac{1}{r} r = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} r^2 \left(\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} \right) r = \\ &= \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} - 1 \right) r = \frac{1}{r^2} \left(1 \frac{d}{dr} + r \frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} \right) r = \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 r. \end{aligned}$$

Значит, два лапласиана преобразованиями подобия трансформируются один в другой, если использовать подстановку $r\varphi(r) = \psi(r)$ вместо $\varphi(r)$. Новое уравнение внутри каждой зоны имеет вид $D\psi'' - \sigma\psi + rs = 0$. На границах зон имеет место условие $D^-(r)(r\psi'(r) - \psi(r)) = D^+(r\psi'(r) - \psi(r))$, так как

$$J = r^2 D \frac{d}{dr} \left(\frac{\psi}{r} \right) = D(r\psi' - \psi).$$

Естественное условие $\varphi'(0) = 0$ в центре сферы переходит, очевидно, в условие $\psi(0) = [r\varphi(r)]_{r=0} = 0$. Обратное утверждение не очевидно, но тем не менее справедливо. Можно доказать, что эти два граничных условия являются эквивалентными.

Когда φ равна нулю в окрестности внешних границ, то $\frac{\partial}{\partial r} \int \varphi(r)r^{N-1}dr = \int r^{1-N} (Dr^{N-1}\varphi')' r^{N-1} dr = [Dr^{N-1}\varphi'] = 0$. Конечно-разностная аппроксимация должна обладать теми же свойствами. Определим левый и правый разностные операторы Δ^- и Δ^+ соотношениями $(\Delta^- \varphi)_k = \varphi_k - \varphi_{k-1}$, $(\Delta^+ \varphi)_k = \varphi_{k+1} - \varphi_k$ и диагонализированный оператор A соотношением $(A\varphi)_k = D_{k+1/2} r^{N-1} \varphi_k / \Delta r_{k+1/2}$. После этого левая часть уравнения (1.5) запишется как $\Delta^- A \Delta^+ \varphi$. [Весовой фактор $(\Delta r_{k-1/2} + \Delta r_{k+1/2})/2$ перенесен вправо для интегрирования по правилу трапеций.] Выражение $\sum_k (\Delta^- A \Delta^+ \varphi)_k = \sum_k (A \Delta^+ \varphi)_k - \sum_k (A \Delta^- \varphi)_{k-1}$ равно нулю, поэтому оператор $\Delta^- A \Delta^+$ действительно имеет надлежащие балансные свойства. Добавляя члены утечки, рассеяния и источника, можно составить полезную «балансную» проверку расчета.

Оператор $\exp\left(r^{1-N} \frac{d}{dr} Dr^{N-1} \frac{d}{dr}\right)$ сохраняет частичное упорядочение [109]. Если $\varphi \geq 0$, то $\exp\left(r^{1-N} \frac{d}{dr} Dr^{N-1} \frac{d}{dr}\right) \varphi \geq 0$ для всех $t \geq 0$. Оператор $e^{\Delta^- A \Delta^+ t}$ сохраняет порядок для всех $t \geq 0$, тогда и только тогда, когда $(\Delta^- A \Delta^+)_{ij} \geq 0$ для $i \neq j$.

Доказательство. Предположим, что указанное условие удовлетворено. Тогда $e^{\Delta^- A \Delta^+ t} = e^{-\lambda t} e^{(\lambda I + \Delta^- A \Delta^+) t} = \sum_m e^{-\lambda t} (\lambda I + \Delta^- A \Delta^+)^m t^m / m!$ не имеет отрицательных матричных элементов, если $\lambda = \max_i |(\Delta^- A \Delta^+)_{ii}|$. Наоборот, предположим $(\Delta^- A \Delta^+)_{ij} < 0$ для некоторого $i \neq j$. Тогда $(e^{\Delta^- A \Delta^+ t})_{ij} = (\Delta^- A \Delta^+ t)_{ij} t + O(t^2) < 0$ для малых $t > 0$. Но, очевидно, это условие удовлетворяется.

В заключение мы должны показать, что единственная функция φ , определенная рекуррентной формулой (1.6), будет неотрицательной функцией, если

в системе есть источник [76, 110]. Из свойств консервативности, упорядоченности, самосопряженности и неприводимости оператора $e^{[\Delta^+ A \Delta^-]t}$ (как обсуждалось выше) следует, что $[\Delta^+ A \Delta^-]_{i, i \pm 1} > 0$ и $-[\Delta^+ A \Delta^-]_{ii} = [\Delta^+ A \Delta^-]_{i, i-1} + [\Delta^+ A \Delta^-]_{i, i+1}$ при условии, что оператор $[\Delta^+ A \Delta^-]$ трехдиагонален. Добавление к оператору $[\Delta^+ A \Delta^-]$ дискретной аппроксимации $-\sigma$, положительной диагональной матрицы, может только преобразовать последнее равенство в неравенство \geq . Поэтому в рекуррентной формуле $a_k > 0$, $c_k > 0$ и $b_k \geq a_k + c_k$. Если $\varphi_k < 0$, то $-b_k \varphi_k > -(a_k + c_k) \varphi_k$, так что $a_k \varphi_{k+1} - (a_k + c_k) \varphi_k + c_k \varphi_{k-1} < 0$ и $a_k (\varphi_{k+1} - \varphi_k) < c_k (\varphi_k - \varphi_{k-1})$. Следовательно, если $\varphi_k - \varphi_{k-1} \leq 0$, то неравенство сохраняется для $\varphi_{k+1} - \varphi_k$ и для всех последующих разностей. Функция φ постоянно возрастает по модулю, оставаясь отрицательной, и не может равняться нулю на правой экстраполированной границе. С другой стороны, если $\varphi_k - \varphi_{k-1} > 0$, то $\varphi_{k-1} < 0$ и неравенство $a_{k-1} (\varphi_k - \varphi_{k-1}) < c_{k-1} (\varphi_{k-1} - \varphi_{k-2})$ приводит к тому, что $\varphi_{k-1} - \varphi_{k-2} > 0$, равно как и все предыдущие разности. В этом случае функция φ постоянно возрастает по модулю по направлению к левой границе, оставаясь отрицательной, и не может равняться нулю на левой экстраполированной границе. Однородные условия Дирихле не могут быть удовлетворены. Также не могут быть соблюдены однородные условия Неймана. (Они могут быть получены, если продлить свойства среды D за граничную точку, ввести там фиктивную функцию φ_{-1} и потребовать $\varphi_{-1} = \varphi_{+1}$, что невозможно, если $\varphi_1 - \varphi_0 > 0$ и $\varphi_0 - \varphi_{-1} > 0$.)

Итак, однородные граничные условия с неотрицательным источником не могут быть удовлетворены, если не предположить, что $\varphi \geq 0$. (Смешанные однородные условия могут быть исключены экстраполяцией.) Неоднородные условия должны требовать положительности потока на границе, скажем, для определенности на левой границе. Выказанные выше соображения могут быть применены к тому значению k , для которого $\varphi_k < 0$, так как $\varphi_k - \varphi_{k-1} \leq 0$.

Неотрицательные источники деления вводятся и исправляются в каждой внешней итерации.

1. 3. 3. Решение одномерных конечно-разностных уравнений. Рекуррентная формула относительно φ_k эквивалентна матричному уравнению

$$M\varphi = d, \quad (1.7)$$

где

$$M = \begin{pmatrix} b_0 & -a_0 & 0 & \dots & 0 \\ -a_0 & b_1 & -a_1 & \dots & 0 \\ 0 & -a_1 & b_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & & b_N \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} d_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}.$$

Одним из привлекательных путей решения уравнений (когда аналитические методы, описанные в § 1.2, не подходят для этой цели) мог бы явиться путь обращения матрицы M раз и навсегда. Тогда ее можно было бы периодически использовать во внешних итерациях. Вследствие симметрии и даже положительной определенности обращение нетрудно сделать тривиальным способом путем поворота и диагонализации. Эта матрица является тридиагональной в ее естественной форме, поэтому можно использовать хорошие алгоритмы для диагонализации [111]. Однако такие большие системы, которые мы рассматриваем, лучше всего решать методом прогонки, который будет описан в этом разделе. Подход к этому методу может быть основан на матричной факторизации [112, 113]. Матрица M имеет единственное представление [114] $U^*AU = M$, где U — единичная верхняя треугольная матрица (элементы ниже главной диагонали равны нулю, а на главной диагонали — единице), и A — положи-

тельно определенная матрица. Матрица U отыскивается методом Гаусса в процессе внешней прогонки. Умножение матрицы M слева на матрицу

$$L_0 = \begin{pmatrix} b_0^{-1} & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}$$

превращает ее в

$$\begin{pmatrix} 1 & -u_0 & 0 & \dots \\ -a_0 & b_1 & -a_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix},$$

где $u_0 = a_0/b_0$. Умножая теперь слева последнюю матрицу на L_1 , получаем

$$L_1 L_0 M = \begin{pmatrix} 1 & -u_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -u_1 & 0 & \dots \\ 0 & -a_1 & b_2 & -a_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix}, \text{ где } L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_0}{b_1 - a_0 u_0} & \frac{1}{b_1 - a_0 u_0} & \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Продолжая указанную процедуру, определяем с помощью рекуррентных формул

$$u_n = a_n / (b_n - a_{n-1} u_{n-1}),$$

пока, наконец, не получим

$$U = L_N \dots L_0 M = \begin{pmatrix} 1 & -u_0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -u_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Одновременно на этой прогонке рекуррентно определим $v = L_N \dots L_0 d$ с помощью соотношений $v_0 = (L_0 d)_0 = d_0/b_0$ и $v_n = (L_n \dots L_0 d)_n = (a_{n-1} v_{n-1} + d_n) / (b_n - a_{n-1} u_{n-1})$. Теперь можно получить уравнение относительно ψ в форме $U\psi = v$ и решить его на внутренней прогонке с помощью последовательной обратной подстановки $\psi_N = v_N$ и $\psi_{n-1} = v_{n-1} + u_{n-1} \psi_n$. Можно показать, что эта процедура при счете является устойчивой [115, 116].

Из такого векторно-матричного представления не видно, что оно имеет особые преимущества в описании диффузии нейтронов перед более общими методами решения обычных дифференциальных уравнений. Если оба граничных условия заданы в одной и той же граничной точке, то уравнение может быть решено по обычной стандартной схеме интегрирования, начиная с этой точки. Однако если граничные условия заданы на каждом из концов интервала, где решается уравнение, то интегрирование начинается с одного из концов и ведется таким образом, чтобы соблюсти условие на другом конце. Общий метод [117] состоит в нахождении какого-либо решения ψ неоднородного уравнения, например, в нашем случае

$$r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} D \frac{d}{dr} \psi - \sigma \psi = -s,$$

удовлетворяющего неоднородному граничному условию $\alpha_a \psi(r_a) + \beta_a \psi'(r_a) = \gamma_a$, с помощью численного интегрирования, начиная с точки r_a . Далее на-

хотя какое-либо ненулевое решение χ соответствующего однородного уравнения

$$r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} \chi - \sigma \chi = 0,$$

удовлетворяющего однородному условию $\alpha_a \chi(r_a) + \beta_a \chi'(r_a) = 0$. Тогда $\psi + \lambda \chi$ будет удовлетворять исходному неоднородному уравнению и граничному условию при r_a для произвольной константы λ . Таким образом, нужно подобрать λ так, чтобы функция $\varphi = \psi + \lambda \chi$ удовлетворяла другому граничному условию $\alpha_b \varphi(r_b) + \beta_b \varphi'(r_b) = \gamma_b$: $\lambda = (\gamma_b - \alpha_b \psi(r_b) - \beta_b \psi'(r_b)) / (\alpha_b \chi(r_b) + \beta_b \chi'(r_b))$. (Знаменатель не равен нулю тогда и только тогда, когда источник s единственным образом определяет φ , т. е. тогда и только тогда, когда оператор $r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} - \sigma$ обратим.)

Таким образом, в принципе задачу можно решить посредством двух интегрирований, начиная с точки r_a . Однако в этом случае ошибки округления могут накапливаться экспоненциально в процессе интегрирования. Чтобы избежать этого, сотрудником KAPL Старком [118] для расчетов реакторов был предложен метод прогонки. Этим был сделан важный вклад в теорию дифференциальных уравнений. В Советском Союзе этот метод привлек большое внимание после обсуждения в 1953—1954 гг. на известных семинарах Гельфанда при Московском университете. Независимые работы русских ученых [119—122] являются весьма ценными благодаря большому вкладу, внесенному русской математической школой в прикладную математику.

Физическая основа, стоящая за этим численным аппаратом, подобна той, что связана с уравнениями переноса электричества в терминах импеданса, предложенными в работах Пирса, Волкера, Вакса и Щелкунова [123] и Редхефера [124]. Имеется также связь с идеями инвариантного вложения Амбарцумяна и других [125, 126] и с «альбедным» подходом Рибарича [127, 128]. Для нас существо дела может быть объяснено с помощью процессов Маркова [1] и все преобразования могут быть интерпретированы в терминах марковского процесса [129, 130].

Способ решения нетрудно выбрать из стандартных методов [131, 132] факторизации линейных дифференциальных операторов и превращения их в произведение операторов с производными первого порядка:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d}{dx} \right)^n + p_1(x) \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-1} + \dots + p_n(x) = \\ & = \left(\frac{d}{dx} + \alpha_1(x) \right) \left(\frac{d}{dx} + \alpha_2(x) \right) \dots \left(\frac{d}{dx} + \alpha_n(x) \right). \end{aligned}$$

Часто такой оператор инвариантен по отношению к некоторым преобразованиям, так что факторизация приводит к точным аналитическим решениям [133]. Но реальные модели реакторов, как и большинство инженерных приборов, обычно не имеют простых симметричных форм. Тогда необходимо найти все α , указанные выше.

Пусть мы пытаемся провести факторизацию вида

$$r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr} - \sigma = \left(r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} - \frac{\alpha}{D} \right) \left(D \frac{d}{dr} + \alpha \right).$$

Из прямой подстановки видно, что это уравнение справедливо, если α удовлетворяет уравнению Рикатти $r^{1-N} \frac{d}{dr} r^{N-1} \alpha = -\sigma + \frac{\alpha^2}{D}$ (в соответствии с общей связью, существующей между уравнениями Рикатти и линейными уравнениями второго порядка [134]).

Исходное уравнение второго порядка теперь заменилось тремя уравнениями первого порядка

$$\frac{(r^{N-1} \alpha)'}{r^{N-1}} - \frac{\alpha^2}{D} = -\sigma, \quad (1.8)$$

$$\frac{(r^{N-1} \omega)'}{r^{N-1}} - \frac{\alpha \omega}{D} = -s, \quad (1.9)$$

$$D\varphi' + \alpha\varphi = \omega. \quad (1.10)$$

На «внешней» прогонке уравнение (1.8) решается относительно α , а (1.9) — относительно ω . Затем при «внутренней» прогонке уравнение (1.10) решается относительно φ .

Решением уравнения (1.8) является $\alpha = -D\mathcal{X}'/\mathcal{X}$. Поэтому можно определить \mathcal{X} по формуле $\mathcal{X} = \exp\left(-\int \frac{\alpha}{D} dr\right)$. [При численном интегрировании величину \mathcal{X} можно найти еще более простым путем. Так как выражения (1.8) и $(r^{N-1}D\mathcal{X}')'r^{1-N} - \sigma\mathcal{X} = 0$ связаны соотношением $\alpha = -D\mathcal{X}'/\mathcal{X}$, то в соответствующей конечно-разностной аппроксимации $\alpha_k = -D_k(\mathcal{X}_{k+1} - \mathcal{X}_{k-1})/\mathcal{X}_k$.] Заметим, что эти уравнения уже неявно содержат условия на внутренних границах. Параметр $\alpha = -D\mathcal{X}'/\mathcal{X}$ является абсолютно непрерывной функцией всюду в интервале $r_a < r < r_b$, включая внутренние границы, и, следовательно, имеет квазипроизводные в этом интервале [135].

Подставив $\alpha = -D\mathcal{X}'/\mathcal{X}$ в (1.10), получим $D(\varphi'\mathcal{X} - \varphi\mathcal{X}') = \mathcal{X}\omega$. Поэтому

$$\begin{aligned} (r^{N-1} \mathcal{X}\omega)' / r^{N-1} &= (r^{N-1} D(\varphi'\mathcal{X} - \varphi\mathcal{X}')) / r^{N-1} = \\ &= ((r^{N-1} D\varphi')' \mathcal{X} - \varphi (r^{N-1} D\mathcal{X}')') / r^{N-1} = -s\mathcal{X}. \end{aligned}$$

(В случае N -мерной задачи перед разделением переменных это соответствует использованию второй теоремы Грина в области, ограниченной

$r = \text{const}$ [108].) Следовательно, $[r^{N-1} \mathcal{X}\omega]_{r_a}^{r_b} = -\int_{r_a}^{r_b} s\mathcal{X}r^{N-1} dr$. Введя определение $W = r^{N-1} \mathcal{X}\omega$, можно заменить (1.9) простой квадратурой

$$W(r_b) = W(r_a) - \int_{r_a}^{r_b} s\mathcal{X}r^{N-1} dr, \quad (1.11)$$

а затем и уравнение (1.10) уравнением

$$\varphi\mathcal{X}' - \varphi'\mathcal{X} = W/Dr^{N-1}, \quad (1.12)$$

которое будет полезно также при определении граничных условий. Так как из $\alpha_a \mathcal{X}(r_a) + \beta_a \mathcal{X}'(r_a) = 0$ вытекает $\alpha(r_a) = D(r_a) \frac{\alpha_a}{\beta_a} = -D(r_a) \frac{\mathcal{X}'(r_a)}{\mathcal{X}(r_a)}$, то это обеспечивает граничное условие для α .

Из выражения

$$\begin{aligned} \omega(r_a) &= D(r_a)\varphi'(r_a) + \alpha(r_a)\varphi(r_a) = D(r_a)\left(\varphi'(r_a) + \frac{\alpha_a}{\beta_a}\varphi(r_a)\right) = \\ &= \frac{D(r_a)}{\beta_a}(\alpha_a\varphi(r_a) + \beta_a\varphi'(r_a)) = D(r_a)\frac{\gamma_a}{\beta_a} \end{aligned}$$

следует граничное условие для ω .

Случай $\beta_a = 0$ не вызывает существенных затруднений: α^{-1} также удовлетворяет уравнению Рикатти, что имеет место и для любого дробно-линейного преобразования $\frac{A\alpha + B}{C\alpha + D}$, $\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = 1$ параметра α . (Например, $-A = B = C = D = 1/\sqrt{2}$ дает условие «отражения» [103, 136].) Использование вы-

ражений (1.11) и (1.12) вместо (1.9) и (1.10) позволяет обойтись без преобразований α , так как χ и χ' используются в качестве его однородных координат.

Теперь при «внутренней» прогонке начнем интегрирование (1.10) с точки r_b , предполагая $\varphi(r_b)$ и $\varphi'(r_b)$ однозначно определенными как решения уравнений

$$\alpha_b \varphi(r_b) + \beta_b \varphi'(r_b) = \gamma_b,$$

$$\alpha(r_b) \varphi(r_b) + D(r_b) \varphi'(r_b) = \omega(r_b)$$

(решение существует и однозначно, так как равенство

$$0 = \begin{vmatrix} \alpha_b & \beta_b \\ \alpha(r_b) & D(r_b) \end{vmatrix} = D(r_b) \begin{vmatrix} \alpha_b & \beta_b \\ -\frac{\chi'(r_b)}{\chi(r_b)} & 1 \end{vmatrix} = D(r_b) \left(\alpha_b + \beta_b \frac{\chi'(r_b)}{\chi(r_b)} \right)$$

подразумевает, что χ удовлетворяет однородному граничному условию при r_b). При r_a имеет место равенство $D(r_a)\varphi'(r_a) + \alpha(r_a)\varphi(r_a) = \omega(r_a)$, т. е. $D(r_a)\varphi'(r_a) + D(r_a)\frac{\alpha_a}{\beta_a}\varphi(r_a) = D(r_a)\frac{\gamma_a}{\beta_a}$ и $\alpha_a\varphi(r_a) + \beta_a\varphi'(r_a) = \gamma_a$. Функция φ удовлетворяет истинным граничным условиям при r_a .

Эти преобразования можно интерпретировать как некоторую разновидность метода вариации постоянных Лагранжа. Рассмотрим неоднородную задачу как возмущение однородной, полагая $\varphi = c\chi$, где константа c должна быть проварьирована. Являясь отношением двух решений, она будет стремиться остаться в разумных границах. Уравнение (1.10), выраженное в форме этого отношения, есть $D\chi\left(\frac{\varphi}{\chi}\right)' = \omega$. При указанной замене функций оператор $\frac{d}{dr}$

переходит в $C = \chi \frac{d}{dr} \chi^{-1}$. Сопряженный ему оператор имеет вид $C^* = \frac{r^{1-N}}{\chi} \frac{d}{dr} r^{N-1} \chi$. Уравнения (1.9) и (1.10) превращаются в $C^*\omega = -s$ и $DC\varphi = \omega$ соответственно. Исходное уравнение в факторизованной форме имеет вид $C^*DC\varphi = -s$. Задачу можно свести к двум квадратурам: $\omega = \frac{-s r^{1-N}}{\chi} \int \chi s r^{N-1} dr$ и $\varphi = \chi \int \frac{\omega dr}{D\chi}$.

1.3.4. Некоторые алгоритмы и их характеристики. В настоящее время решения многогрупповых уравнений стандартизованы. Процедура итераций источника (разд. 1.3.1) обычно используется в программе для решений системы конечно-разностных уравнений (разд. 1.3.2). Ряд полезных алгоритмов был включен в такие программы с учетом конструктивных особенностей ЭВМ и конкретных целей расчетов.

Процедура поиска критичности. При решении одномерных многогрупповых уравнений диффузии были использованы, как только это позволили возможности ЭВМ, различные формулы для проверки сходимости метода итераций источника. Как указывал Гелбард [137], коэффициент размножения часто может сходиться гораздо быстрее, чем устанавливается форма нейтронного поля. Поэтому в большинство расчетных программ включаются различные тесты сходимости. Тест сходимости коэффициента размножения или собственного числа задачи обычно строится как мера его абсолютного или относительного изменения в двух последующих итерациях

$$|k_{eff}^i - k_{eff}^{i-1}| < \varepsilon_1 \quad \text{или} \quad \left| \frac{k_{eff}^i - k_{eff}^{i-1}}{k_{eff}^i} \right| < \varepsilon_1,$$

где ε_1 — входной (задаваемый) параметр и i — номер итерации. Сходимость распределения потока нейтронов определяется с использованием более ло-

кальной меры изменения в члене источника, например,

$$\left| \frac{\lambda_{max}^i - \lambda_{min}^i}{\lambda_{max}^i} \right| < \varepsilon_2, \quad \text{где } \lambda_{max}^i = \max_n \frac{S_{F,n}^i}{S_{F,n}^{*i-1}};$$

$$\lambda_{min}^i = \min_n \frac{S_{F,n}^i}{S_{F,n}^{*i-1}}; \quad S_{F,n}^i = \sum_g \nu \Sigma_{F,g} \Phi_g^i(r_n) \quad \text{и} \quad S_{F,n}^{*i} = \frac{S_{F,n}^i}{\sum_n S_{F,n}^i},$$

или $\left| \sum_{n \in R} S_{F,n}^{*i-1} dn - \sum_{n \in R} S_{F,n}^i dn \right| < \varepsilon_2$ для каждой зоны или области R .

В этом тесте ε_2 — задаваемый параметр, g — номер энергетической группы, n — номер точки в конечно-разностной сетке и dn — элемент объема, связанный с данной точкой в соответствии с квадратурной формулой.

С включением таких тестов сходимости машина может быть направлена на поиск критической системы путем изменения некоторого параметра системы по определенному закону для получения критической величины этого параметра. На практике входными параметрами являются или первоначальная величина и предполагаемая скорость изменения (величина производной) или вторая оценка критического параметра (при изменении свойств системы). Для расчета последующих величин критических параметров используются различные линейные и квадратичные формулы. Программы составляются с возможностью использования изменения большого числа различных параметров: концентрации материалов и поглотителей нейтронов, величин баклингов, геометрии реактора и конфигурации стержней управления. Эти вопросы будут подробно обсуждены в дальнейшем.

В многогрупповых программах, созданных в Аргоннской национальной лаборатории [51], изменяются концентрации топлива и разбавителя в активной зоне для достижения критической композиции. Это делается следующим образом. Исходное описание каждой области активной зоны определяет две компоненты эффективных сечений — топливной компоненты Σ^f и разбавителя Σ^{dt} . Макроскопические сечения в каждом районе определены из условия, что в каждом элементе объема доля топлива составляет s , а разбавителя $1 - s$. Подгонка системы к критическому состоянию может быть сделана путем замены величины s величиной cs , где c — переменный параметр. Соответствующие макроскопические сечения определяются формулой

$$\Sigma = cs(\Sigma^f - \Sigma^{dt}) + \Sigma^{dt}.$$

Исходная величина $c^{(1)}$ параметра c вводится заранее. Программа рассчитывает второе значение величины c по формуле $c^{(2)} = c^{(1)} \pm 2^{-4} c$; знак в ней зависит от того, является ли композиция системы подкритической или надкритической, что определяется по величине k_{eff} . Величина c^{i+1} после этого может быть подсчитана по следующей линейной формуле:

$$c^{i+1} = c^i + \frac{(c^i - c^{i-1})(1 - k_{eff}^i)}{k_{eff}^i - k_{eff}^{i-1}}.$$

Другой подход был использован в программе расчета критичности, созданной в научно-техническом центре «Дженерал Моторс Техникал Сентер» (программа GNUII [138]). Эта программа не только определяет величину k_{eff} , но и находит композицию критического реактора. Алгоритм поиска критичности в программе GNUII включает проблему выбора списка элементов, концентрации которых должны изменяться в соответствии с их распределением и индексами. В программе GNUII использован параметр V для изменения исходных концентраций элементов или посредством прямого умножения ($\times V$) или обратным действием ($\times 1/V$). Коэффициент концентрации изменяется до тех пор, пока не будет достигнута заданная величина k_{eff} .

Величина $V^{(1)}$ предполагается известной, $V^{(1)} = 1$ и программа настроена использовать или заданную величину $V^{(2)}$, или рассчитать $V^{(2)}$ на основе ве-

личины k_{eff} , полученной из первой итерации по источнику. Для этих расчетов используются следующие уравнения:

$$\text{если } k_{eff}^{(1)} < k_{eff}^{зад}, V^{(2)} = 1 + 10 (k_{eff}^{зад} - k_{eff}^{(1)}) / k_{eff}^{(1)},$$

$$\text{если } k_{eff}^{зад} < k_{eff}^{(1)} < 1,25 k_{eff}^{зад}, V^{(2)} = 1 / (1 + 10W), W = (k_{eff}^{(1)} - k_{eff}^{зад}) / k_{eff}^{зад},$$

$$\text{если } k_{eff}^{(1)} \geq 1,25 k_{eff}^{зад}, V^{(2)} = 1 / (1 - 2,62W + 50W^2).$$

Величина $V^{(3)}$ определяется из уравнения

$$\ln V^{(3)} = \ln V^{(2)} (k_{eff}^{(1)} - k_{eff}^{зад}) / (k_{eff}^{(1)} - k_{eff}^{(2)}).$$

Для последующих итераций при $i > 3$ величина V^i определяется как решение уравнений

$$(V^i - A) (k_{eff}^{зад} - B) = C,$$

где A , B и C рассчитываются из написанных ниже уравнений по результатам трех последних итераций:

$$(V^{i-3} - A) (k_{eff}^{i-3} - B) = C,$$

$$(V^{i-2} - A) (k_{eff}^{i-2} - B) = C,$$

$$(V^{i-1} - A) (k_{eff}^{i-1} - B) = C.$$

Если результат расчета не подходит по некоторым критериям (например, $V^i \leq 0$), программа возвращается к логарифмической форме определения V^i и пересчитывает эту величину по формуле $\ln V^i = Ak_{eff}^{зад} + B$, где A и B находятся из решения двух уравнений:

$$\ln V^{i-2} = Ak_{eff}^{i-2} + B, \quad \ln V^{i-1} = Ak_{eff}^{i-1} + B.$$

Модификация схемы GNUII встречается в многогрупповых программах, созданных в центре «Атомикс интернэшнл» [139, 140, 141]. До сих пор изменение концентрации касалось лишь одного элемента, хотя формулы можно обобщить на поиск необходимых величин концентраций для двух и трех элементов. При изменении концентраций двух элементов изменение второго элемента производится в соответствии с изменением первого, причем вводится ограничение постоянства объемной доли, занимаемой двумя элементами ($VF_1 + VF_2 = \text{const}$). Если изменяются концентрации трех элементов, то вводится добавочное ограничение — отношение объемной доли, занимаемой третьим элементом, к объемной доле второго элемента остается постоянным (т. е. $VF_1 + VF_2 + VF_3 = \text{const}$ и $VF_3 / VF_2 = \text{const}$).

Программа MODRIC [142], созданная в «Юнион Карбид Ньюклар Компани», может включать список элементов, которые должны изменять концентрации, вместе с их распределением по системе. Концентрации всех этих элементов изменяются умножением концентраций на коэффициент c . Этот коэффициент меняется, пока не будет достигнута заданная величина k_{eff} .

Первоначально величина c полагается равной единице. Затем она рассчитывается программой с помощью оценки производной dc/dk_{eff} и величины k_{eff} , определенной при $c^{(1)} = 1$. После этого используется квадратичная формула для расчета последующих величин c^i с учетом только что полученных величин c^i и k_{eff}^i . В программе MODRIC можно задать один элемент, концентрация которого будет подгоняться под такую величину, чтобы сумма плотностей всех элементов оставалась на заданном уровне.

Когда программа ZOOM [143, 144] была приспособлена для ее использования в «Дженерал Атомикс», она включала в себя два алгоритма поиска критичности. В первом способе объемные доли всех материалов меняются одновременно, во втором — объемные доли материалов последовательно изменяются в сторону их заданных предельных величин, до тех пор пока не достигается

нужная величина k_{eff} . В каждом случае изменение содержания рассматриваемого элемента осуществляется заменой объемной доли элемента el в материале m , т. е. $VF_{el,m}$ заменяется $VF_{el,m} + c s_{el,m}$, где $s_{el,m}$ — заданные для обеспечения необходимой общности весовые коэффициенты и c — параметр, изменяемый для достижения искомого коэффициента размножения. Второй способ, разработанный для имитации ввода стержней управления в реакторе, требует определения максимально допустимой вариации c как в положительную, так и в отрицательную сторону для каждого материала. В этом случае, когда достигается один из пределов, концентрация данного материала поддерживается постоянной и по аналогичному закону изменяется концентрация следующего материала. Этот процесс продолжается либо пока не будет получено искомое решение, либо до достижения границ изменения концентрации данного элемента и т. д.

Программа GAZE [145] использует искусно разработанную расчетную схему для определения последовательных значений c . Каждая итерация поиска критичности включает решение как прямого, так и сопряженного диффузионного уравнения с последующими расчетами по теории возмущений первого порядка. Из этих расчетов величина c определяется на основе совместного возмущения групповых параметров материалов $-D$, Σ , $\nu\Sigma_F$ и Σ_s в целях получения необходимых изменений в k_{eff} .

Для расчетов используются следующие уравнения:

$$\frac{1}{(k_{eff})^2} (\delta k_{eff}) S_F = \sum_{g, g'} \sum_m (\delta \Sigma_{S, m}^{(g, g')}) F(g, g', m) - \sum_g \sum_m (\delta \Sigma_m^g) F(g, g, m) + \\ + \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g, g'} \sum_m \chi_m^g (\delta \nu \Sigma_{F, m}^{g'}) F(g', g, m) + 3 \sum_g \sum_m (\delta \Sigma_{ir, m}^g) G(g, m),$$

$$F(g, g', m) = \sum_{k'} \int_{r_k}^{r_{k+1}} dr \varphi^g \varphi^{*g'} r^\alpha;$$

$\alpha = 0, 1$ или 2 для плоскопараллельной, цилиндрической или сферической геометрии соответственно;

$$G(g, m) = \sum_{k'} \int_{r_k}^{r_{k+1}} dr \left(D_m^g \frac{d\varphi^{*g}}{dr} \right) \left(d_m^g \frac{d\varphi^g}{dr} \right) r^\alpha,$$

$$S_F = \sum_{g, g'} \sum_m \chi_m^g \nu \Sigma_{F, m}^{g'} F(g', g, m),$$

где χ_m^g — доля g -й группы спектра деления для материала m .

Суммирование по k' означает суммирование по всем индексам k для материала m в интервале (r_k, r_{k+1}) . Далее,

$$\delta \Sigma_{S, m}^{(g, g')} = c_m \sum_{el} N_{el} s_{el, m} \sigma_{S, el} (g, g'),$$

$$\delta \nu \Sigma_{F, m}^g = c_m \sum_{el} N_{el} s_{el, m} \nu_{el}^g \sigma_{F, el}^g,$$

$$\delta \Sigma_{ir, m}^g = c_m \sum_{el} N_{el} s_{el, m} \sigma_{ir, el}^g,$$

$$\delta \Sigma_m^g = c_m \sum_{el} N_{el} s_{el, m} (\sigma_{c, el}^g + \sigma_{F, el}^g + \sum_{g'} \sigma_{S, el} (g, g')),$$

где $c_m = c$ для всех m (способ 1) или $c_m = c$, если индекс материала с меняющейся концентрацией есть m , и $c_m = 0$ для остальных материалов.

Английская программа CRAM [96] основана на другом способе вариации материалов для поиска критичности. В этой программе фактор s_m , так же как и объемная доля VF_m , задается для каждого материала в некоторой зоне

реактора. Если объемная доля положительна, то она не будет изменяться, если объемная доля отрицательна, она будет рассчитываться по формуле $|VF_m| + cs_m$. Параметр c варьируется программой для определения искомого решения. Сначала задается величина $c^{(1)}$, после чего следующее значение $c^{(2)}$ рассчитывается программой в зависимости от $c^{(1)}$ и $\lambda^{(1)}$ по формуле:

если $c^{(1)} = 0$, то $c^{(2)} = A_5 [\text{sign}(1 - \lambda^{(1)})]$;

если $c^{(1)} \neq 0$, то $c^{(2)} = \{1 + A_5 [\text{sign}(1 - \lambda^{(1)})]\} c^{(1)}$,

где λ определяется из соотношения

$$\lambda = \sqrt{\frac{\sum_g \sum_n [\varphi_g^i(r_n)]^2}{\sum_g \sum_n [\varphi_g^{i-1}(r_n)]^2}}$$

Величина A_5 задается заранее ($A_5 = 0,05$ или может вводиться в машину в качестве исходного параметра). Главное здесь — гарантировать изменение $c^{(2)}$ в правильном направлении. Когда начинается общий поиск, величина c изменяется так, чтобы λ достигала в конце концов единицы. Для определения $c^{(3)}$ используется линейная интерполяция, но если расстояние $|c^{(3)} - c^{(2)}|$ больше, чем $|c^{(2)} - c^{(1)}|$, она заменяется следующей зависимостью:

$$c^{(3)} = c^{(2)} + 0,9 |c^{(2)} - c^{(1)}| [\text{sign}(c^{(3)} - c^{(2)})],$$

и этот процесс повторяется с заменой $c^{(1)}$ и $c^{(2)}$ на $c^{(2)}$ и $c^{(3)}$.

Каждые пять шагов используется линейная формула, связывающая величины $c^{(1)}$, ... и $c^{(5)}$ и определяющая новую $c^{(1)}$ для начала нового процесса:

$$c^{(1)} = c^{(5)} + \frac{(c^{(5)} - c^{(1)})}{(\lambda^{(5)} - \lambda^{(1)})} (\lambda^{(5)} - 1, 0).$$

В малогрупповых программах, созданных в лаборатории «Беттис Атомик Пауэр» [59, 146, 147], в диффузионные уравнения вводится член поглощения $t_g \Sigma_p$, где Σ_p определяется как сечение отравления, имитирующее эффект управляющего стержня, и t_g — доля этого эффекта, соответствующая группе с номером g . Области, в которых используются сечения отравления, задаются заранее, а величина Σ_p изменяется, начиная с нулевой или заданной величины отравления и до тех пор, пока k_{eff} не достигнет заданного значения. Последующие величины определяются затем с помощью линейной интерполяции.

Подобный поиск концентраций отравляющих материалов может быть осуществлен в расчетах с помощью различных многогрупповых диффузионных программ [139, 140, 141, 148, 149], где вводится первоначальная оценка Σ_p для заданных зон и последующие величины рассчитываются с помощью метода GNUII, описанного выше.

В решениях одномерных уравнений диффузии эффекты утечки нейтронов в направлениях, не связанных с расчетным, аппроксимируются добавлением члена, зависящего от баклинга, к сечению поглощения. Баклинг B^2 часто используется в качестве варьируемого параметра для достижения заданной величины k_{eff} . По определению B^2 зависит от геометрии реактора, и по этой причине утечка нейтронов из реактора по неосновным направлениям часто интерпретируется заданными параметрами. В этом случае справедливы следующие соотношения для конечномерного реактора.

Цилиндрическая геометрия (основное направление вдоль оси цилиндра):

$$B^2 = \left(\frac{j_{0,1}^2}{a^2} \right), \text{ боковая поверхность } \sqrt{x^2 + y^2} = a \text{ задана [150].}$$

Прямоугольная геометрия: $B^2 = \left(\frac{\pi}{y} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{z} \right)^2$, где y и z заданы [51],

$$\text{или } B^2 = \left(\frac{\pi}{y + \gamma D} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{z + \gamma D} \right)^2, \text{ где } y, z \text{ и } \gamma \text{ заданы [142].}$$

Цилиндрическая геометрия (основное направление перпендикулярно оси цилиндра): $B^2 = \left(\frac{\pi}{H}\right)^2$, где высота H задана [148], или $B^2 = \left(\frac{\pi}{H + \gamma D}\right)^2$, где H и γ заданы.

Часто с технологической точки зрения бывает полезно изменить размер всего реактора или отдельных его зон, чтобы добиться критической композиции. Процедура поиска критичности в программе GNUИ предусматривает изменение как размеров отдельных зон реактора, так и концентраций тех или иных элементов. Исследователь может изменять размер Δr заданных областей пропорционально изменению V для достижения заданной величины k_{eff} . Программы «Атомик Интернэшнл» включают указанные алгоритмы с ограничением поиска критических размеров или отрицательными или неразумно большими величинами Δr .

В программах Аргоннской лаборатории допускаются добавочные ограничения. Размеры отдельных областей могут варьироваться за счет экранных зон, что позволяет исследователю поддерживать постоянным размер реактора. Изменение размеров проводится по следующему закону:

$$\Delta r_l^i = c s_l + \Delta r_l^{(1)},$$

где l — индекс области активной зоны, т. е. $l = 1, 2, \dots, C$, и

$$\Delta r_l^i = \frac{R - \sum_{i=1}^C \Delta r_i^i N_i}{R - \sum_{i=1}^C \Delta r_i^{(1)} N_i} \Delta r_l^{(1)} \quad \text{для } l > C,$$

а R — внешний размер реактора и N_i — число интервалов сетки в области l .

Программа MODRIC включает ту же схему, которая используется при поиске критической композиции для изменения размеров всех зон или некоторых выбранных зон. Эти изменения производятся при помощи введения коэффициента c , который, в свою очередь, варьируется до достижения заданной величины k_{eff} .

Сходные варианты используются в некоторых машинных алгоритмах, где положение внешней границы или границы между зонами изменяется до подгонки коэффициента размножения к заданному значению с помощью эффекта «сечения отравления». Этим способом может имитироваться движение стержней управления. Описанная выше процедура может оказаться полезной при определении положения границы активной зона — отражатель, если желательно сохранить постоянным полный размер реактора. В этом случае сечение отравления равно нулю.

В программах поиска критичности расчет считается законченным, когда нужный коэффициент размножения получен с допустимой ошибкой ε_3 . Проверкой служат обычно следующие соотношения:

$$|k_{eff}^{зад} - k_{eff}^i| < \varepsilon_3 \quad \text{или} \quad \left| \frac{k_{eff}^{зад} - k_{eff}^i}{k_{eff}^i} \right| < \varepsilon_3.$$

Исключение составляют случаи, когда невозможно достичь заданной величины k_{eff} для рассматриваемой конфигурации или при использовании процедуры изменения границ, когда минимальная величина ε_3 при предельно допустимом положении границ может быть интерпретирована как искомое решение.

Условия на внутренних и внешних границах. В первых многогрупповых программах геометрия реактора определяла граничные условия, налагаемые алгоритмом, для решения системы дифференциальных уравнений. Если рассматривался цилиндрический или сферический реактор, в программах предполагалось, что одно из граничных условий задачи ставится в точке $r = 0$ и та-

ким условием может служить равенство нулю производной в этой точке, т. е. $\left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r=0} = 0$. В случае плоскопараллельной геометрии обычно предполагалось также другое, асимметричное условие $\varphi(0) = 0$. Для каждого конкретного случая обычным внешним граничным условием было требование равенства нулю потока нейтронов или на внешней границе или в точке, отстоящей от границы на длину линейной экстраполяции, т. е.

$$\varphi(R) = 0 \quad \text{или} \quad \left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r=R} = \frac{-\varphi(R)}{d},$$

где d часто рассчитывается умножением группового коэффициента диффузии среды в точке $r = R$ на постоянную величину 2,131. Для всех внутренних границ или границ между зонами с различными диффузионными свойствами предполагалась непрерывность потока и тока нейтронов. На каждой поверхности раздела сред r

$$\varphi(r^-) = \varphi(r^+) \quad \text{и} \quad -D \left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r^-} = -D \left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r^+}.$$

В настоящее время многие одномерные программы допускают еще более широкий выбор внешних граничных условий, что позволяет расширить класс разрешимых проблем. Этот выбор наилучшим образом представляется с помощью обобщенного линейного граничного условия, записанного в форме

$$A_0 \varphi(r) + A_1 \varphi'(r) = A_2,$$

где $r = r_0$ для внутренней границы и $r = r_R$ для внешней границы. Эта формулировка позволяет выбирать пригодные для конкретной задачи граничные условия посредством подбора двух независимых систем коэффициентов A на границах. Величины A_0 , A_1 и A_2 зависят от энергии нейтронов.

Легко видеть, что «стандартные» условия, используемые в первых программах, включены в эту формулировку, так же как и многие другие случаи. В приведенной ниже таблице иллюстрируется, какие комбинации коэффициентов A определяют наиболее часто используемые граничные условия при разработках композиции реакторов.

Таблица 1.4

Граничные условия, определяемые коэффициентами A_j

| Номер задачи | Граничные условия | Коэффициенты A_j | | | Номер задачи | Граничные условия | Коэффициенты A_j | | |
|--------------|--|--------------------|-------|-------|--------------|--|-------------------------------------|-------|-------|
| | | A_0 | A_1 | A_2 | | | A_0 | A_1 | A_2 |
| I | $\varphi' = 0$ (равенство нулю производной потока) | 0 | 1 | 0 | III | $\varphi' = \pm \frac{1}{d} \varphi$ $\left(\begin{array}{l} + \text{ при } r = r_0 \\ - \text{ при } r = r_R \end{array} \right)$ | $\frac{A_0}{A_1} = \pm \frac{1}{d}$ | 0 | 0 |
| II | $\varphi = 0$ (поток равен нулю) | 1 | 0 | 0 | IV | (экстраполированная граница) $\varphi = K$ (поток равен заданной постоянной) | 1 | 0 | K |

В настоящее время многие программы достаточно универсальны. Например, программы «Атомик Интернэшнл» построены таким образом, что позволяют пользоваться условиями I, II и IV и дополнительно к этому двумя специальными условиями III. В последнем случае можно либо задать параметр $\pm 1/d$, либо вызвать соответствующую подпрограмму и рассчитать эту величину на основе интерполяционной формулы, полученной Коэном [151]. Коэн обобщил транспортную аппроксимацию длины линейной экстраполяции для плоской геометрии на случай границ другой кривизны, а именно:

для внутренней границы

$$d = -D \left[\frac{2,131 + 4,862 (\alpha D/r_0)}{1,0 + 1,215 (\alpha D/r_0)} \right];$$

для внешней границы

$$d = \frac{2,131 D}{1 + 1,066 (\alpha D/r_R)},$$

где $\alpha = 0, 1$ или 2 для плоской, цилиндрической и сферической геометрии соответственно.

Случай IV в табл. 1.4 представляет решение неоднородного уравнения, которое в основном используется в расчетах защиты.

В некоторые программы включены специальные условия на внутренних границах, кроме условий непрерывности потока и тока нейтронов. Одно из них — условие заданного отношения потока к току (случай III) — было первоначально введено в программу Аргоннской лаборатории для изучения защиты. Другое — условие ослабления потока — было включено в программу MODRIC. Использование этого условия предполагает, что поток и ток нейтронов ослабляются в соответствии с заданным отношением, проходя через некоторую область на границе раздела сред. Для включения этого частного условия общие условия на границе сред записываются в следующей форме:

$$B_0 r_l^\alpha [\varphi(r_l) - D\varphi'(r_l)]_- = r_{l+1}^\alpha [\varphi(r_{l+1}) - D\varphi'(r_{l+1})]_+, \\ r_l^\alpha [\varphi(r_l) + D\varphi'(r_l)]_- = B_1 r_{l+1}^\alpha [\varphi(r_{l+1}) + D\varphi'(r_{l+1})]_+.$$

Значки $-$ и $+$ относятся к левосторонним значениям соответствующих величин в точке r_l и к правосторонним значениям этих величин в точке r_{l+1} . Очевидно, что при $r_l = r_{l+1}$ области ослабления не существует. Если $B_0 = B_1 = 1$, гарантируется непрерывность потока и тока нейтронов. Задание коэффициентов B определяет отношение, используемое для ослабления потока в каждом направлении, причем величины B зависят от энергии.

Решение групповых уравнений. Поскольку скоростные характеристики ЭВМ постоянно улучшаются и увеличивается их оперативная память, необходимо обратить внимание на другой аспект одномерных многогрупповых задач — возможность увеличения размерности матрицы переноса. Многие машинные алгоритмы в настоящее время допускают расчет с полной матрицей рассеяния, когда нейтроны любой энергии могут перейти в любую энергетическую группу. Следовательно, упругое, неупругое рассеяние, реакция ($n, 2n$), так же как и эффекты термализации, могут быть учтены простым способом.

Метод решения, используемый в этих программах, называется методом итерации источника (см. разд. 1.3.1). Порядок, в котором обычно решаются групповые уравнения, — от большей энергии к меньшей — основан на допущении, что рассеяние в основном приводит к понижению энергии нейтрона. В случае отсутствия рассеяния вверх по шкале энергии источник в каждой итерации в любой группе полностью определен заранее, еще до того момента, когда начинается расчет потока нейтронов данной группы. Следовательно, точное решение может быть получено с помощью одного малого цикла из G групповых уравнений. С введением рассеяния вверх необходимо использовать члены источника рассеяния, полученные на поле нейтронов из предыдущей итерации. Машинное время, необходимое для решения таких проблем возрастает и в программу, учитывающую полную матрицу рассеяния, вводится специально разработанный алгоритм для уменьшения числа итераций, требуемых для таких расчетов.

Один простой прием, служащий для этой цели, — введение лишних итераций во всех группах, подверженных влиянию рассеяния вверх, т. е. группах $g', g' + 1, \dots, G$. Здесь G — нижняя энергетическая группа и g' — номер высшей группы, где сказывается еще влияние рассеяния вверх. Эта процедура «внутренних» итераций введена в процесс итераций источника, как показано на рис. 1.3.

Тест для определения сходимости «внутренних» итераций (см. рис. 1.3) строится с использованием формулы

$$\frac{\sum_n |\varphi_g^i(r_n) - \varphi_g^{i-1}(r_n)|}{\sum_n |\varphi_g^i(r_n)|} < \varepsilon_4$$

для каждой группы $g = g', g' + 1, \dots, G$. В этой формуле величина ε_4 может либо вводиться в программу, либо рассчитываться с ее помощью.

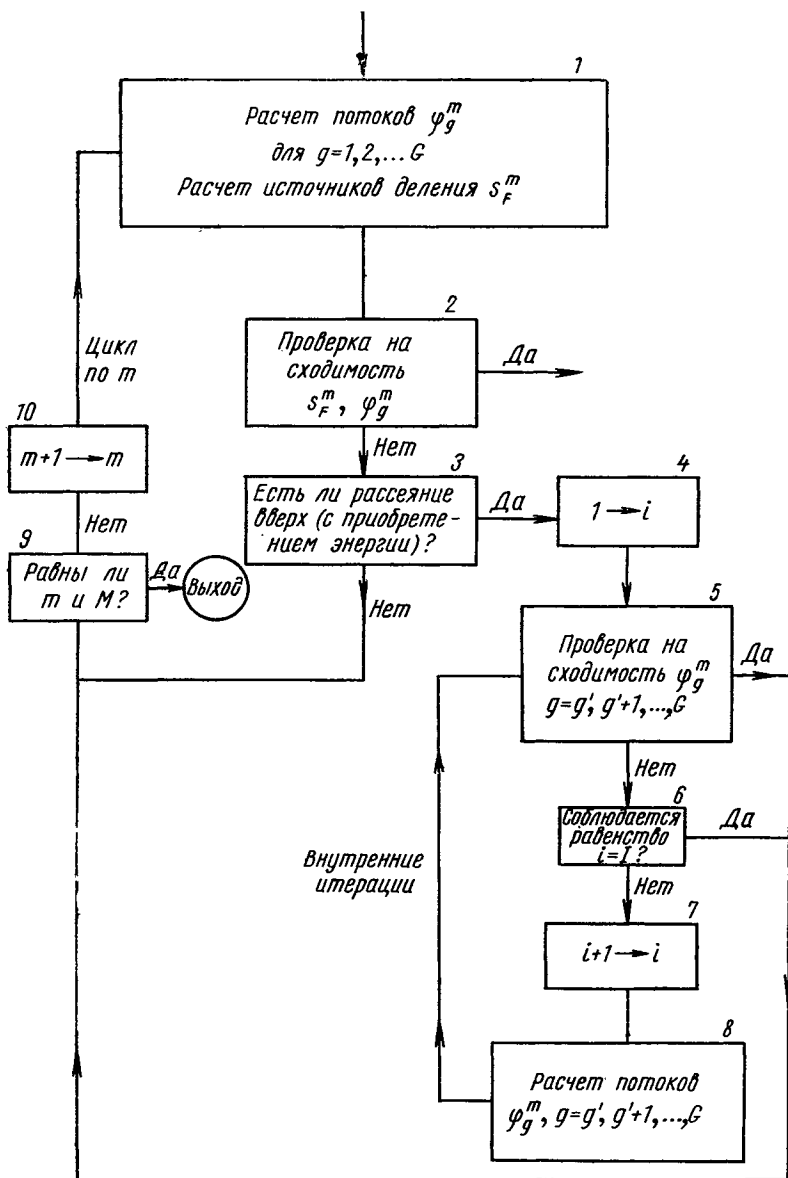


Рис. 1.3. Схема итераций источника.

Другой подход используется в программе ODD [152], в которой переходы вверх по энергии могут осуществляться только для нижних по энергии пяти групп. В этом случае применяется процедура обращения матрицы пятого порядка в каждом узле сетки, чем устраняется необходимость внутренних итераций. Эта процедура обеспечивает одновременное решение для всех групп

в каждой итерации источника подобно алгоритмам, не учитывающим рассеяния вверх. Хотя такая схема обладает недостатками из-за обычной потери точности, присущей обращению матриц, ее применение дает возможность оценить время расчета задачи на ЭВМ. В этом случае нет необходимости оценивать максимальное время расчета.

Спектры деления. В общем случае источник деления при решении групповых уравнений записывается в виде

$$S_{F, g} = \chi^g \sum_{g'} \sum_m v_m^{g'} V F_m \Sigma_{F, m, g'} \Phi_{g'}, \quad g' = 1, 2, \dots, G.$$

Здесь параметр χ^g представляет собой долю группы g в спектре деления и является вектором, не зависящим ни от природы рассматриваемых делящихся ядер, ни от энергии налетающего нейтрона. Зависимость от свойств материала была включена в несколько программ для учета разности уранового и плутониевого спектров. Кроме того, можно использовать матрицу $\chi^m(g', g)$, зависящую от свойств среды и допускающую независимое задание долей спектров деления для материала m и для группы налетающих нейтронов. Эта идея воплощена в программе CANDID [153], где источник деления записан в виде

$$S_{F, g} = \sum_{g'} \sum_m \chi^m(g', g) v_m^{g'} V F_m \Sigma_{F, m, g'} \Phi_{g'}.$$

Решение неоднородных уравнений. Процедура итераций источника в большинстве алгоритмов, созданных для ЭВМ, может быть легко приспособлена к решению неоднородных задач теории замедления. В этом случае член источника деления интерпретируется как заданный (фиксированный) источник и вводится соответствующий спектр деления для воспроизведения желаемого энергетического распределения источника. Таким способом распределение потока можно получить после одной итерации источника.

Для успешного решения тех задач, где присутствуют как внешний источник, так и источник деления, можно ввести дополнительный член внешнего источника в алгоритм решения групповых уравнений. Эта возможность, так же как и условие задания потока нейтронов на внешней границе, особенно полезна в расчетах защиты или экспоненциальных экспериментов.

Решение сопряженных задач. Решение сопряженных уравнений для расчетов по теории возмущений нетрудно осуществить путем незначительного изменения алгоритма решения прямой задачи. Необходимо лишь транспонировать матрицу рассеяния и изменить на обратный порядок решения групповых уравнений, поменяв при этом ролями спектр деления χ^g и член $v \Sigma_{F, g}$ в каждом уравнении.

Если система прямых уравнений определена в виде

$$\begin{aligned} D_1 \nabla^2 \Phi_1 - \Sigma_1 \Phi_1 + \sum_{g'} \Sigma_s^{(g' \rightarrow 1)} \Phi_{g'} &= \chi^1 \sum_{g'} v \Sigma_{F, g'} \Phi_{g'}, \\ D_2 \nabla^2 \Phi_2 - \Sigma_2 \Phi_2 + \sum_{g'} \Sigma_s^{(g' \rightarrow 2)} \Phi_{g'} &= \chi^2 \sum_{g'} v \Sigma_{F, g'} \Phi_{g'}, \\ &\vdots \\ D_G \nabla^2 \Phi_G - \Sigma_G \Phi_G + \sum_{g'} \Sigma_s^{(g' \rightarrow G)} \Phi_{g'} &= \chi^G \sum_{g'} v \Sigma_{F, g'} \Phi_{g'}, \end{aligned}$$

то соответствующая система сопряженных уравнений должна быть записана в виде

$$\begin{aligned} D_G \nabla^2 \Phi_G - \Sigma_G \Phi_G + \sum_{g'} \Sigma_s^{(G \rightarrow g')} \Phi_{g'} &= v \Sigma_{F, G} \sum_{g'} \chi^{g'} \Phi_{g'}, \\ D_{G-1} \nabla^2 \Phi_{G-1} - \Sigma_{G-1} \Phi_{G-1} + \sum_{g'} \Sigma_s^{((G-1) \rightarrow g')} \Phi_{g'} &= v \Sigma_{F, G-1} \sum_{g'} \chi^{g'} \Phi_{g'}, \\ &\vdots \\ D_1 \nabla^2 \Phi_1 - \Sigma_1 \Phi_1 + \sum_{g'} \Sigma_s^{(1 \rightarrow g')} \Phi_{g'} &= v \Sigma_{F, 1} \sum_{g'} \chi^{g'} \Phi_{g'}. \end{aligned}$$

Коэффициент проигрыша. В некоторые программы были включены алгоритмы расчета коэффициента проигрыша для оценки поведения поля тепловых нейтронов в решетке. В них используются специальные объемные доли в тепловой группе для расчета эффективных сечений, т. е. для $g \neq G$

$$\Sigma_{x, g} = \sum_m VF_m \Sigma_{x, m, g},$$

а для тепловой группы G

$$\Sigma_{x, G} = \sum_m s_m VF_m \Sigma_{x, m, G} \quad \text{или} \quad \Sigma_{x, G} = \sum_m VF_{m, G} \Sigma_{x, m, G}.$$

Система ввода и вывода. Поскольку многогрупповые одномерные диффузионные программы являются, вероятно, одними из наиболее часто используемых в исследованиях физики реакторов, то были предприняты значительные усилия для решения проблем упрощения процедуры ввода данных и наиболее полного и экономного вывода, т. е. проблем оптимизации представления результатов. Формы, разработанные в каждом случае, сильно зависят от условий работы конкретной вычислительной установки.

Большинство вычислительных центров использует форму библиотек сечений и соответствующих ядерных данных. В этом случае существует возможность изменять сечения или ядерные данные, необходимые для частной программы, с минимумом усилий. Эти библиотеки получаются как окончательный результат трехстадийной обработки отдельных экспериментальных измерений или расчетов. Следуя Паркеру [154], эти стадии обработки ядерных данных можно классифицировать следующим образом.

1. *Компиляция данных:* сбор параметров различных наименований (результатов измерений или расчетов) для отдельных элементов, т. е. сечений, угловых энергетических распределений, параметров резонансов и т. п.

2. *Оценка данных.* На этой стадии осуществляется согласование собранных данных и устраняются противоречия. Используются различные методы аппроксимации и интерполяции результатов для восстановления отсутствующей информации. Полученные в результате этой процедуры данные в рассматриваемой области энергий обеспечивают все входные ядерно-физические параметры, необходимые для программы расчета реакторов.

3. *Обработка данных.* На этой стадии оценочные данные преобразуются в форму, удобную для конкретной модели реактора или программы. В случае многогрупповой диффузионной теории данные обычно образуют библиотеки многогрупповых сечений.

В настоящее время проводится работа по компиляции нейтронных сечений в Ливерморе, Брукхейвене и Сакле. Машины обрабатывают огромное количество данных, участвующих в расчете. Соответствующие поисковые программы и программы внесения исправлений обеспечивают возможность доступа к системам магнитной памяти машин [155].

На второй стадии подготовки данных также приходится иметь дело с огромным объемом информации, требующей для своей обработки вычислительных машин. Многие лаборатории разработали автоматизированные библиотеки оценочных данных. Хонек и Паркер [156] отмечали, что в мае 1965 г. использовались около 10—20 различных систем библиотек. Они пересмотрели четыре из них вместе с системой подготовки, коррекции, модификаций и выпуска программ. Хонек предложил систему второго поколения ENDF [157] в качестве объемной библиотеки для оценочных ядерных данных. Любая или все автоматизированные существующие библиотеки могут быть сведены к стандартному ENDF-формату с помощью дополнительной программы. Система ENDF, включая программы для обработки информации, написанные по возможности в независимой от конструкции конкретной машины форме, эксплуатируется и распределяется центром Сигма-центер (Брукхейвен).

Обработанные данные неизбежно зависят от сферы деятельности конкретной лаборатории и часто даже от программы. В настоящее время существуют

программы диффузионного многогруппового расчета, оперирующие с библиотеками как оценочных, так и обработанных данных. Развитие машин и развитие исследований идут встречными путями. Поскольку машины становятся больше, увеличивается их быстрдействие и растет память, требования обрабатываемых программ могут быть в достаточной степени удовлетворены. В то же время ввиду автоматизации компиляции и возможности обработки огромного количества данных объем экспериментальных и расчетных данных может быть увеличен.

Многие многогрупповые программы написаны с ориентацией на типовые расчеты. Поэтому большая часть введенной информации может быть сохранена и требуется подготовка только изменяющейся части вводной информации, когда программа переходит от решения одной задачи к другой. Кроме того, почти все диффузионные программы обеспечивают возможность использования потока нейтронов и распределения источников нейтронов от предыдущей задачи или использования результатов решенной задачи в качестве исходной информации для решаемой задачи. Часто это может значительно снизить затраты машинного времени.

Система взаимодействия. Разработка системы «ввод — вывод данных» является только первым шагом к объединению отдельных программ: библиотеки многогрупповых сечений, программ расчета многогрупповых констант и дополнительных подпрограмм теории возмущений с многогрупповыми диффузионными алгоритмами. Вторым шагом является осуществление их взаимодействия в программах выгорания и расчета поведения полей во времени. Этот переход от независимых программ к концепции системы взаимодействующих программ развивался постепенно в течение последних лет и, очевидно, будет развиваться и в будущем.

Первоначально система представляла собой совокупность независимых программ, каждая из которых должна была выполнять единственную задачу. Их взаимодействие осуществлялось простым переносом выходной информации одной программы во входную информацию для последующей программы. Затем стандартизацией систем ввода и вывода и автоматизацией каналов связи между отдельными программами была осуществлена интегральная система взаимодействия.

Предварительная подготовка групповых констант, осуществляемая с помощью формулы типа

$$\Sigma_{x, g} = \frac{\sum_{g'=g_1}^{g_2} \Sigma_{x, g'} \Phi_{g'}}{\sum_{g'=g_1}^{g_2} \Phi_{g'}}$$

в настоящее время используется в программах решений многогрупповых уравнений диффузии [95], работающих на базе библиотеки сечений. В этом методе, задавая весовой спектр $\Phi_{g'}$ и структуру групп (т. е. g, g_1, g_2), библиотеку можно перестроить на малое число энергетических групп, экономя при этом машинное время, требуемое для решения диффузионных уравнений.

В других машинных алгоритмах [142] добавочные расчеты малогрупповых констант в виде усредненных параметров по многогрупповым распределениям преследуют ту же самую цель, но для будущих задач. Были предложены и более сложные процедуры усреднения с использованием билинейных или комбинированных (включающих прямые и сопряженные решения) функционалов [158, 159].

Поведение поля реактора во времени может быть интерпретировано повторяющимися решениями стационарных уравнений диффузии и нестационарных уравнений для концентраций изотопов. Начальное распределение концентраций является вводной информацией и используется в первом расчете для определения критического распределения потоков нейтронов и соответствующей

формы кривой энерговыделения. Сравнение этой формы с заданным распределением энерговыделения обеспечивает получение нормированных потоков нейтронов, необходимых для последующего решения дифференциальных уравнений. Если это необходимо, можно поддержать критичность реактора при расчете пространственной формы поля путем подгонки концентраций заданных материалов или величины баклинга.

Один комбинированный расчет называется временным шагом. Поочередные решения указанных уравнений продолжаются до тех пор, пока будет пройден либо заданный интервал времени, либо заданное число временных шагов. В других случаях критерием является достижение определенного уровня k_{eff} или невозможность поддерживать реактор в критическом состоянии.

Используемый временной шаг можно задавать как вводный параметр или рассчитывать с помощью той же программы. В любом случае существенно, что величина шага должна гарантировать постоянство потока нейтронов на отрезке, равном временному шагу.

В некоторых программах предусмотрена возможность дополнительных расчетов, таких, как ксеноновое отравление, избыток реактивности (при удалении стержней управления). Эти явления могут быть проанализированы на всех или на заданных временных шагах.

В мае 1965 г. на конференции по применению расчетных методов в физике реакторов было сообщено [160], что Нольская лаборатория по атомной энергии (KAPL) затратила около 50 человеко-лет на развитие системы KARE [161] для машины Philco-2000. Эта система включает различные программы, необходимые 1) для расчетов групповых констант; 2) для решений одно- и двухмерных уравнений диффузии; 3) для изучения проблемы выгорания топлива; 4) для расчетов по теории возмущений и расчетов с использованием трехмерных синтетических алгоритмов.

Известно, что модификация системы KARE для машины CDC 6600-NOVA состоит из программ-модулей, написанных на языке фортран, и выполняет те же функции, однако на более высокой скорости и с лучшей точностью. Модули, каждый из которых имеет доступ к общим или частным системам информации DATAPool, собирают входную информацию из этих источников и хранят ее. По окончании своей задачи каждый модуль выходит к управляющей программе, называемой «директор», которая вызывает следующий модуль. Пользователь системы определяет, таким образом, серию желаемых модулей и источник информации к каждому из них, привлекая для этой цели возможности управления посредством «директора». Определенная стандартная последовательность модулей может обеспечиваться простым кодом-запросом. Наоборот, опытный пользователь может добавить собственную фортран-программу к системе стандартных модулей NOVA.

Настоящие планы совершенствования системы модулей включают добавление к системе KARE программы расчета пространственного распределения методом Монте-Карло и обслуживающей программы для обработки оценочных данных, формирования библиотек и интегрирования функций.

Другой системой, представляющей интерес в настоящее время, является система TREC с разделением времени, разрабатываемая в Массачусетском технологическом институте [162]. TREC состоит из главной управляющей программы, программы ввода и совокупности реакторных программ, каждая из которых имеет список, определяющий их требования. Пользователь с помощью одного из телетайпов определяет программу, которую он желает применить, требуемые исходные данные и необходимую выходную информацию. По мере выполнения расчетов полученная информация печатается телетайпом и пользователь может ввести новый алгоритм или перешагнуть задачу с входными данными, поправленными с учетом последнего расчета. Эта система развивается вместе с работой над системой разделения времени, что свидетельствует о продолжающихся попытках использовать последние достижения в разработках ЭВМ и организации счета и расширить возможности расчетных исследований реакторов [163—203].

Очевидно, что такие разработки будут продолжаться и в будущем. Многогрупповая диффузионная программа должна раствориться в лабиринте расчетных модулей, имеющихся в обширной системе комбинированных расчетов физики реакторов. Такая система включает в себя программы обработки ядерно-физических экспериментов, обработки и хранения информации и корректировочных программ, алгоритмы теории диффузии и кинетических уравнений, программы реализации синтетических методов и методов Монте-Карло, программы оценок выгорания, экономических параметров и изучения динамики реакторов. Они могут быть легко изменены, расширены или сокращены. Пользователь может следить за выполнением программы по специальной карте. В это же самое время новые данные по сечениям, полученные из экспериментов, могут вводиться в систему на основе принципа разделения времени.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- a — полутолщина активной зоны
 B^2 — баклинг, наименьшее собственное число уравнения Гельмгольца для размножающей среды
 b — полутолщина реактора, включающая длину экстраполяции
 $b(r) \rightarrow BD(r)$
 G — выпуклое множество
 $C(r_1, r_2, r_3, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3})$ — линейный оператор, действующий на функции от r_1, r_2, r_3
 D — коэффициент диффузии
 d — длина линейной экстраполяции
 dn — элемент объема, связанный с точкой n сетки
 $dv \rightarrow dv_1 dv_2 dv_3$
 $dx \rightarrow dx_1 dx_2 dx_3$
 $d\Omega$ — элемент телесного угла, определенного с нормой $\int d\Omega = 4\pi$
 E_n — действительное n -мерное евклидово пространство
 el — индекс элемента
 $F(x, v, t)$ — функция нейтральной плотности (угловой поток, деленный на v) в момент времени t
 G — число энергетических групп
 g — вещественнозначная функция
 g, g' — индексы групп нейтронов
 g^{ij} — контравариантные компоненты метрического тензора
 $g \rightarrow \det(g^{ij})$
 H — высота конечного цилиндра (используется в определении поперечного баклинга)
 I_l — проекция, определенная как

$$(I_l g)(x, v, \Omega) = \frac{2l+1}{4\pi} \int d\Omega' P_l(\Omega \cdot \Omega') g(x, v, \Omega)$$

 i — индекс итерации
 $J \rightarrow \int d\Omega \cdot \Omega \Phi(x, v, \Omega, t)$, векторный поток нейтронов
 $j_{0,1}$ — наименьший положительный корень функции Бесселя J_0
 K — константа
 k — индекс узла сетки
 $k+1/2$ — центр интервала между двумя узлами сетки
 k, k_{eff} — коэффициент размножения
 L^2 — квадрат длины диффузии
 $\mathcal{L}(\mathcal{S})$ — пространство вещественнозначных функций, интегрируемых (по отношению к некоторой мере) на \mathcal{S}
 $\mathcal{L}'(\{\Omega\})$ — пространство вещественнозначных функций от Ω , интегрируемых по $d\Omega$
 $\mathcal{L}(E_0)_l \rightarrow I_l \mathcal{L}(E_0)$
 m — индекс материала
 $N \rightarrow \begin{cases} N=1 & \text{— декартовы координаты} \\ N=2 & \text{— цилиндрические координаты} \\ N=3 & \text{— сферические координаты} \end{cases}$

- N_{el} —число атомов на кубический сантиметр элемента el
 N_l —число интервалов сетки в области l
 n —индекс узла сетки
 $O(\cdot) \leq \text{const} |\cdot|$
 P_l — l -й полином Лежандра
 P —матрица с неотрицательными элементами
 p —вероятность избежать резонансного захвата
 $Q(x, v, t)$ —плотность распределения внешних источников нейтронов в момент времени t
 Q_l — $I_l Q$
 R —внешняя граница реактора
 r —независимая переменная в одномерных моделях
 \mathcal{R} —выпуклое подмножество E_3
 S_F —член источника деления
 \mathcal{S} —область интегрирования
 T — $-v \cdot \nabla_x + T_{int}$
 T_{ij} — $I_i T I_j$
 T_{tr} — $(T_{tot} - T_s)_{11}$
 T_{tot} — $(T_{tot} \Phi)(x, v, t) = \Sigma_{tot}(x, v, t) \Phi(x, v, t)$
 T_s — $(T_s \Phi)(x, v, t) = \int \Sigma_s(x, v; v') \Phi(x, v', t) dv'$
 T_f — $(T_f \Phi)(x, v, t) = \int \Sigma_f(x, v; v') \Phi(x, v', t) dv'$
 T_e — $(T_e \Phi)(x, v, \Omega, t) = \int \Sigma_e(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t) \Phi(x, v', \Omega', t) dv d\Omega'$
 T_{int} — $(T_{int} F)(x, v, t) = -v \Sigma_{tot}(x, v, t) F(x, v, t) + \int v' (\Sigma_s(x, v; v') + \Sigma_f(x, v; v')) F(x, v', t) dv'$
 t —время
 i_g —доля сечения отравления в энергетической группе g
 VF_m —объемная доля материала
 v —скорость нейтрона (v_1, v_2, v_3)
 v —модуль скорости $\sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2}$
 $v_{вх}$ —компонента скорости, направленная внутрь \mathcal{R}
 x —координата нейтрона (x_1, x_2, x_3)
 $x_{гр}$ —точка на границе \mathcal{R}
 Y_l —сферическая гармоника порядка l
 α —геометрический фактор ($=N-1$)
 Δ_l —длина интервала сетки в области l
 $\bar{\mu}(x, v, v', t)$ —средний косинус угла рассеяния
 $\bar{\mu}_0(x, v, t) = \int dv' \bar{\mu}(x, v, v', t)$
 v —среднее число вторичных нейтронов на одно деление
 $\Sigma_c(x, v, t)$ —сечение захвата
 $\Sigma_f(x, v'; v, t)$ —сечение деления
 $\Sigma_s(x, v'; v, t)$ —сечение рассеяния
 $\Sigma_e(x, v, v', \Omega \cdot \Omega', t)$ —сечение упругого рассеяния
 $\Sigma_{tot}(x, v, t)$ —полное сечение
 $\Sigma_{A, g}$ —макроскопическое сечение поглощения для энергетической группы g
 $\Sigma_{F, g}$ —макроскопическое сечение деления для энергетической группы g
 Σ_P —макроскопическое сечение замедления
 $\Sigma_{R, g}$ —макроскопическое сечение замедления из группы g в следующую по энергии группу $g+1$
 $\Sigma_s(g, g')$ —макроскопическое сечение рассеяния из энергетической группы g в энергетическую группу g'
 $\Sigma_g = \Sigma_{c, g} + \Sigma_{F, g} + \sum_{g'} \Sigma_s^{(g, g')}$
 $\sigma = \Sigma_{tot} + B^2$
 $\sigma_{c, g}$ —микроскопическое сечение захвата для энергетической группы g
 $\sigma_{F, g}$ —микроскопическое сечение деления для энергетической группы g
 $\sigma_s(g, g')$ —микроскопическое сечение рассеяния из энергетической группы g в энергетическую группу g'
 τ —возраст по Ферми
 $\Phi = vF$
 $\Phi_l = I_l \Phi$
 $\varphi = 4\pi \Phi_0$

Φ_{max} —собственный вектор Перрона—Фробениуса

$\chi^m (g', g)$ —спектр деления для материала m (при налетающем нейтроне из группы g' и испускаемом нейтроне из группы g)

Ω — v/v

$\|\cdot\|$ —норма $\|\psi\| = \int_{\mathcal{D}} |\varphi(\xi)| d\xi$

\oplus —прямая сумма

$\nabla_x = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)$

$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$

(\pm) —индексы, обозначающие предел справа или слева

ЛИТЕРАТУРА

1. См. гл. 8 настоящей книги.
2. T r u e s d e l l C., T o u r i n R. The Classical Field Theories. Encyclopedia of Physics, edited by S. Flügge. Vol. III/1. Principles of Classical Mechanics and Field Theory. Springer—Verlag, Berlin, 1960.
3. См. [2], стр. 244.
4. E r d e l y i A. From Delta Functions to Distributions. Modern Mathematics for the Engineer. Second Series, edited by E. F. Beckenbach. New York, McGraw-Hill Book Co., 1961
5. См. гл. 8, § 8.3 настоящей книги.
6. См. [32], стр. 16.
7. См. [4], гл. 12.
8. См. гл. 8, § 8.8 настоящей книги.
9. W e i n b e r g A., W i g n e r E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. The University of Chicago Press. Chicago, 1958, p. 224. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физика ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
10. H u r w i t z H., J r., Z w e i f e l P. F. Slowing Down of Neutrons by Hydrogeneous Moderators. J. Appl. Phys., **26**, 923 (1955).
11. H a m e r m e s h M. Group Theory and Its Applications to Physical Problems. Reading, Addison—Wesley, 1962.
12. V o n N e u m a n n J. On Rings of Operators, Reduction Theory. Ann. Math., **50**, 401 (1949).
13. См. [9], стр. 234.
14. См. [32], разд. 1.2.4.
15. M a r s h a k R. E. Theory of the slowing down of neutrons by elastic collisions with atomic nuclei. Rev. Mod. Phys., **19**, 185 (1947).
16. См. [32], стр. 5.
17. См. [28], стр. 97.
18. W i l k i n s J. J r. Diffusion Approximation to the Transport Equation. Proceedings of Symposia in Applied Mathematics. Vol. XI, Nuclear Reactor Theory. American Mathematical Society, Providence, 1961, p. 106.
19. См. [28], стр. 98.
20. См. [18], стр. 107.
21. См. [28], стр. 172.
22. G r e u l i n g E., C l a r k F., G o e r t z e l G. Multigroup approximation to the Boltzmann equation for critical reactors. NDA 10—96 (Nuclear Development Corporation of America).
23. См. [27], стр. 362.
24. «Reactor Physics Constants». ANL-5800, July 1963 (Second Edition, Argonne National Laboratory), § 3.3, § 5.3.8.
25. См. [27], стр. 212.
26. H a b e t l e r G. J., M a r t i n o M. A. Existence Theorems and Spectral Theory for the Multigroup Diffusion Model. (См. [18], стр. 127.)
27. W e i n b e r g A., W i g n e r E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. Chicago, University of Chicago Press, 1958. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
28. G l a s s t o n e S., E d l u n d M. C. The Elements of Nuclear Reactor Theory. D. Van Nostrand Company, Inc., 1952. (См. на русском языке: Глестон С., Эдлунд М. Основы теории ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1954.)
29. G a l a n i n A. D. Thermal Reactor Theory. Pergamon Press, 1960. (См. на русском языке: Галанин А. Д. Теория ядерных реакторов на тепловых нейтронах. М., Атомиздат, 1959.)

30. Sangren C. Digital Computers and Nuclear Reactor Calculations. John Wiley and Sons, Inc., 1960.
31. Soodak H. (ed.) Reactor Handbook. Vol. III, Part A Physics. Interscience Publishers, 2nd edition, 1962.
32. Davison B. Neutron Transport Theory. Oxford at the Clarendon Press, 1957. (См. на русском языке: Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1960.)
33. Soodak H., Campbell E. C. Elementary Pile Theory. John Wiley and Sons, Inc., 1950.
34. Weinberg A. Current Status of Nuclear Reactor Theory. American Journal of Physics, 20, No. 7, 401 (1952).
35. Timoshenko S. Theory of Elastic Stability. New York, McGraw-Hill, 1936.
36. Garabedian H. L., Householder A. S. The Two Group Theory of Piles with Multiple Reflectors. AEC-D-3585 (November 11, 1946).
37. Garabedian H. L., Householder A. S. Multi-Group, Multi-Reflector Pile Theory. Mon P-246 (February 12, 1947).
38. Spinrad B. I., Kurath D. Computation Forms for Solution of Critical Problems by Two-Group Diffusion Theory. ANL-4352 (March 1952).
39. Meghreblian R. V., Holmes D. K. Reactor Analysis. McGraw-Hill Book Company, Inc., 1960, p. 466. (См. на русском языке: Мегреблиан Р., Холмс Д. Теория реакторов. М., Атомиздат, 1962.)
40. Garabedian H. L. Handbook of Formulas for Two Group Criticality Calculations in Homogeneous Reactors. WAPD-RM-167 (February 1953).
41. Radkowsky A., Brodsky R. A Bibliography of Available Digital Computer Codes for Nuclear Reactor Problems. AECU-3078 (October 14, 1955).
42. Ehrlich R., Hurwitz H., Jr. Multigroup Methods for Neutron Diffusion Problems. Nuclear Science, 12, 23 (1954).
43. Weik M. H. A Third Survey of Domestic Electronic Digital Computing Systems. BRL 1115, March 1961.
44. Bernstein J. The Analytical Engine: Computers—Past, Present and Future. New York, Random House, 1964, p. 60.
45. Burks A. W., Goldstine H. H., von Neumann J. Preliminary Discussion of the Logical Design of an Electronic Computing Instrument. U.S. Army Ordnance Report, Parts 1 and 2. DATAMATION, September—October 1962 (reprint).
46. Chu J. C. Design of a Computer-Oracle, ANL-5368, September 1954.
47. USAEC, «Major Activities in the Atomic Energy Program», July—December 1953.
48. USAEC, «Major Activities in the Atomic Energy Program», January—June 1952.
49. USAEC, «Major Activities in the Atomic Energy Program», January—June 1953.
50. UNIVAC Instruction Manual I, «Programming UNIVAC Electronic Systems», Eckert—Mauchly Division, Remington Rand, January 1953.
51. Butler M. K., Cook J. M. UNIVAC Programs for the Solution of One-Dimensional Multigroup Reactor Equations. ANL-5437, 1956.
52. Alexander J. H., Given N. D. A Machine Multigroup Calculation. The Eyewash Program for UNIVAC. ORNL-1925 (September 15, 1955).
53. См. [41], стр. 61, 66.
54. Stark R. H. Preparation of Input Data for Two-Space-Dimension Multigroup. KAPL-1068, October 26, 1954.
55. Varga R. S. Problem 54 — The Cuthill Code, WAPD-LSR(P)-30 (1955).
56. См. [41], стр. 59, 60, 63, 64.
57. Habetler G. J. One-Space-Dimensional Multigroup for the IBM 650. Part I Equations. KAPL-1415 (December 1, 1955).
58. Walbran V. A. One-Space-Dimensional Multigroup for the IBM 650. Part II Machine Program. KAPL-1531 (April 10, 1956).
59. Bohl H., Jr., Gelbard E., Suarez R. A Few Group One-Dimensional Code for the IBM 650. WAPD-TM-3 (July 1956).
60. Form A22-6500-0 IBM Reference Manual 704 Data Processing System, International Business Corporation. New York, 1958.
61. Control Data Corporation Publication No. 450, Control Data 6600 Computer System Reference Manual.
62. IBM Systems Journal, Vol. 3, No. 2 and 3, IBM Corporation, 1964.
63. Cuthill E. Digital Computers in Nuclear Reactor Design. Advances in Computers edited by Franz L. Alt and Morris Rubinoff. Vol. 5, 1964.
64. Roos B. W., Sangren W. C. Some Aspects of the Use of Digital Computers in Nuclear Reactor Design. Advances in Nuclear Science and Technology edited by Ernest J. Henley and Herbert Kouts, Vol. 2, 1964.
65. Worlton W. J., Voorhees E. A. Recent Developments in Computers and Their Implications for Reactor Calculations. Proceedings of the International Conference on the Application of Computing Methods to Reactor Problems, ANL-7050, August 1965.
66. См. [27], стр. 407.
67. Wigner E. P. Mathematical Problems of Nuclear Reactor Theory. Proceedings of a Symposium on Nuclear Reactor Theory. American Mathematical Society, Providence 1961, p. 95.

68. См. [32], стр. 30
69. См. [28], стр. 293.
70. См. гл. 8 настоящей книги.
71. См. гл. 8, § 8.3 настоящей книги.
72. Birkhoff G. Reactor Criticality in Neutron Transport Theory. *Rend di Matematica* (1—2)22, 102 (1963), § 11.
73. Birkhoff G. Uniformly Primitive Multiplicative Processes. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **104**, 37 (1962).
74. См. [67], стр. 124.
75. Birkhoff G. Lattices in Applied Mathematics. *Proceedings of Symposia in Pure Mathematics*, Vol. II, Lattice Theory. American Mathematical Society, Providence, 1961, Part IV, p. 178.
76. См. [51], стр. 403.
77. Birkhoff G., Varga R. Reactor Criticality and Nonnegative Matrices. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, **6**, 354 (1958).
78. Varga R. *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1962, Chap. II.
79. Gantmacher F. *Applications of the Theory of Matrices*. Interscience Publishers, New York, 1959, Chap. XIII, sec. 2.
80. Bellman R. *Introduction to Matrix Analysis*. McGraw-Hill Book Co., 1960, Chap. XVI.
81. Alexandroff P., Hopf H. *Topologie I*. Springer-Verlag, Berlin, 1935, Chap. XII, § 3, p. 480.
82. Bourgin D. G. *Modern Algebraic Topology*. Macmillan Co., New York, 1963, Chap. VII, p. 131, example 7—6.
83. Hilbert D., Schn-Vossen S. *Anschauliche Geometrie*. Dover Publications, New York, 1944, § 49.
84. См. [78], стр. 20.
85. См. [78], стр. 41.
86. См. гл. 8 настоящей книги.
87. См. [78], стр. 30.
88. Forsythe G. E., W y s o w W. R. *Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations*. John Wiley and Sons, New York, 1960, p. 108.
89. См. [78], гл. 8, § 8.4.
90. См. [78], гл. 5 и 9.
91. См. гл. 2 настоящей книги.
92. Varga R. Numerical Methods for Solving Multi-Dimensional Multigroup Diffusion Equations. (См. [67], стр. 179.)
93. Householder A. *The Theory of Matrices Numerical Analysis*. Blaisdell Publishing Co., New York, 1964, p. 188.
94. См. [78], гл. 3, § 3.6.
95. Hassitt A. A Computer Program to Solve the Multigroup Diffusion Equations. TRG Report 229(R) United Kingdom Atomic Energy Authority, 1962.
96. Weatherburn C. E. *Differential Geometry of Three Dimensions*. Cambridge, 1930, Vol. II, p. 74.
97. Brand L. *Vector and Tensor Analysis*. J. Wiley and Sons, New York, 1947, p. 371.
98. Levi-Civita T. *Rendiconti de l'Académie des Lincei*, 26 II, 1937, p. 355.
99. Cartan E. *Eves Complètes, Partie III, Vol. 2*, p. 1481.
100. Marchuk G. I. *Numerical Methods for Nuclear Reactor Calculation*. Consultants Bureau, Inc., New York, 1959, Chap. VIII, § 34.
101. Ahjeser N. I., Glazman I. M. *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*. F. Ungar Publishing Co., New York, 1963, Vol. II, Appendix II, § 1. (См. на русском языке: А х и е з е р Н. И., Глазман И. М. *Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве*. М., «Наука», 1966.)
102. Naimark M. A. *Linear Differential Operators*, Gostekizdat, Moskow, 1954, Chap. 5, § 17. (См. на русском языке: Н а й м а р к М. А. *Линейные дифференциальные операторы*. М., Гостехиздат, 1954.)
103. См. [4], стр. 291, 312.-
104. Tikhonov A. N., Samarskii A. A. Homogeneous Difference Schemes. *U.S.S.R. Comp. Math. and Math. Phys.*, No. 1, 5 (1962). [См. на русском языке: Т и х о н о в А. Н., Самарский А. А. *ЖВМ и МФ*, № 1, 5 (1962).]
105. Tikhonov A. N., Samarskii A. A. Homogeneous Difference Schemes on Non-Uniform Nets for Equations of Parabolic Type. *U.S.S.R. Comp. Math. and Math. Phys.* No. 2, 352 (1963). [См. на русском языке: Т и х о н о в А. Н., Самарский А. А. *ЖВМ и МФ*, 3, № 2, 352 (1963).]
106. Tikhonov A. N., Samarskii A. A. Homogeneous Difference Schemes of a High Degree of Accuracy on Non-Uniform Nets. *U.S.S.R. Comp. Math. and Math. Phys.*, No. 1, 465 (1962). [См. на русском языке: Т и х о н о в А. Н., Самарский А. А. *ЖВМ и МФ*, № 1, 465 (1962).]
107. Tikhonov A. N., Samarskii A. A. On Homogeneous Difference Schemes with High Order of Accuracy on Non-Uniform Nets. *Zh. Vych. mat.*, **3**, No. 1, 99 (1963).

- [См. на русском языке: Тихонов А. Н., Самарский А. А. ЖВМ, 3, № 1, 99 (1963).]
108. В е с к е н б а с х Е. F. (Ed.). *Modern Mathematics for the Engineer*. McGraw-Hill Book Co., New York, 1956, Chap. VI, p. 117.
 109. См. гл. 8, § 8.3 настоящей книги.
 110. См. [78], стр. 117.
 111. См. [93], гл. 6.
 112. W a c h s p r e s s E. L. The numerical solution of boundary value problems. In «Mathematical Methods of Digital Computers» (edited by A. Ralston, H. Wilf). J. Wiley and Sons, New York, 1960, p. 121.
 - 112a. W a c h s p r e s s E. L. *Iterative Solution of Elliptic System*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1966, § 1.5.2.
 113. См. [78], § 6.4.
 114. См. [93], стр. 127.
 115. См. [112], § 2.
 116. W i l k i n s o n J. H. Error Analysis of Direct Methods of Matrix Inversion. *J. Assoc. Computing Machinery*, 8, 281 (1961).
 117. F o x L. The Numerical Solution of Two-Point Boundary Problems in Ordinary Differential Equations. Oxford University Press, New York, 1957, p. 231.
 118. См. [42], стр. 29.
 119. G o d u n o v S. K., R y a b e n k i i V. S. Introduction to the Theory of Difference Schemes. Moscow, 1962. Chap. IV, § 3 and Appendix II by I. M. Gelfand and O. V. Lokutsievskii. (См. на русском языке: Г о д у н о в С. К., Р я б е н ь к и й В. С. Введение в теорию разностных схем. М., Физматгиз, 1962.)
 120. B e r e z i n I. S., Z h i d k o v N. P. *Methods of Calculation*. Vol. II. Moscow, 1959, Chapter IX, § 9. (См. на русском языке: Б е р е з и н И. С., Ж и д к о в Н. П. Методы вычислений. Т. 2. М., Физматгиз, 1962.)
 121. G e l f a n d I. M., F o m i n S. V. *Calculus of Variations*. Prentice-Hall. Englewood Cliffs, 1963, Chap. VI, § 31.
 122. S a u l e v V. K. *Integration of Equations of Parabolic Type by the Method of Nets*. Macmillan, New York, 1964.
 123. W i l c o x C. H. Electric Wave Propagation on Non-Uniform Coupled Transmission Lines. *Soc. Ind. Appl. Math. Review*, 6, 148 (1964).
 124. См. [4], гл. 12.
 125. C h a n d r a s e k h a r S. *Radiative Transfer*. Oxford, 1950, Chap. IV.
 126. B e l l m a n R. Dynamic Programming, Invariant Imbedding, and Two-Point Boundary Value Problems. In «Boundary Problems in Differential Equations» (edited by R. E. Langer) (Symposium, 1959, Univ. of Wisconsin), p. 257.
 127. R i b a r i ć M. The Relation between the Reflection Properties of the Body and the Reflection Properties of its Parts. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 8, 381 (1964).
 128. R i b a r i ć M. The Relation between the Reflection Properties of the Body and the Reflection Properties of its Parts, II. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 16, 196 (1964).
 129. См. [4], § 12.19.
 130. См. [126], часть II.
 131. P o o l e E. G. *Introduction to the Theory of Linear Differential Equations*. Dover, New York, 1960, Chap. III.
 132. T h o m p s o n A. S. Numerical Computation of Neutron Distribution and Critical Size. *J. Appl. Phys.*, 22, 1223 (1951).
 133. M i l l e r W., Jr. *On Lie Algebras and Some Special Functions of Mathematical Physics*. American Mathematical Society, Providence, 1964.
 134. W a t s o n G. N. *Theory of Bessel Functions*. Cambridge, 1922, Chap. IV, § 4.2, p. 92.
 135. F r i e d m a n B. *Principles and Techniques of Applied Mathematics*. John Wiley and Sons, New York, 1956, p. 174.
 136. См. [135], стр. 183.
 137. G e l b a r d E. Rates of Convergence in One-Dimensional Codes, WAPD—TM—18 (October 1956).
 138. B o o k s t o n J. M., D a v i s C. L. An IBM 704 Program for Criticality Search on Reactor Parameters. GMR—102 (November 1957).
 139. F l a t t H. P., B a l l e r D. C. The Aim—6 Code, NAA Program Description, January 1961.
 140. B a l l e r D. C. The FAIM Code, A Multigroup, One-Dimensional Diffusion Equation Code. NAA—SR—7137 (April 1962).
 141. V a r g o f c a k D. S., H a y n e s W. T., R o e d e r D. W. NAA—SR—MEMO 9891. Ulcer, A One-Dimensional Multigroup Diffusion Equation Code with Upscatter, May 1964.
 142. R e p l o g l e J. MODRIC: A One-Dimensional Neutron Diffusion Code for the IBM—7090. K—1520 (September 1962).
 143. S t u a r t R. N., C a n f i e l d E. H., D o u g h e r t y E. E., S t o n e S. P. ZOOM, A One-Dimensional, Multigroup, Neutron Diffusion Theory Reactor Code for the IBM 704. UCRL—5293 (November 1958).

144. Stone S. P., Collins E. T., Lenihan S. R. 9-ZOOM—A One-Dimensional Multigroup, Neutron Diffusion Theory Reactor Code for the IBM 7091, UCRL—5682 (August 1959).
145. Lenihan S. R. GAZE—2, A One-Dimensional, Multigroup, Neutron Diffusion Theory Code for the IBM 7090. GA—3152 (August 1962).
146. Marlowe O. J., Saalbach C. P., Culpepper L. M., McCarty D. S. WANDA, A One-Dimensional Few Group Diffusion Equation Code for the IBM—704. WAPD—TM—28 (November 1956). Marlowe O. J., Gelbard E. M. Addendum, September 1957. Marlowe O. J. Addendum 2, July 1959.
147. Marlowe O. J., Suggs M. C. WANDA—5, A One-Dimensional Neutron Diffusion Equation Program for the Philco—2000 Computer. WAPD—TM—241, November 1960.
148. Flatt H. P., Baller D. C. Aim—5, A Multigroup, One-Dimensional Diffusion Equation Code NAA—SR—4694 (March 1960).
149. Flatt H. P. The FOG One-Dimensional Neutron Diffusion Equation Codes. NAA—SR—6104 (August 1961).
150. Butler M. ANL—AMD Program Library Report, RE 122, 1960.
151. Cm. [148], crp. 36.
152. Fischer P. G., Wenstrup F. D., Hoffman T. A. Program ODD—A One-Dimensional Multigroup Code for the IBM—7090 (ANP Program No. 657. APEX—702 (June 30, 1961).
153. Avery R., Butler M., Greenspan H. ANL—AMD Technical Memorandum No. 92 (January 5, 1965).
154. Parker K. A Review of Evaluations of Neutron Cross Sections Available at November 1964. AWRE 0—13/65 (1965).
155. Friedman J. M., Platt M. SCISRS—Sigma Center Information Storage and Retrieval System. BNL—883 (July 1964).
156. Parker K., Honeck H. The Processing of Nuclear Data for Reactor Calculations, Proceedings of the Conference on the Application of Computing Methods to Reactor Problems, ANL—7050 (August 1965).
157. Honeck H. ENDF Evaluated Nuclear Data File Description and Specifications. BNL—8381 (June 1964).
158. Shaftman D. H., Greenspan H. An Importance—Weighting Procedure for Averaging Group Parameters in Multigroup Diffusion Theory. ANL—7010, January 1965.
159. Pitterle T. A., Maynard C. W. Bilinear Averaging for Diffusion-Theory Parameters. Trans. Amer. Nucl. Soc., 8, No. 1, 205 (1962).
160. Reilly E. D., Turner W. H. The Automation of Reactor Design Calculations at the Knolls Atomic Power Laboratory. Proceedings of the Conference on the Application of Computing Methods to Reactor Problems. ANL—7050, p. 251, August 1965.
161. Archibald J. A., Jr., Teaford H. L. KARE, A System of Diffusion Theory Programs for the Philco 2000. KAPL—2161—1 (November 20, 1962).
162. Hansen K. F., Pyle I. C. TREC: A Time-Sharing Reactor Code System. Trans. Amer. Nucl. Soc., 7, 2, pp. 293.
163. Leslie D. C., Newmarch D. A., Brown H. M. ARISTOS—A Five Group Diffusion Programme for Physics Calculations of Pressure Tube Reactors. AEEW—R—93 (January 1962).
164. Radkowsky A. (ed.) Naval Reactors Physics Handbook, Vol. 1, Selected Basic Techniques, USAEC, 1964, p. 1481.
165. Baller D. C. CAESAR — A Multigroup, One-Dimensional Diffusion Equation Code with Cross Section Averaging Using Energy Spectrum with ARES for the Resonance. NAA—SR—MEMO—9423 (January 1964).
166. Marlowe O. J., Ombrellaro P. A. CANDLE—A One-Dimensional Few-Group Depletion Code for the IBM—704. WAPD—TM—53 (May 1957). Marlowe O. J., Ombrellaro P. A. WAPD—TM—53, Addendum 1 Candle 2 (October 1957). Culpepper L. M. WAPD—TM—53, Addendum 2 Candle (October 1957).
167. Marlowe O. J. Nuclear Reactor Depletion Programs for the Philco 2000 Computer, WAPD—TM—221 (January 1961).
168. Hendley S. M., Mangan R. A. CNCR—2, A One-Dimensional Few-group Depletion Code for the IBM—7090, which Includes the Effects of Water Density Variations on Neutron Moderation. WCAP—6058 (January 1964).
169. Ellis R. L., Kellogg R. B., McGovern B. J. COGENT—A One-Dimensional Multigroup Code for the Calculation of Neutron Space-Energy Distributions MPC—18 (July 20, 1960).
170. Toppel B. J., Avery R., Fischer G. J. CYCLE and COST, Codes for Fast Reactor Fuel Cycle Analysis and Related Cost Evaluation. Trans. Amer. Nucl. Soc., 5, No. 1, 92 (1962).
171. Fischer G. J., Avery R., Toppel B. J. Fuel Cycle Studies for Fast Power Breeder Reactors. Trans. Amer. Nucl. Soc., 5, No. 1, 130 (1962).

172. Nix E. D. A Spherical Single Space Variable, Three-Region, Multigroup Reactor Calculation on IBM-701 (Program D.), AECD-3882 (April 1955).
173. Franklin J., Leshan E. J. A Multigroup, Multiregion, One-Space Dimensional Program Using Neutron Diffusion Theory DMM. ASAE-4 (December 1956).
174. IBM 650 Program Library 8.2.015.
175. Wilkinson M. C. Enoch (A One-Dimensional Space Dependent Burn-Up Programme). AEEW-M448 (July 1964).
176. Fowler T. B., Tobias M. L., Vondy D. R. EXTERMINATOR—A Multigroup Code for Solving Neutron Diffusion Equations in One and Two Dimensions. ORNL-TM-842 (February 1965).
177. Communications of the ACM Vol. 2, No. 1 (January 1959).
178. Todd F. FEVER, A One-Dimensional Few-Group Depletion Program for Reactor Analysis, GA-2749 (November 28, 1962).
179. Mills C. B., Brinkley F. A One Dimensional Intermediate Reactor Computing Program. LA-2161 (March 1959). Supplement LA-2161, March 1960, F. Brinkley.
180. Fischer P. G. Multi-Group, Multi-Region, One Space Dimension Neutron Diffusion Theory Calculation—Program F-N (ANP No. 308). XDC 60-3-68 (January 15, 1960).
181. Keppler J. G., Orr W. L. Three Group Neutron Diffusion Calculation (Program F₃—IBM 704). APEX-395 (May 27, 1958).
182. Davis C. L., Bookston J. M., Smith B. E. GNU II—A Multigroup One-Dimension-Diffusion Program. GMR-101 (November 12, 1957).
183. Bookston J. M. Reactor Material Burnout Program. GMR-103 (November 20, 1957).
184. Benson G. M., Collins E. T. GROM—A Time Dependent, One-Dimensional, Multigroup Neutron Diffusion Theory Reactor Burnup Code for the IBM 7094. UCRL-6801 (June 30, 1962).
185. Campbell D. J. Program G-2, XDC 58-4-63 (April 4, 1958).
186. Hassitt A. A Programme for Solving the Multigroup Neutron Diffusion Equations in Two Space Dimensions on the Ferranti Mercury Computer. AERE T/R 2487 (February 1958).
187. Bindon D. C. An Extended Version for Hassitt's One-Dimension Multigroup Diffusion Programme for the Mercury Computer. AEEW-M160 (August 1961).
188. Lilley J. R. Computer Code HFN—Multigroup, Multiregion Neutron Diffusion Theory in One Space Dimension, HW-71545 (November 17, 1961).
189. IBM 650 Program Library 8.2.007.
190. IBM 1620 Program Library 8.2.003.
191. Kavanagh D. L., Egawa E. K., Gunther N. G., Temme M. I. MAIDS, A Macroscopic Input Diffusion System for the IBM-1620. ATL-D-789 (May 8, 1962).
192. Burns D., Franklin J. N., Taylor W. Multigroup Criticality Computations on the Burroughs 205 System for Heterogeneous Reactors Using the Diffusion Approximation. Burroughs Corporation Tech. Bull., No. 44 (June 1, 1959).
193. Burns D., Allen J. Multigroup Criticality Computations on the Burroughs 220 System for Heterogeneous Reactors Using the Diffusion Approximation. Burroughs Corp. Tech. Bulletin 76 (September 30, 1960).
194. IBM 650 Program Library 8.2.001.
195. Communications of the ACM, Vol. 3, No. 1 (January 1960).
196. Preston P. D., Mandl M. E. A Multigroup Diffusion Theory Programme for Plane Slab or Spherical Systems. AERE T/M 154 (January 1958).
197. Trans. Amer. Nucl. Soc., 4, No. 2, 256 (1961).
198. Federighi F. D. RAUM—Solution of One-Dimensional Coupled Diffusion—Type Equations on the Philco-2000. CAPL-M-FDF-1 (February 19, 1962).
199. Butler M. K., Cook J. M. RE-34, An IBM-704 Reactor Shielding Program. ANL-5859 (June 1959).
200. Blaine R. Abstracts of Available Codes at Atomic International. AI-Memo-9201, Revision 1 (April 1964).
201. Satkus D. P., Flatt H. P. Sizzle NAA Program Description (February 1961).
202. Stark R. H., White C. M. VALPROD, A Revision of the PROD II 650 Multigroup Program GEAP-0952 (January 9, 1957).
203. Heffley R. A., Hunter C. H. WHY, A One-Dimensional Few Group Diffusion Code for the IBM 1620. KAPL-M-CT-1 (May 15, 1962).

**ТЕОРИЯ ДИФФУЗИИ В ДВУХ-
И ТРЕХМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ**

А. Хассит

(ИБМ, Научный центр, Вашингтон)

§ 2.1. ВВЕДЕНИЕ

2.1.1. В предыдущей главе было показано, что решение задач диффузии с энергетической зависимостью поля нейтронов можно разделить на несколько стадий. На первой стадии осуществляется переход к многогрупповой аппроксимации. На второй — многогрупповая задача может быть решена методом итераций источника. Этот метод преобразует задачу решения многогрупповых уравнений к решению серии одногрупповых задач. Третья стадия, описанная в гл. 1, состоит в преобразовании одногрупповой задачи с помощью конечно-разностной аппроксимации. На четвертой стадии полученные уравнения могут быть решены.

2.1.2. Уравнения диффузии с энергетической зависимостью в двух- и трехмерной геометрии можно решить, следуя указанным четырем стадиям. Поскольку первые две стадии полностью совпадают с соответствующими стадиями решения одномерных задач, нет необходимости рассматривать их детально. В этой главе мы обсудим формализм конечно-разностного метода для двух- и трехмерной геометрии и способы решений результирующих уравнений. Решить эти уравнения — задача более сложная, чем в случае одномерной геометрии. Существуют три основные трудности. Во-первых, уравнения невозможно решить прямым способом — должен быть использован метод итераций. Во-вторых, необходимо использовать многоузловую конечно-разностную сетку: в одномерных задачах обычно используют от 30 до 100 узловых точек на одну группу, в то время как для двухмерных задач число узлов обычно варьируется от 300 до 5000 для каждой группы. В-третьих, оперативная память машины пригодна для решения одномерных задач. Двухмерные задачи обычно требуют использования внешней памяти ЭВМ — магнитных лент или дисков, что в соответствующей степени увеличивает время решения задачи и ухудшает гибкость программы. Не так сложно написать универсальные одномерные и специализированные двухмерные программы для современных машин. Гораздо труднее написать большую, эффективную, гибкую двухмерную программу. Трудности, возникающие при реализации многомерных алгоритмов, обсуждаются в этой главе.

2.1.3. В настоящей главе обсуждаются два основных вопроса. Формулировка уравнений в конечных разностях и способы решения этих уравнений. Основным методом решения является метод верхней релаксации. На практике существует много модификаций этого метода, точечный метод, линейный и двухлинейный методы и т. д. Различия методов важны особенно тогда, когда должна выбираться стратегия для преодоления ограниченных возможностей ЭВМ, но знания наиболее простого метода достаточно, чтобы разобраться в работе большинства программ. Как будет показано ниже, большинство математических критериев можно объяснить с физической точки зрения и физики должны критически относиться к возможности их применения для данной задачи.

§ 2.2. ДВУХМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ

2.2.1. Однорупповое уравнение диффузии можно записать в форме

$$D \nabla^2 \Phi - A\Phi + Q = 0, \quad (2.1)$$

где D — коэффициент диффузии, A — сечение поглощения или увода нейтронов, Φ — поток нейтронов и Q — источник. Все эти величины являются функциями пространственных координат. Величина Q равна сумме скоростей процессов деления и рассеяния, приводящих к появлению нейтронов. Каждый из членов источника представляется в виде произведения сечения на поток. Так как все члены будут преобразовываться одинаково, достаточно написать типичный член

$$Q = C\Psi, \quad (2.2)$$

в котором C — сечение, а Ψ — поток. Если Q содержит более одного члена (на практике это обычно имеет место), то все последующие рассуждения могут быть применены к каждому члену. Существуют три различные геометрии, приводящие к двухмерным задачам.

2.2.2. Возьмем прямоугольные координаты x, y, z и предположим, что

$$\Phi(x, y, z) = f(x, y) \cos \alpha z$$

и

$$\Psi(x, y, z) = g(x, y) \cos \alpha z.$$

Тогда

$$D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f - Bf + Cg = 0, \quad (2.3a)$$

где $B = A + D\alpha^2$.

2.2.3. Рассмотрим цилиндрическую полярную систему координат r, z, θ и предположим наличие аксиальной симметрии, так что свойства системы не изменяются в зависимости от θ . Если

$$\Phi(r, z, \theta) = f(r, z) \quad \text{и} \quad \Psi(r, z, \theta) = g(r, z),$$

то

$$D \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f - Bf + Cg = 0, \quad (2.3b)$$

где $B = A$.

2.2.4. Рассмотрим снова цилиндрическую полярную систему координат r, z, θ и предположим, что

$$\Phi(r, z, \theta) = f(r, \theta) \cos \alpha z \quad \text{и} \quad \Psi(r, z, \theta) = g(r, \theta) \cos \alpha z.$$

Тогда

$$D \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) f - Bf + Cg = 0, \quad (2.3b)$$

где $B = A + D\alpha^2$.

2.2.5. Для всех реакторных задач, исключая тривиальные, отсутствует возможность выразить решение двухмерных уравнений в простой замкнутой форме. Существуют два основных способа решения двухмерных задач, соответствующие двум различным типам таких задач (рис. 2.1). В задачах первого типа внутренние границы между различными областями заданы прямыми или почти прямыми линиями. Ко второму типу задач относятся системы со стержнями управления, топливными стержнями и т. д., т. е. с малыми зонами, имеющими круговые или почти круговые границы. Задачи, которые не попадают в эти две категории, могут быть сведены к одной из них.

2.2.6. Для решения задач первого типа можно положить

$$f(r, z) = \sum_{s, t} \psi_{s, t} J_0(\gamma_s r/R) \sin(t\pi z/Z), \quad (2.4)$$

где γ_s — корни функции Бесселя J_0 , а координаты $r = R$ и $z = Z$ определяют границы реактора. Ряд (2.4) обеспечивает удобное представление оператора Лапласа, но использование условий на внутренних границах (непрерывности

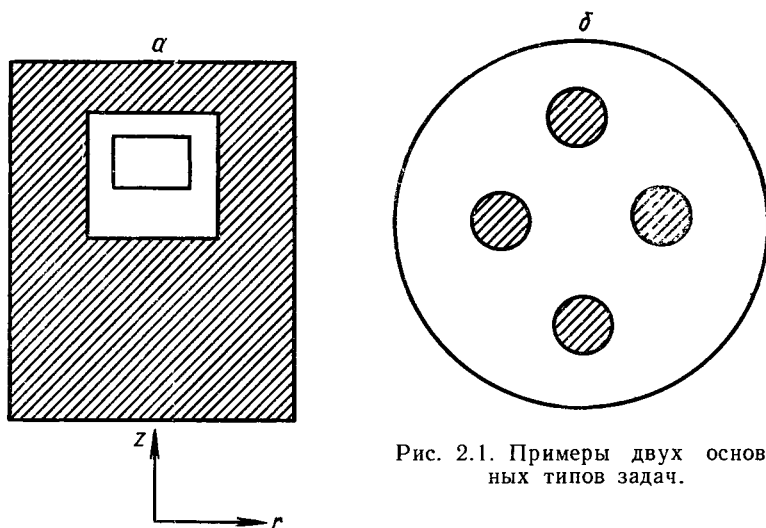


Рис. 2.1. Примеры двух основных типов задач.

потока и тока нейтронов) так усложняет дело, что каждая конкретная задача требует отдельного анализа. Этот метод не может сравниться по эффективности и гибкости с методом конечных разностей.

2.2.7. Задача типа б (см. рис. 2.1) требует представления решения в виде ряда

$$f(r, z) = \sum_s \psi_s \varphi_s(r, z), \quad (2.5)$$

в которых функция φ_1 должна быть выбрана так, чтобы удовлетворить граничным условиям на поверхности одного стержня, φ_2 — на поверхности другого стержня и т. д. Этот метод разложения описан в книге Глесстона и Эдлунда [1] и работе С. М. Фейнберга [2]. Трудности возникают в случае многогруппового рассмотрения, когда в системе имеется много стержней (за исключением задач с бесконечной решеткой) или когда отражатель нельзя считать бесконечным. Для многих практически интересных задач можно разработать необходимый для решения математический аппарат. Однако решение задач даже средней сложности часто очень затруднено. Данный метод не является ни легким, ни гибким для использования, тем не менее для решения задачи типа б применение других методов, например метода конечных разностей, сопряжено с еще большими трудностями.

Рис. 2.2. Конечно-разностная сетка в конкретной задаче.

2.2.8. Методы конечных разностей непосредственно применяются к задачам типа а (см. рис. 2.1). Начертим серии кривых $r = \text{const}$ и $z = \text{const}$. Эти кривые выбираются так, чтобы каждая внутренняя граница системы проходила по какой-либо из этих кривых. Методы дают возможность рассчитать $f(r, z)$ в совокупности точек, где линии $r = \text{const}$ и $z = \text{const}$ пересекаются (рис. 2.2). Конечно-разностные методы имеют два преимущества. Во-первых, можно написать некоторые простые условия, гарантирующие сходимость метода, — методы конечных разностей обычно не сопряжены с особыми вычислительными трудностями. Во-вторых, можно написать общие уравнения для наиболее сложных задач и решить их без особого труда.

Методы конечных разностей не очень удобны при решении задач типа б: основная трудность состоит в том, что невозможно представить детально геометрию системы без введения слишком большого числа узловых точек. Имеется, однако, ряд задач типа б, которые были успешно решены (см. разд. 2.7.3).

§ 2.3. ТИПИЧНАЯ ЗАДАЧА

2.3.1. Прежде чем детально излагать методы конечных разностей, полезно на простом примере продемонстрировать используемые идеи. Рассмотрим уравнение (2.3) и предположим, что

$$B(x, y)/D(x, y) = \text{const} = \kappa^2, \quad (2.6)$$

$$C(x, y)g(x, y)/D(x, y) = \sin(\pi x/X) \sin(\pi y/Y). \quad (2.7)$$

Границами реактора являются прямые

$$x=0, \quad x=X; \quad y=0, \quad y=Y. \quad (2.8)$$

С учетом этих условий решение задачи есть

$$f(x, y) = \sin(\pi x/X) \sin(\pi y/Y) / \left(\kappa^2 + \frac{\pi^2}{X^2} + \frac{\pi^2}{Y^2} \right). \quad (2.9)$$

Рассмотрим теперь задачу в конечных разностях. Воспользуемся разложением Тейлора в форме Лагранжа

$$f(x+l) = f(x) + lf'(x) + l^2 f^{(2)}(x)/2 + l^3 f^{(3)}(x)/6 + l^4 f^{(4)}(x + \xi l)/24, \quad (2.10)$$

в которой $0 \leq \xi \leq 1$. Очевидно,

$$f(x+l) + f(x-l) = 2f(x) + l^2 f^{(2)}(x) + l^4 [f^{(4)}(x + \xi_1 l) + f^{(4)}(x - \xi_2 l)]/24. \quad (2.11)$$

(В этом и последующих уравнениях будем использовать величину ξ_n для обозначения константы в диапазоне от 0 до 1.)

Выберем последовательность линий сетки

$$x = sl, \quad (2.12a)$$

в которой

$$s = 0, 1, \dots, N \text{ и } Nl = X,$$

$$y = tl, \quad (2.12b)$$

где $t = 0, 1, \dots, M$ и $Ml = Y$. Запишем

$$f(sl, tl) = f_{s,t}. \quad (2.13)$$

Тогда, используя уравнение (2.11) и аналогичное уравнение для направления y , получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{l^2} (f_{s+1,t} + f_{s-1,t} + f_{s,t+1} + f_{s,t-1}) - \left(\kappa^2 + \frac{4}{l^2} \right) f_{s,t} + \\ + \sin\left(\frac{\pi x}{X}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{Y}\right) = \varepsilon_{s,t}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_{s,t} = \frac{l^2}{24} \left[\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(sl + \xi_1 l, tl) + \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(sl - \xi_2 l, tl) \right] + \\ + \frac{l^2}{24} \left[\frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(sl, tl + \xi_3 l) + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(sl, tl - \xi_4 l) \right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Если l мало, можно пренебречь членом $\epsilon_{s,t}$ по сравнению с другими членами уравнения (2.14). Следовательно, $f(sl, tl)$ приблизительно равна $F_{s,t}$, где $F_{s,t}$ — решение уравнения

$$\frac{1}{l^2} (F_{s+1,t} + F_{s-1,t} + F_{s,t-1} + F_{s,t+1}) - \left(\kappa^2 + \frac{4}{l^2} \right) F_{s,t} + \sin \left(\frac{\pi x}{X} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{Y} \right) = 0. \quad (2.16)$$

Уравнение (2.16) является конечно-разностным уравнением, которое справедливо для значений $s = 1, 2, \dots, N-1$, $t = 1, 2, \dots, M-1$. Другими словами, уравнение (2.16) включает в себя $(N-1)(M-1)$ отдельных уравнений. Кроме того,

$$F_{0,t} = F_{N,t} = F_{s,0} = F_{s,M} = 0 \quad (2.17)$$

на границах. Уравнения (2.16) и (2.17) могут быть решены. Решение имеет вид

$$F_{s,t} = \sin \left(\frac{\pi s l}{X} \right) \sin \left(\frac{\pi t l}{Y} \right) / \left[\kappa^2 + 2(1 - \cos(\pi l/X))/l^2 + 2(1 - \cos(\pi l/Y))/l^2 \right], \quad (2.18)$$

и его нетрудно проверить простой подстановкой, вспоминая, что $\sin(x+l) + \sin(x-l) = 2 \sin x \cos l$. Очевидно, что

$$f_{s,t}/F_{s,t} = \frac{\kappa^2 + \frac{\pi^2}{X^2} + \frac{\pi^2}{Y^2} - \frac{\pi^4 l^2}{12 X^4} - \frac{\pi^4 l^2}{12 Y^4} + \dots}{\kappa^2 + \frac{\pi^2}{X^2} + \frac{\pi^2}{Y^2}}. \quad (2.19)$$

Соотношение (2.19) показывает, что отбрасывание члена $\epsilon_{s,t}$ было разумным.

Упростим уравнение (2.19), рассматривая случай, когда $X = Y$. Определим геометрический параметр (баклинг) κ_g соотношением

$$\kappa_g^2 = \frac{\pi^2}{X^2} + \frac{\pi^2}{Y^2} = \frac{2\pi^2}{N^2 l^2}. \quad (2.20)$$

Для частной задачи, в которой $X = Y$,

$$\frac{f_{s,t}}{F_{s,t}} = \frac{\kappa^2 + \kappa_g^2 - \kappa_g^4 l^2/24 + \dots}{\kappa^2 + \kappa_g^2},$$

так что

$$\left| \frac{f_{s,t}}{F_{s,t}} - 1 \right| < \frac{2\pi^2}{24 N^4} + O\left(\frac{1}{N^4}\right). \quad (2.21)$$

Следовательно, если $N = 10$, F аппроксимирует f с точностью $\sim 1\%$. При $N = 100$ точность аппроксимации равна $0,01\%$. В расчетах по определению эффективного коэффициента размножения с использованием конечно-разностных методов точность его определения много выше точности расчета потоков нейтронов.

§ 2.4. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЕ УРАВНЕНИЯ

2.4.1. В этом разделе будут получены конечно-разностные уравнения для следующей реакторной задачи. Геометрию реактора можно представить отображением на плоскость, используя в качестве координат либо (x, y) , либо (r, z) , либо (r, θ) . Чтобы упростить описание композиции, рассмотрим детально задачу в координатах (r, z) ; нетрудно интерпретировать результат (r, z) -метода в (x, y) - и (r, θ) -геометриях. Те места, где могут встретиться трудности, будем

рассматривать более подробно. Чертеж реактора рассечен сериями линий (рис. 2.3):

$$r = r_0, r_1, \dots, r_N; \quad z = z_0, z_1, \dots, z_M,$$

где $r = r_0$, $r = r_N$ и $z = z_0$, $z = z_M$ определяют границы реактора. Уравнения, которые должны быть решены, имеют вид

$$D(r, z) \nabla^2 f(r, z) - B(r, z) f(r, z) + C(r, z) g(r, z) = 0, \quad (2.22)$$

причем $D(r, z)$, $B(r, z)$ и $C(r, z)$ — постоянные величины внутри ячеек полученной сетки. Определим ячейку (s, t) -сетки неравенствами:

$$r_s \leq r \leq r_{s+1}, \quad z_t \leq z \leq z_{t+1}. \quad (2.23)$$

Обозначим величины $D(r, z)$, $B(r, z)$ и $C(r, z)$ в ячейке (s, t) как $D_{s,t}$, $B_{s,t}$ и $C_{s,t}$. На каждой внутренней границе реактора, где функция D разрывна, имеем

$$\left. \begin{aligned} f(r_{s+}, z) &= f(r_{s-}, z), \\ D_{s,t} \frac{\partial f}{\partial r}(r_{s+}, z) &= D_{s-1,t} \frac{\partial f}{\partial r}(r_{s-}, z) \end{aligned} \right\} \quad (2.24a)$$

и

$$\left. \begin{aligned} f(r, z_{t+}) &= f(r, z_{t-}), \\ D_{s,t} \frac{\partial f}{\partial z}(r, z_{t+}) &= D_{s,t-1} \frac{\partial f}{\partial z}(r, z_{t-}). \end{aligned} \right\} \quad (2.24b)$$

Здесь использованы очевидные обозначения: r_{s+} и r_{s-} означают, что берутся левые и правые пределы соответствующих величин на границах раздела. Аналогичный смысл имеют величины с координатами z_{t+} и z_{t-} . Условия на внешних границах реактора имеют вид

$$f(r, z) = 0 \quad \text{при } r = r_0 \text{ и } r = r_N \quad (2.25a)$$

и

$$f(r, z) = 0 \quad \text{при } z = z_0 \text{ и } z = z_M. \quad (2.25b)$$

Возможна система других граничных условий:

$$D(r, z) \frac{\partial f(r, z)}{\partial r} + \lambda(r, z) f(r, z) = 0 \quad (2.25в)$$

для $r = r_0$ или r_N и

$$D(r, z) \frac{\partial f(r, z)}{\partial z} + \lambda(r, z) f(r, z) = 0 \quad (2.25г)$$

для $z = z_0$ или z_M .

2.4.2. Введем уравнение, подобное (2.16), связывающее величины f в узловых точках (s, t) , $(s+1, t)$, $(s, t+1)$, $(s+1, t)$ и $(s, t-1)$. Проинтегрируем уравнение (2.22) по объему, определенному неравенствами

$$r_s - \Delta r_{s-1} \leq r \leq r_s + \Delta r_s \quad (2.26a)$$

и

$$z_t - \Delta z_{t-1} \leq z \leq z_t + \Delta z_t, \quad (2.26б)$$

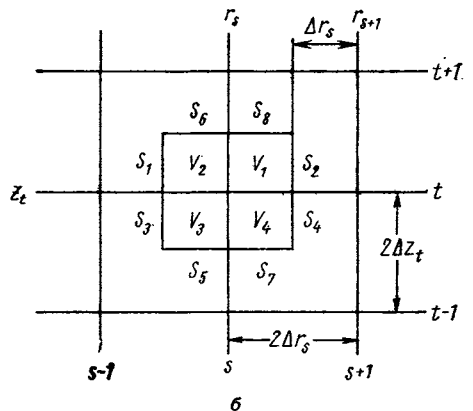
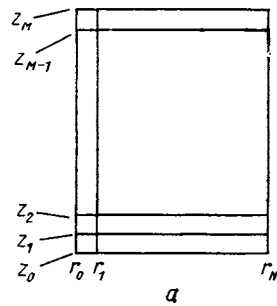


Рис. 2.3. Конечно-разностная (r, z) -сетка и ее увеличенная часть.

в которых $\Delta r_s = (r_{s+1} - r_s)/2$, и рассмотрим каждый член проинтегрированного уравнения отдельно. После интегрирования члена B получим

$$\int B(r, z) f(r, z) dV = B_{s, t} \int f dV_1 + B_{s-1, t} \int f dV_2 + \\ + B_{s-1, t-1} \int f dV_3 + B_{s, t-1} \int f dV_4, \quad (2.27)$$

где V_1, V_2, V_3 и V_4 — объемы, показанные на рис. 2.3. Используя теорему о среднем, находим

$$\int f(r, z) dV_1 = f(r_s + \xi_1 \Delta r_s, z_t + \xi_2 \Delta z_t) V_{s, t}, \quad (2.28)$$

где ξ_1 и ξ_2 — некоторые числа из интервала $[0, 1]$ и

$$V_{s, t} = \pi [(r_s + \Delta r_s)^2 - r_s^2] \Delta z_t. \quad (2.29)$$

Интегрирование члена D в уравнении (2.22) дает выражение

$$\int D(r, z) \nabla^2 f(r, z) dV = \\ = \sum_{n=1}^4 \int (-1)^n D \frac{\partial f}{\partial r} dS_n + \sum_{n=5}^8 \int (-1)^n D \frac{\partial f}{\partial z} dS_n, \quad (2.30)$$

в котором S_1, \dots, S_8 — поверхности, показанные на рис. 2.3. Уравнение (2.30) является следствием применения теоремы Грина. Теорема Грина не может использоваться здесь во всем объеме $V_1 + V_2 + V_3 + V_4$, так как функция D не всегда непрерывна на границах $r = r_s$ и $z = z_t$. Но эта теорема может быть применена в каждом из четырех объемов поочередно. Тогда в силу соотношений (2.24а) и (2.24б) такие члены, как

$$\int_{z_t}^{z_t + \Delta z_t} D \frac{\partial f}{\partial r}(r, z) 2\pi r_s dz,$$

на границе внутри объема, определенного выражением (2.26), исчезнут. Рассмотрим два типичных члена уравнения (2.30). Используя теорему о среднем, получаем соотношение

$$\int D(r, z) \frac{\partial f}{\partial r}(r, z) dS_2 = D_{s, t} R_{s, t} \frac{\partial f}{\partial r}(r_s + \Delta r_s, z_t + \xi_3 \Delta z_t), \quad (2.31a)$$

в котором

$$R_{s, t} = 2\pi (r_s + \Delta r_s) \Delta z_t \quad (2.32a)$$

является площадью поверхности S_2 . Аналогично

$$\int D(r, z) \frac{\partial f}{\partial z}(r, z) dS_8 = D_{s, t} Z_{s, t} \frac{\partial f}{\partial z}(r_s + \xi_4 \Delta r_s, z_t + \Delta z_t), \quad (2.31б)$$

где

$$Z_{s, t} = \pi [(r_s + \Delta r_s)^2 - r_s^2] \quad (2.32б)$$

есть площадь поверхности S_8 . (Снова используем ξ для обозначения числа из интервала $[0, 1]$.) Наконец, мы знаем, что

$$f(r_s + \xi_1 \Delta r_s, z_t + \xi_2 \Delta z_t) \approx f_{s, t}, \quad (2.33a)$$

$$\frac{\partial f}{\partial r}(r_s + \Delta r_s, z_t + \xi_3 \Delta z_t) \approx \frac{f_{s+1, t} - f_{s, t}}{2\Delta r_s}, \quad (2.33б)$$

$$\frac{\partial f}{\partial z}(r_s + \xi_4 \Delta r_s, z_t + \Delta z_t) \approx \frac{f_{s, t+1} - f_{s, t}}{2\Delta z_t}, \quad (2.33в)$$

где $f_{s, t} = f(r_s, z_t)$. Подставляя выражения (2.33б) и (2.33в) в соотношение (2.31) и делая аналогичные преобразования для S_1, S_3, S_4, S_5, S_6 и S_7 , а так-

же подставляя выражение (2.33а) в соотношение (2.28) и проводя аналогичные преобразования для V_2, V_3, V_4 , а затем преобразования члена C , находим

$$a_{s,t} \dot{f}_{s+1,t} + b_{s,t} \dot{f}_{s,t+1} + c_{s,t} \dot{f}_{s-1,t} + d_{s,t} \dot{f}_{s,t-1} - e_{s,t} \dot{f}_{s,t} + h_{s,t} = \varepsilon_{s,t}, \quad (2.34)$$

где

$$\left. \begin{aligned} c_{s,t} &= a_{s-1,t}, \\ a_{s,t} &= (D_{s,t} R_{s,t} + D_{s,t-1} R_{s,t-1}) / 2\Delta r_s, \end{aligned} \right\} \quad (2.35)$$

$$\left. \begin{aligned} d_{s,t} &= b_{s,t-1}, \\ b_{s,t} &= (D_{s,t} Z_{s,t} + D_{s-1,t} Z_{s-1,t}) / 2\Delta z_t, \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

$$e_{s,t} = a_{s,t} + b_{s,t} + c_{s,t} + d_{s,t} + k_{s,t}, \quad (2.37)$$

$$k_{s,t} = B_{s,t} V_{s,t} + B_{s-1,t} V_{s-1,t} + B_{s,t-1} V_{s,t-1} + B_{s-1,t-1} V_{s-1,t-1}. \quad (2.38)$$

Член $h_{s,t}$ подобен $k_{s,t} \dot{f}_{s,t}$, если заменить B и f на C и g . Член $\varepsilon_{s,t}$ представляет ошибку конечно-разностной аппроксимации исходного уравнения.

2.4.3. Уравнение (2.34) представляет общую форму конечно-разностного уравнения. Будет показано, что подобные уравнения имеют место в (r, θ) - и (x, y) -геометриях и что аналогичные условия используются на внешних и внутренних границах. Для дальнейшего обсуждения удобно записать уравнение (2.34) в матричной форме.

Пусть

$$f = \begin{vmatrix} \dot{f}_{1,1} \\ \dot{f}_{2,1} \\ \vdots \\ \dot{f}_{N-1,1} \\ \dot{f}_{1,2} \\ \vdots \\ \dot{f}_{N-1,M-1} \end{vmatrix} \quad \text{и} \quad W = \begin{vmatrix} e_{1,1} - a_1 & & & -b_{1,1} & & & \\ -c_{2,1} & e_{2,1} - a_{2,1} & & & -b_{2,1} & & \\ & & \cdot & & & & \cdot \\ & & & \cdot & & & \cdot \\ & & & & \cdot & & \\ & & -c_{N-1,1} & e_{N-1,1} & & & \\ -d_{1,2} & & & & & e_{1,2} & \\ & & \cdot & & & \cdot & \\ & & & \cdot & & & \cdot \end{vmatrix} \quad (2.39)$$

и пусть h означает вектор-столбец с элементами $h_{s,t}$. Пренебрегая членом $\varepsilon_{s,t}$, можно записать уравнение (2.34) как

$$-Wf = h. \quad (2.40)$$

В матричном анализе принято обозначать элементы вектора-столбца f как f_1, f_2, \dots , а элементы матрицы W как W_{ij} . Таким образом,

$$f = \begin{vmatrix} \dot{f}_1 \\ \dot{f}_2 \\ \vdots \\ \dot{f}_P \end{vmatrix}, \quad W = \begin{vmatrix} W_{1,1} & W_{1,2} & W_{1,3} & \dots & W_{1,P} \\ W_{2,1} & & & & \\ \vdots & & & & \\ W_{P,1} & \dots & \dots & \dots & W_{P,P} \end{vmatrix}. \quad (2.41)$$

Различие между записями (2.39) и (2.41) связано лишь с разницей в обозначениях. Действительно, мы имеем соотношения

$$\left. \begin{array}{ll} f_1 = f_{1,1}, & W_{1,1} = e_{1,1}, \\ f_2 = f_{2,1}, & W_{1,2} = -a_{1,1}, \\ \vdots & \\ f_{N-1} = f_{N-1,1}, & W_{1,3} = 0, \\ f_N = f_{1,2}, & W_{2,1} = -c_{2,1}, \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ f_P = f_{N-1, M-1} & W_{N, M} = e_{1,2}, \\ & W_{P, P} = e_{N-1, M-1}, \end{array} \right\} \quad (2.42)$$

из которых видно, что $P = (N - 1)(M - 1)$. Являясь матрицей, W имеет некоторые интересные свойства.

С.1. W — симметричная матрица. Это следует из соотношений (2.35) и (2.36), так как

$$\begin{array}{ll} c_{2,1} = a_{1,1}, & c_{3,1} = a_{2,1}, \dots \\ d_{1,2} = b_{1,1}, & d_{2,2} = b_{2,1} \dots \end{array}$$

С.2. Диагональные элементы W положительны. Недиагональные элементы равны нулю или отрицательны.

С.3. Диагональный член любой строки W равен или больше по модулю суммы недиагональных элементов этой строки. Разность между диагональным элементом и суммой недиагональных элементов обычно равна k , где величина k определена уравнением (2.38). По определению k положительна или равна нулю. Для узловых точек, прилегающих к границе, указанная разность равна k плюс положительная величина. Например, для первой узловой точки разность равна $e_{1,1} - (a_{1,1} + b_{1,1})$, что можно записать как $k_{1,2} + c_{1,1} + d_{1,1}$.

2.4.4. Полезно помнить физический смысл членов уравнения. Член $a_{s,t} (f_{s+1,t} - f_{s,t})$ представляет собой утечку нейтронов через границу S_2 , $k_{s,t} f_{s,t}$ отвечает за поглощение в объеме $V_1 + V_2 + V_3 + V_4$. Член $h_{s,t}$ представляет собой источник нейтронов из других энергетических групп; $\epsilon_{s,t}$ является погрешностью конечно-разностного представления и должна быть малой величиной. В дальнейшем мы вернемся к детальному рассмотрению $\epsilon_{s,t}$, а пока лишь предположим, что интервалы сетки достаточно малы и можно пренебречь величиной $\epsilon_{s,t}$.

2.4.5. В разд. 2.4.2 был приведен метод получения конечно-разностных уравнений. Существуют другие методы вывода этих уравнений (см. [13]), в частности, с помощью рядов Тейлора и на основе вариационных методов. Для обычных гомогенных реакторов различные методы дают, как правило, те же самые результаты. Для более сложной ситуации конечно-разностные уравнения могут отличаться членами порядка Δr^2 . Преимущество изложенного в разд. 2.4.2 метода состоит в том, что он дает симметричный разностный оператор и что он может легко быть использован в сложных задачах, как мы увидим в § 2.5. Во многих областях физики необходимо решать уравнения вида (2.1), но обычно D не зависит от пространственных координат. Для таких задач можно и часто целесообразно использовать девятиточечную аппроксимацию оператора ∇^2 . Эта аппроксимация более точна, чем пятиточечная формула, которую мы только что использовали. В задачах расчета реакторов D изменяется по пространственным координатам и очень часто через каждые одну или две узловые точки. В этих условиях обычная техника вывода девятиточечной формулы неприменима.

§ 2.5. РАЗНОСТНЫЕ УРАВНЕНИЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ

2.5.1. Рассмотрим одну из внешних границ, например границу $r = r_N$. Если имеет место условие (2.25а), положим просто $f_{N,t}$ равным нулю для всех t . Если требуется выполнение условия (2.25в), проинтегрируем уравнение (2.22) по объему $r_N - \Delta r_{N-1} \leq r \leq r_N$, $z_t - \Delta z_{t-1} \leq z \leq z_t + \Delta z_t$. Вклад V_1 и V_4 теперь равен нулю, вклады V_2 и V_3 не изменились, равно как и вклады от поверхностей S_0, S_1, S_3 и S_5 . Поверхности S_6, S_2, S_4, S_7 теперь отсутствуют. Тем не менее мы имеем две новые поверхности S_2' и S_4' (рис. 2.4). Вклад от S_2' составляет

$$\int D(r, z) \frac{\partial f}{\partial r} dS_2 = - \int \lambda(r, z) f(r, z) dS_2 \approx -\lambda_{N,t} f_{N,t} 2\pi r_N \Delta z_t. \quad (2.43)$$

Таким образом, видно, что уравнения на внешней границе можно получить из уравнений (2.34) и (2.35) следующим путем. Положим

$$s = N, \quad D_{N,t} = B_{N,t} = 0 \quad (2.44a)$$

для всех t . Добавим член

$$2\pi r_N [\lambda_{N,t} \Delta z_t + \lambda_{N,t-1} \Delta z_{t-1}] \quad (2.44б)$$

к величине $k_{N,t}$. Для граничных условий при $z = z_M$ можно вывести аналогичные условия. Положим

$$D_{s,M} = B_{s,M} = 0 \quad (2.45a)$$

для всех s . Добавим

$$\pi [r_s^2 - (r_s - \Delta r_{s-1})^2] \lambda_{s-1,M} + \pi [(r_s + \Delta r_s)^2 - r_s^2] \lambda_{s,M} \quad (2.45б)$$

к члену $k_{s,M}$. Для граничного условия при $z = z_0$ найдем

$$D_{s,-1} = B_{s,-1} = 0 \quad (2.46a)$$

для всех s . Добавим член

$$\pi [r_s^2 - (r_s + \Delta r_{s-1})^2] \lambda_{s-1,0} + \pi [(r_s + \Delta r_s)^2 - r_s^2] \lambda_{s,0} \quad (2.46б)$$

к $k_{s,0}$. Для обычной (r, z) -геометрии, где $r_0 = 0$ и $\lambda_{0,t} = 0$, мы положили бы просто

$$D_{-1,t} = B_{-1,t} = 0 \quad (2.47)$$

для всех t . Заметим, что для всех уравнений сохраняется свойство

$$e_{s,t} \geq a_{s,t} + b_{s,t} + c_{s,t} + d_{s,t}. \quad (2.48)$$

Записывая уравнения (2.39) и (2.40), мы неявно предполагали выполнение условия $f(r, z) = 0$ на внешних границах. Если граничным условием является соотношение (2.25в), то f содержит элементы $f_{0,0}, f_{1,0}, f_{N,0}, f_{N,1}, \dots, f_{N,M}$ и $P = (N+1)(M+1)$. Создавая программы расчета реакторов, обычно допускают существование полного массива $(N+1)(M+1)$ узловых точек. Если $f(r, z) = 0$ на внешней границе, то можно положить $k_{s,0} = k_{0,t} = k_{N,t} = k_{s,M} = K$, где K — достаточно большое число; тогда соответствующие величины $f_{s,t}$ будут равны нулю.

2.5.2. Рассмотрим теперь некоторые другие типы задач физики реакторов, которые можно решить с помощью описанных в предыдущем разделе методов. Реактор может иметь нестандартную внешнюю границу, как показано на рис. 2.5. В этих случаях граница может быть аппроксимирована совокупностью линий сетки. Для ячеек сетки, расположенных внутри системы, коэффициенты конечно-разностной схемы должны иметь обычный вид. Для ячеек вне

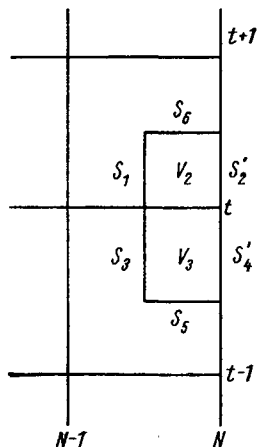


Рис. 2.4. Площадь интегрирования вблизи внешней границы.

системы можно принять весьма большие значения сечений поглощения. Тогда поток в соответствующих точках обратится в нуль. В конечно-разностных уравнениях высокие сечения поглощения приводят к увеличению члена k , что заставляет стремиться к нулю $f_{s, t}$ за пределы аппроксимированной границы. Возможно интерпретировать искривленную границу и более точным способом. Этот способ обсуждается, например, в работе [3], но, как правило, не приме-

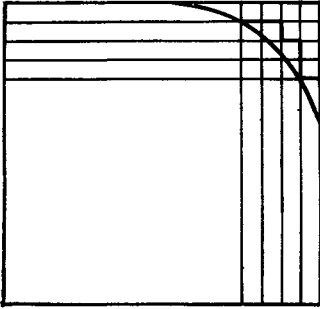


Рис. 2.5. Приближенное представление непрямоугольной границы.

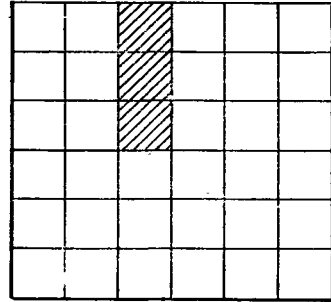


Рис. 2.6. Представление стержня управления.

няется в программах, так как приближенное описание границы приводит обычно к меньшим ошибкам, чем погрешности из-за других необходимых приближений, таких, как малогрупповое приближение, гомогенизация топливных стержней и т. д.

2.5.3. В некоторых случаях реактор включает в себя зоны, где неприменимы уравнения диффузии. На рис. 2.6, например, изображен реактор со

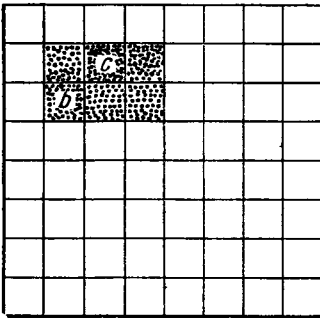


Рис. 2.7. Типичная внутренняя граница.

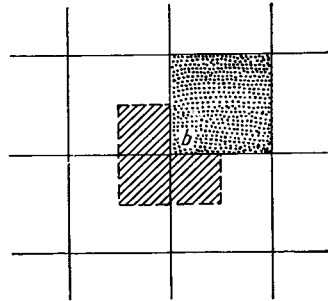


Рис. 2.8. Точка b требует L-образной площади интегрирования.

стержнем управления. В (x, y) - или (r, θ) -геометрии аналогичный случай может выглядеть так, как показано на рис. 2.7. Для задач, представленных на рис. 2.6 и 2.7, условия на границах сильно поглощающей нейтроны зоны, содержащей стержень, записываются в виде

$$D \nabla^2 f = \lambda f. \quad (2.49)$$

Конечно-разностные уравнения для таких систем представляются следующим образом: для точек, не попавших внутрь или на поверхность зоны поглощения, уравнения сохраняют прежний обычный вид; для точек на краю зоны поглощения выбираем область интегрирования по способу, представленному на рис. 2.4. На рис. 2.8 показана область интегрирования для точки b . Следуя

процедуре, разработанной для уравнения (2.43), нетрудно видеть, что если точка b соответствует узловой точке (s, t) , то

$$a_{s,t} = (2.35) \quad \text{с} \quad D_{s,t} = 0, \quad (2.50)$$

$$b_{s,t} = (2.36) \quad \text{с} \quad D_{s,t} = 0, \quad (2.51)$$

$$c_{s,t} \quad \text{и} \quad d_{s,t} \quad \text{не изменяются,} \quad (2.52)$$

$$k_{s,t} = (2.38) \quad \text{с} \quad B_{s,t} = 0 \quad \text{плюс член} \\ Z_{s,t} \lambda_{s,t} + 2\pi r_s \Delta z_t \lambda_{s,t}. \quad (2.53)$$

Этот последний член ответствен за утечку через границу зоны поглощения. Для точек, расположенных внутри этой зоны, положим $k_{s,t}$ равным достаточно большому числу. Строго говоря, такие точки, как c (см. рис. 2.7), не относятся к рассматриваемой задаче. Поток в этих точках не определен. Решая задачу, можно обойти такие точки или (что легче на практике) можно ликвидировать такие точки, полагая относящиеся к ним коэффициенты k равными большим положительным числам.

2.5.4. Другой тип задач, возникающих на практике, — это расчет реакторов, содержащих полости. Если полость расположена вдоль оси реактора, то разумно положить

$$\nabla f = 0 \quad (2.54)$$

на границах полости. Уравнение (2.54) не является точным, потому что нейтроны могут перетекать вдоль полости из районов с высоким потоком в районы с низким потоком нейтронов. В общем случае задачи, связанные с полостями и воздушными зазорами, не могут быть решены с помощью диффузионной теории. Можно положить $D(r, z) = A(r, z) = 0$ внутри полости; но это не только неверно с физической точки зрения, но и катастрофически плохо действует на программы. Лучшее, что можно сделать в таких задачах, — оценить длину экстраполяции в полости и использовать граничное условие (2.49).

§ 2.6. ЗАДАЧИ В РАЗЛИЧНЫХ ГЕОМЕТРИЯХ

2.6.1. Рассуждения, приведенные в § 2.4 и 2.5, можно легко повторить для других геометрий. Ясно, что уравнения (2.34)—(2.38) справедливы для (x, y) - и (r, θ) -геометрий при следующих изменениях.

Для (x, y) -геометрии надо осуществить замену $x \rightarrow r, y \rightarrow z$, и, положив

$$R_{s,t} = \Delta y_t, \quad Z_{s,t} = \Delta x_s, \quad V_{s,t} = \Delta x_s \Delta y_t,$$

в уравнении (2.44б) к члену $k_{N,t}$ добавить

$$[\lambda_{N,t} \Delta y_t + \lambda_{N,t-1} \Delta y_{t-1}] \quad (2.55)$$

и т. д.

Для (r, θ) -геометрии (рис. 2.9) необходимо ввести замену $z \rightarrow \theta$ и положить

$$R_{s,t} = (r_s + \Delta r_s) \Delta \theta_t, \quad Z_{s,t} = \Delta r_s, \quad V_{s,t} = \frac{1}{2} [(r_s + \Delta r_s)^2 - r_s^2] \Delta \theta_t.$$

Затем в уравнении (2.44б) к члену $k_{N,t}$ следует добавить

$$r_{N,t} [\lambda_{N,t} \Delta \theta_t + \lambda_{N,t-1} \Delta \theta_{t-1}] \quad (2.56)$$

и т. д.

2.6.2. В (r, θ) -геометрии появляются две дополнительные проблемы. Все точки $s = 0$ ($t = 1, 2, \dots, M$) представляют одну и ту же физическую точку и поэтому трудно написать непротиворечивую систему уравнений. Одно из решений задачи — исключить центральную точку из конечно-разностных уравнений. Для определения модифицированных разностных уравнений от-

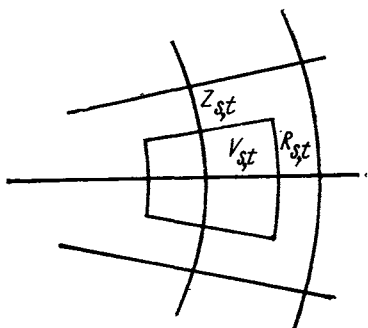


Рис. 2.9. Конечно-разностная (r, θ) -сетка.

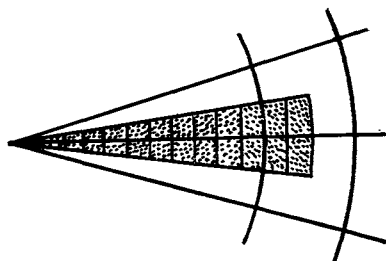


Рис. 2.10. Площадь интегрирования в центре для (r, θ) -геометрии.

носителю $f_{1,t}$ используем площадь интегрирования, показанную на рис. 2.10, с условиями

$$R_{0,t} = 0, \tag{2.57a}$$

$$Z_{0,t} = 2\Delta r_0, \tag{2.57б}$$

$$V_{0,t} = \frac{1}{2} r_1^2 \Delta \theta_t. \tag{2.57в}$$

Следствием условия (2.57а) является равенство

$$c_{1,t} = 0. \tag{2.57г}$$

Таким образом, $f_{0,t}$ не входит в соответствующие уравнения.

2.6.3. Вторая трудность при рассмотрении (r, θ) -геометрии — циклические граничные условия, с которыми приходится иметь дело:

$$f(r, \theta + 2\pi) = f(r, \theta). \tag{2.58}$$

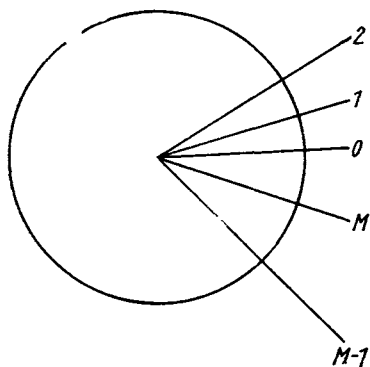


Рис. 2.11. Периодичность сетки в (r, θ) -геометрии.

Узловые точки выбираются обычным способом, так что каждая внутренняя граница должна лежать на линии сетки. Одна из линий сетки $\theta = \text{const}$ нумеруется индексом $t = 0$, другие линии — в соответствующей последовательности (рис. 2.11). Нетрудно видеть, что конечно-разностные уравнения могут быть записаны как обычно, например,

$$a_{s,0} f_{s+1,0} + b_{s,0} f_{s,1} + c_{s,0} f_{s-1,0} + d_{s,0} f_{s,M} - e_{s,0} f_{s,0} = h_{s,0}, \tag{2.59}$$

где

$$d_{s,0} = b_{s,M}. \tag{2.60}$$

В этих задачах удобно расположить элементы вектора в порядке $[f_{1,0}; f_{1,1}; \dots; f_{1,M}; f_{2,0} \dots]$ вместо ранее принятого $[f_{1,0}; f_{2,0}; \dots; f_{N-1,0};$

$f_{1,1} \dots]$. Тогда матрица W в уравнении (2.39) примет вид

$$W = \begin{vmatrix} e_{1,0} & -b_{1,0} & & -d_{1,0} & \dots & -a_{1,0} & & \\ & & & & \vdots & & & \\ -d_{1,1} & e_{1,1} & & -b_{1,1} & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ -b_{1,M} & & & -d_{1,M} & e_{1,M} & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ -c_{2,0} & & & & & & e_{2,0} & \\ & \ddots & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & \ddots & \end{vmatrix} \quad (2.61)$$

Эта матрица остается все еще симметрической, так как $d_{1,0} = b_{1,M}$. При обсуждении конечно-разностных уравнений мы не будем заострять внимание на трудностях, возникающих в (r, θ) -геометрии, хотя некоторые последующие замечания несправедливы для подобных задач. В соответствующих местах мы укажем, как можно решать задачу с циклическими условиями.

§ 2.7. НЕКОТОРЫЕ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЕ ЗАДАЧИ

2.7.1. В уравнениях, приведенных в § 2.4—2.6, была использована запись

$$f_{s,t} = f(r_s, z_t). \quad (2.62)$$

Это означало, что точка, в которой определяется поток, выбирается на пересечении двух линий сетки. Однако можно выбрать такую точку в середине ячейки сетки, т. е. положить

$$f_{s,t}^m = f(r_s + \Delta r_s, z_t + \Delta z_t). \quad (2.63)$$

Чтобы избежать недоразумений, будем приписывать индекс m всем величинам, связанным с серединами интервалов сетки. Для потока нейтронов в этом случае конечно-разностные уравнения получаются интегрированием уравнения (2.22) по объему

$$r_s \leq r \leq r_{s+1} \quad \text{и} \quad z_t \leq z \leq z_{t+1}. \quad (2.64)$$

Найдем конечно-разностное уравнение в форме

$$a_{s,t}^m f_{s+1,t}^m + b_{s,t}^m f_{s,t+1}^m + c_{s,t}^m f_{s-1,t}^m + d_{s,t}^m f_{s,t-1}^m - e_{s,t}^m f_{s,t}^m = h_{s,t}^m, \quad (2.65)$$

где

$$c_{s,t}^m = a_{s-1,t}^m, \quad d_{s,t}^m = b_{s,t-1}^m, \quad (2.66)$$

$$e_{s,t}^m = a_{s,t}^m + b_{s,t}^m + c_{s,t}^m + d_{s,t}^m + k_{s,t}^m, \quad (2.67)$$

$$h_{s,t}^m = B_{s,t}^m V_{s,t}, \quad V_{s,t}^m = \pi [r_{s+1}^2 - r_s^2] 2\Delta z_t. \quad (2.68)$$

Уравнения (2.65)—(2.67) имеют ту же структуру, что и ранее, а уравнение (2.68) несколько проще. Уравнения относительно $a_{s,t}^m$ и $b_{s,t}^m$ получить труднее

соответствующих уравнений (2.35) и (2.36). В работе [4] показано, что

$$a_{s,t}^m = D_{s,t}^m R_{s,t}^m / (\Delta r_{s+1}), \quad (2.69)$$

где

$$R_{s,t}^m = 2\pi r_{s+1} 2\Delta z_t \quad (2.70)$$

и

$$\frac{(\Delta z_s + \Delta r_{s+1})}{D_{s,t}^m} = \frac{\Delta r_s}{D_{s,t}} + \frac{\Delta r_{s+1}}{D_{s+1,t}}. \quad (2.71)$$

2.7.2. В середине гомогенных зон ($\Delta r_s = \Delta r_{s+1}$, $D_{s,t} = D_{s+1,t} = D_{s,t+1}$) $k_{s,t}^m = k_{s,t}$, $a_{s,t}^m = a_{s,t}$ и т. д. Уравнения различаются на внутренних границах и могут, следовательно, давать немного разные результаты. Расчет величин $k_{s,t}^m$ проще, чем расчет $k_{s,t}$, однако получение $a_{s,t}$ осуществляет-

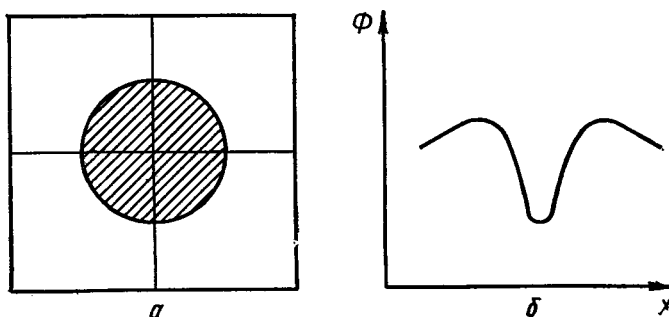


Рис. 2.12. Сетка вбли и топливного стержня (а) и типичное распределение потока (б).

ся более простым способом, чем $a_{s,t}^m$, и, кроме того, легче оценить ошибку аппроксимации. В многогрупповых задачах простота расчета k^m может обеспечить решающее преимущество. Член S в уравнении (2.2) фактически включает в себя несколько отдельных членов, соответствующих процессам рассеяния, деления и перехода нейтронов из одних групп в другие. Каждый член в составе S должен быть обработан в соответствии с (2.38) или (2.68). Последняя форма делает возможным разделение геометрических коэффициентов и членов, зависящих, от сечений, что позволяет уменьшить количество информации, подлежащей хранению. Методы решения конечно-разностных уравнений одни и те же для обеих рассмотренных схем.

2.7.3. Существуют другие типы реакторов, для расчета которых могут быть записаны пятиточечные разностные уравнения. Методы, описанные в предыдущих разделах, применяются непосредственно к системам, показанным на рис. 2.1, а; в некоторых случаях методы конечных разностей можно использовать для расчета систем, изображенных на рис. 2.1, б.

На рис. 2.12 мы показали часть сетки вблизи топливных стержней. Пятиточечное конечно-разностное уравнение следует записать для всей сетки. Для точек, расположенных в замедлителе, можно использовать обычную схему получения конечно-разностных уравнений. Однако вблизи топливных стержней обычные способы не подходят из-за быстрого изменения потока нейтронов, что противоречит аппроксимации (2.33).

Другой метод получения конечно-разностных уравнений зависит от физической сущности явлений для частной задачи, тем не менее его можно продемонстрировать на конкретной задаче. Предположим, что стержень является частью решетки стержней, имеющих приблизительно те же характеристики. Рассмотрим поведение нейтронов тепловой группы в ячейке, окружающей стержень. Допустим, что существует постоянный источник нейтронов, замедляющихся в отражателе, и решим уравнения диффузии для потока тепловых

нейтронов. Эта задача достаточно проста [1] и может быть решена аналитически. Обозначим аналитическое решение $\Phi(x, y)$. Предположим, что можно написать конечно-разностное уравнение

$$D(f_{s+1, t} + f_{s, t+1} + f_{s-1, t} + f_{s, t-1} - 4f_{s, t}) - k_{s, t} f_{s, t} + (Cg)_{s, t} = 0, \quad (2.72)$$

где D — коэффициент диффузии тепловых нейтронов в отражателе. Константа $k_{s, t}$ подобрана так, что функция $\Phi(x, y)$ удовлетворяет уравнению (2.72), т. е.

$$k_{s, t} = \{D[\Phi(x_{s+1}, y_t) + \Phi(x_s, y_{t+1}) + \Phi(x_{s-1}, y_t) + \Phi(x_s, y_{t-1}) - 4\Phi(x_s, y_t)] - (Cg)_{s, t}\} / \Phi(x_s, y_t), \quad (2.73)$$

где член $(Cg)_{s, t}$ равен постоянному источнику, проинтегрированному по той части отражателя, которая ограничена прямыми $x_s \pm \Delta x_s, y_t \pm \Delta y_t$. Основная идея этого метода состоит в том, что поток в реакторе подобен $\Phi(x, y)$ и, следовательно, разностные уравнения должны быть выбраны так, чтобы воспроизвести эту форму. Эндерби [5] успешно использовал схему такого типа при решении сложной задачи для теплового реактора. Вудс [6] предложил простой и точный метод вывода конечно-разностных уравнений для аналогичных, но не реакторных задач.

2.7.4. Можно получить конечно-разностные уравнения для прямоугольной сетки. Нетрудно ввести, например, прямоугольную конечно-разностную сетку в реакторе и наблюдать поведение реактора в процессе его расширения или плавления. Может оказаться полезным использовать такую сетку, которая движется вместе с движением системы, ввиду чего она становится прямоугольной. Мак-Нил в работе [7] обсуждал возможности использования сеток такого типа, а Пирс [27] рассмотрел задачи, в которых прямоугольные сетки имеют преимущество.

§ 2.8. ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

2.8.1. Если $f(r, z)$ является решением уравнения диффузии (2.3), то

$$\int D(r, z) \frac{\partial f}{\partial n}(r, z) dS - \int B(r, z) f(r, z) dV + \int C(r, z) g(r, z) = 0, \quad (2.74)$$

где V — некоторый объем, имеющий поверхность S , а n — внешняя нормаль к поверхности. Рассмотрим уравнение (2.34), где члены

$$L_{s, t} = a_{s, t}(f_{s+1, t} - f_{s, t}) + \dots + d_{s, t}(f_{s, t-1} - f_{s, t}) \quad (2.75)$$

представляют утечку из объема, определенного неравенствами (2.23). Просуммируем уравнения (2.80) по всем значениям

$$s = i, i+1, i+2, \dots, j, \quad (2.76)$$

$$t = l, l+1, l+2, \dots, m. \quad (2.77)$$

В силу равенств

$$c_{s, t} = a_{s-1, t} \quad (2.78)$$

и

$$d_{s, t} = b_{s, t-1} \quad (2.79)$$

имеем

$$\sum_{s=i}^j \sum_{t=l}^m L_{s, t} = \sum_{t=l}^m a_{j, t}(f_{j+1, t} - f_{j, t}) + c_{i, t}(f_{i-1, t} - f_{i, t}) + \sum_{s=i}^j b_{s, m}(f_{s, m+1} - f_{s, m}) + d_{s, l}(f_{s, l-1} - f_{s, l}). \quad (2.80)$$

Теперь члены в правой части уравнения (2.80) относятся к границе области $i \leq s \leq j$ и $l \leq t \leq m$ и поэтому они соответствуют члену $\int D\delta f / \delta n dS$ в уравнении (2.74). Просуммировав уравнения (2.34) для этих значений s и t , получим

$$\sum_s \sum_t (L_{s,t} - k_{s,t} f_{s,t} + h_{s,t}) = 0, \quad (2.81)$$

что является аналогом уравнения (2.74). Заметим, что уравнение (2.81) является в известном смысле точным. Именно, если функция $f_{s,t}$ — решение уравнения (2.34), то она удовлетворяет уравнению (2.81).

2.8.2. Пусть $f(r, z)$ — некоторая функция двух переменных. Если известны значения $f(r, z)$ в конечном числе точек, то можно аппроксимировать интегралы от этой функции различными методами, например методом трапеций или методом Симпсона. Подобная приближенная процедура всегда вносит в результаты расчета небольшие погрешности. Уравнение (2.81) показывает, что если выполнять численное интегрирование простым суммированием, т. е. полагая

$$\int f(r, z) dV = \sum f_{s,t} V_{s,t}, \quad (2.82)$$

то аналог уравнения (2.74) будет удовлетворяться точно. Это подтверждает мысль, что необходимо использовать приближенную формулу (2.82) и нельзя применять другие схемы.

2.8.3. Рассмотрим теперь задачу решения сопряженных уравнений. Для упрощения выкладок ограничимся двухгрупповой задачей

$$\left. \begin{aligned} D_1 \nabla^2 f_1 - B_1 f_1 + v C_1 f_2 &= 0, \\ D_2 \nabla^2 f_2 - B_2 f_2 + C_2 f_1 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.83)$$

с соответствующими сопряженными уравнениями

$$\left. \begin{aligned} D_1 \nabla^2 f_1^* - B_1 f_1^* + C_2 f_2^* &= 0, \\ D_2 \nabla^2 f_2^* - B_2 f_2^* + v^* C_1 f_1^* &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.84)$$

Известно, что сопряженная задача имеет те же собственные значения, что и прямая, т. е.

$$v^* = v. \quad (2.85)$$

Было показано, как уравнения (2.83) можно аппроксимировать некоторой системой уравнений или уравнением (2.40) в двухгрупповой (матричной) форме

$$\begin{bmatrix} W_1 & v_f C_1 \\ C_2 & W_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} = 0. \quad (2.86)$$

Записав v_f , мы подчеркнули, что собственное значение уравнения (2.86) будет несколько отличаться от точной величины v уравнения (2.83). Сопряженное уравнение имеет вид

$$\begin{bmatrix} W_1^T & C_2^T \\ v_f^* C_1^T & W_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1^* \\ f_2^* \end{bmatrix} = 0, \quad (2.87)$$

где индекс T означает транспонирование матрицы. Из матричного анализа известно, что

$$v_f^* = v_f. \quad (2.88)$$

Матрицы W и G — симметрические и, следовательно,

$$\begin{bmatrix} W_1 & C_2 \\ v_f C_1 & W_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1^* \\ f_2^* \end{bmatrix} = 0. \quad (2.89)$$

Ценность уравнения (2.89) заключается в следующем. Если уравнения (2.84) преобразовать с помощью излагаемой в § 2.4 процедуры, то мы придем к системе (2.89). Таким образом, конечно-разностное представление сопряженных уравнений эквивалентно операции сопряжения прямых конечно-разностных уравнений. Это утверждение — не тавтология, оно следствие симметричности матрицы W .

2.8.4. Пусть (g_1, g_2) — некоторый вектор. Умножив на него скалярно уравнение (2.89), получим

$$g_1 W_1 f_1^* + g_1 C_2 f_2^* + g_2 v_f C_1 f_1^* + g_2 W_2 f_2^* = 0. \quad (2.90)$$

Предположим теперь, что коэффициенты уравнения (2.86) отклонены на небольшие величины от первоначального значения, так что

$$\begin{bmatrix} W_1 + dW_1 & (v_f + dv)(C_1 + dC_1) \\ C_2 + dC_2 & W_2 + dW_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 + df_1 \\ f_2 + df_2 \end{bmatrix} = 0. \quad (2.91)$$

Умножим скалярно уравнение (2.91) на вектор (f_1^*, f_2^*) . Тогда

$$\begin{aligned} f_1^* W_1 f_1 + f_1^* W_1 df_1 + f_1^* dW_1 f_1 + f_1^* v_f C_1 f_2 + f_1^* v_f C_1 df_2 + f_1^* v_f dC_1 f_2 + \\ + f_2^* C_2 f_1 + f_2^* C_2 df_1 + f_2^* dC_2 f_1 + f_2^* W_2 f_2 + f_2^* W_2 df_2 + \\ + f_2^* dW_2 f_2 + dv f_1^* C_1 f_2 + \text{член второго порядка малости} = 0. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Уравнение (2.90) при $g = f$ и $g = df$ можно использовать для упрощения (2.92). В результате получим

$$-dv = [f_1^* f_2^*] \begin{bmatrix} dW_1 & v_f dC_1 \\ dC_2 & dW_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} / (f_1^* C_1 f_2). \quad (2.93)$$

Уравнение (2.93) представляет собой конечно-разностное уравнение теории возмущений. Снова отметим, что обычные формулы интегрирования формул теории возмущений заменены формулами суммирования. Формула (2.93) аналогична первой формуле теории возмущений, приведенной в [1].

§ 2.9. ТОЧНОСТЬ. ВЫБОР СЕТКИ

2.9.1. В некоторых простых задачах удается получить в явном виде различие между решением уравнений диффузии и их разностных аналогов (см., например, [8], стр. 165). В практике получить какую-либо точную оценку этого различия — слишком сложная задача. Дадим здесь один из подходов, носящий эвристический характер.

2.9.2. Анализ эффекта ошибок округления можно разделить на две части. Во-первых, необходимо оценить локальную погрешность $\varepsilon_{s,t}$ в уравнении (2.34). Во-вторых, необходимо уметь оценивать эффект $\varepsilon_{s,t}$ при расчете v . Аппроксимация (2.33а) порождает погрешность

$$|\varepsilon_{s,t}| = B_{s,t} V_{s,t} |f(r_s + \xi_1 \Delta r_s, z_t + \xi_2 \Delta z_t) - f(r_s, z_t)|, \quad (2.94)$$

т. е.

$$|\varepsilon_{s,t}| \leq B_{s,t} V_{s,t} \Delta f_{s,t}, \quad (2.95)$$

где

$$\Delta f_{s,t} = \max_{0 \leq \xi_1, \xi_2 \leq 1} |f(r_s + \xi_1 \Delta r_s, z_t + \xi_2 \Delta z_t) - f(r_s, z_t)|. \quad (2.96)$$

Погрешность, возникающая вследствие аппроксимации (2.33б) и (2.33в), есть

$$|\varepsilon_{s,t}| \leq D_{s,t} R_{s,t} \Delta df_{s,t}, \quad (2.97)$$

где

$$\Delta df_{s,t} = \max_{0 \leq \xi_3, \xi_4 \leq 1} \left| \frac{\partial f}{\partial r}(r_s + \Delta r_s, z_t + \xi_3 \Delta z_t) - \frac{\partial f}{\partial r}(r_s + \xi_4 \Delta r_s, z_t) \right|. \quad (2.98)$$

Следовательно, локальная погрешность возникает из двух источников: погрешности (2.94), которая пропорциональна изменению f внутри одной ячейки сетки, и погрешности (2.97), пропорциональной изменению производной f внутри той же области. Рассмотрим теперь эффект от локальной погрешности. Предположим, что в уравнении (2.34) мы положили $\varepsilon_{s,t} = 0$ и решили его относительно $f_{s,t}$ (и аналогичная операция определена для сопряженной функции $f_{s,t}^*$). Если рассмотреть теперь задачу с $\varepsilon_{s,t} \neq 0$, то решение будет немного другим. Повторим теперь анализ разд. 2.8.4, начиная с уравнений

$$\begin{vmatrix} W_1(v+dv) & C_1 \\ C_2 & W_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1 + df_1 \\ f_2 + df_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{vmatrix}, \quad (2.99)$$

и получим, что

$$dv = (f_1^* \varepsilon_1 + f_2^* \varepsilon_2) / f_1^* C_1 f_2. \quad (2.100)$$

Эти результаты показывают, что погрешность имеет наибольший эффект в областях с наивысшей ценностью нейтронов [9]. Отсюда же можно сделать почти очевидное заключение, что размеры ячеек сетки должны быть малы там, где велико D либо B или где функция f изменяется с большой скоростью.

2.9.3. Сетка должна выбираться по возможности равномерной, так что отношения $\Delta r_s / \Delta r_{s-1}$ и $\Delta z_t / \Delta z_{t-1}$ не должны быть большими. Кроме того, рекомендуется иметь небольшие Δr_s и Δz_t , если D или B велико или если f быстро изменяется. Сделав разумный выбор сетки, необходимо проверить точность, если это возможно, повторив по крайней мере одну задачу для вчетверо большего числа точек.

§ 2.10. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА МАТРИЦ

2.10.1. Мы закончили обсуждение вопросов получения конечно-разностных уравнений. Следующей задачей является решение этих уравнений. Необходимо помнить, что типичная задача должна иметь от 1000 до 50 000 узловых точек в каждой энергетической группе. Методы решения задач будут основаны на некоторых свойствах матриц, которые мы сейчас приведем. Доказательства последующих утверждений можно найти в книгах по матричному анализу, например в [10].

2.10.2. Обозначим через X квадратную матрицу n -го порядка. Пусть x — вектор с числом компонент n . Элемент матрицы X запишем как X_{ij} , а элемент вектора x — как x_j . Предположим, что все X_{ij} — вещественные числа, хотя некоторые из приведенных ниже свойств справедливы и для комплексных матриц.

С.1. Собственное число матрицы X есть корень μ характеристического уравнения

$$|X - \mu I| = 0,$$

где $|X - \mu I|$ — детерминант матрицы $X - \mu I$.

С.2. Если μ — собственное число, то существует вектор $x \neq 0$ такой, что

$$Xx = \mu x,$$

где x называется собственным вектором матрицы X , соответствующим собственному числу μ .

С.3. Матрица порядка n имеет не более n собственных чисел.

С.4. Можно найти матрицу T ($|T| \neq 0$) такую, что $XT = T\Omega$. Если X имеет n различных собственных чисел $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$, то Ω — диагональная матрица с элементами $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$. Более того, столбцы матрицы T являются

собственными векторами матрицы X . Если существуют кратные корни, например $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_i$, то соответствующая часть матрицы Ω имеет форму

$$\begin{vmatrix} \mu_1 & \beta_1 & & & \\ & \mu_2 & \beta_2 & 0 & \\ & & \cdot & \cdot & \\ 0 & & & & \beta_{i-1} \\ & & & & \mu_i \end{vmatrix},$$

где $\beta_1 = 1$ или 0 , $\beta_2 = 1$ или 0 , ..., $\beta_{i-1} = 1$ или 0 .

Матрица Ω известна как жорданова каноническая форма матрицы X .

С.5. Матрица T — невырожденная, поэтому ее столбцы линейно независимы, а следовательно, образуют базис в n -мерном векторном пространстве. Это значит, что любой n -вектор можно выразить в виде линейной комбинации столбцов T .

С.6. Если X является вещественной и симметрической матрицей, то Ω — диагональна (даже если существуют кратные корни). Более того, все собственные числа вещественны.

Введем некоторые определения.

Нормой вектора x будем называть $\|x\| \equiv (\sum x_i^2)^{1/2}$, а спектральной нормой матрицы X — $\|X\| \equiv \max_{\|x\| \neq 0} \|Xx\| / \|x\|$. Спектральным радиусом X

назовем $\rho(X) \equiv \max |\mu|$, где μ — любое собственное число X .

С.7. $\rho(X) \leq \|X\|$, где равенство выполняется, когда жорданова форма для X диагональна. Для вещественной симметрической матрицы жорданова форма является диагональной и $\rho(X) = \|X\|$.

С.8. Если X и S — матрицы размеров $n \times n$, то

$$\|X + S\| \leq \|X\| + \|S\|; \quad \|XS\| \leq \|X\| \|S\|.$$

С.9. Если X — любая матрица, то $\|X\|^2 = \rho(XX^T)$.

С.10. Если $\rho(X) \leq 1$, то последовательность X, X^2, X^3, \dots сходится к нулевой матрице. Можно рассмотреть простой пример. Матрица $\begin{pmatrix} 0,9 & 1 \\ 0 & 0,9 \end{pmatrix}$ имеет одно собственное число, а именно $0,9$. Следовательно, $\rho(X) = 0,9$. Из свойства С.9 ясно, что $\|X\| = (1,31 + \sqrt{1,06})^{1/2} = 1,53$. Последовательность X, X^2, X^4, \dots есть

$$\begin{vmatrix} 0,9 & 1 \\ 0 & 0,9 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0,81 & 1,8 \\ 0 & 0,81 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0,6561 & 2,916 \\ 0 & 0,6561 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0,4365 & 3,9263 \\ 0 & 0,4365 \end{vmatrix}, \\ \begin{vmatrix} 0,1905 & 3,427 \\ 0 & 0,1905 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0,03629 & 1,306 \\ 0 & 0,03629 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0,001316 & 0,09479 \\ 0 & 0,001316 \end{vmatrix} \dots$$

Недиагональные элементы возрастают вплоть до члена X^{16} и затем быстро уменьшаются. Легко видеть, что для этого частного случая

$$X^n = \begin{vmatrix} 0,9^n & n 0,9^{n-1} \\ 0 & 0,9^n \end{vmatrix}.$$

2.10.3. Матрицы, которыми мы интересуемся, а именно матрицы W в уравнении (2.40), имеют определенные специальные свойства. Прежде чем обсуждать их математические свойства, полезно проанализировать результаты, которые можно получить из физических соображений. Рассмотрим подкритический реактор, имеющий слабый источник нейтронов. Распределение потока есть функция источника и свойств реактора. Например, если удвоить интенсивность источника, то удвоится и величина потока. Если добавить в реактор делящееся вещество так, чтобы он стал критическим, то поток нейтронов примет форму критического потока и не будет зависеть от источника нейтронов. Таким образом, в случае подкритического реактора можно задать вопрос: какой поток

соответствует данному источнику? И на этот вопрос есть единственный ответ. Если реактор критический или надкритический, такой вопрос, вообще говоря, теряет смысл: на него нет однозначного ответа.

Сейчас мы интересуемся решением одногрупповой задачи (2.1) с соответствующими граничными условиями. Возникает вопрос: правильно ли поставлена задача? Ответ, полученный на основе физической модели (в применении к одной группе, а не к многогрупповой задаче в целом), таков: задача корректно поставлена при условии, что в отсутствие источника система, поле которой описывается уравнением

$$D\nabla^2 \Phi - B\Phi = \nu\Phi$$

(вместе с граничными условиями), является подкритической. Именно все решения написанного уравнения должны иметь ν меньше нуля. Система может быть подкритической, если имеют место процессы поглощения или утечки (или оба процесса). Ниже приведены примеры подкритических систем.

1. $B > 0$ и внешнее граничное условие $\nabla f = 0$.

2. $B = 0$ и внешнее граничное условие $\nabla f = 0$ на большей части границы и $f = 0$ на некоторых участках границы.

3. $B = 0$ и внешнее граничное условие $\nabla f = 0$ и условия типа «поглощающих стержней» на некоторых внутренних границах.

Теперь приведем примеры критических или надкритических систем.

4. $B = 0$ и внешнее граничное условие $\nabla f = 0$ без каких-либо граничных условий внутри системы.

5. $B < 0$ и граничные условия на внутренних границах типа 4.

6. $B > 0$ и любые внешние граничные условия, а граничные условия на внутренних границах имеют вид $D\nabla f = \lambda f$, где λ — большое отрицательное число, т. е. существует источник нейтронов в группе.

Задачи типа 1, 2 и 3 корректны и могут быть решены. Задачи типа 4, 5 и 6 не являются корректными и можно потерпеть неудачу при их решении. Существует и другой тип подобных задач, в которых одна часть системы не связана с остальными частями.

2.10.4. Теперь можно представить математические аналоги этих физических свойств. Очевидно, что ситуации, описанные в случае 2 предыдущего раздела, потребуют подробного математического разбора. Ограничимся здесь и в последующих разделах обсуждением свойств, представляющих непосредственный интерес. Варга [8] привел подробное обсуждение задач широкого класса.

Определим

$$P_i(X) = \sum_{j \neq i} |X_{ij}|,$$

где P_i является суммой модулей недиагональных элементов матрицы.

С.11. Если μ есть собственное число матрицы X , то μ лежит внутри или на границе круга

$$|z - X_{ii}| \leq P_i(X),$$

где z — комплексное число.

Запишем уравнение (2.40) в виде

$$(I - M)f = h, \tag{2.40}$$

где $M_{1,1} = 0$, $M_{1,2} = a_{1,1}/e_{1,1}$ и т. д.; $h_{1,1}$ — бывшее значение $h_{1,1}/e_{1,1}$ и т. д. Это уравнение получено из (2.34) делением его на $e_{s,t}$. Пользуясь свойством С.3 разд. 2.4.3, заключаем, что $P_i(M) \leq 1$ для всех величин i , и так как $M_{ii} = 0$, то $|\mu| \leq 1$. Если существует поглощение в каждой узловой точке, то $P_i(M) < 1$ и, следовательно, $|\mu| < 1$. Однако если $P_i(M) = 1$ для любого i , то свойства С.11 недостаточно, чтобы показать, что $|\mu| < 1$. Оно просто указывает, что значение μ меньше или равно единице. Очень важно для будущего анализа быть уверенным, что $|\mu|$ строго меньше единицы (а не равно

единице), даже если $P_i(M) = 1$ для почти всех i . Чтобы гарантировать это, необходимо следующее свойство.

С.12. Если X — неприводимая матрица и если μ лежит на границе объединения кругов, определенных в С.11, то все окружности $z - X_{ii} = P_i(X)$ проходят через μ .

Это свойство, примененное к конкретной интересующей нас матрице M , позволяет утверждать, что если $P_i(M) \leq 1$ для всех i и $P_i(M) < 1$ по крайней мере для одного i , то $|\mu| < 1$. На языке физики это означает, что если существует поглощение в любой узловой точке или если имеет место граничное условие (2.25а) либо (2.25б) или если справедливо условие (2.25в) либо (2.25г) и $\lambda > 0$, то $|\mu| < 1$.

Матрица считается неприводимой, если никакой перестановкой уравнений и перенумеровкой точек ее нельзя привести к виду

$$\begin{vmatrix} X_1 & X_2 \\ 0 & X_3 \end{vmatrix},$$

где X_1 и X_3 — квадратные матрицы и 0 — нулевая матрица. Например, матрица

$$\begin{vmatrix} 0 & 0,8 & 0,05 & 0,05 \\ 0 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

является приводимой. Поэтому, хотя $P_i = 1$ для $i = 2, 3$ и 4 и $P_1 < 1$, она имеет собственные числа, по модулю равные единице. Приводимая матрица такова, что для некоторых s и t существует ненулевой элемент $X_{t,s}$ и ненулевой элемент $X_{s,t}$. Симметрическая природа наших конечно-разностных уравнений исключает эту возможность для матрицы W , и легко видеть, что M — также неприводимая матрица.

2.10.5. Так как все собственные числа матрицы M по модулю меньше единицы, то матрица $I - M$ является невырожденной и, следовательно, существует решение уравнения (2.40), а именно

$$f = (I - M)^{-1} h.$$

Как мы увидим, прямые методы отыскания решения являются непрактичными и вместо них широко используются итерационные методы.

Пусть f^0 — произвольный вектор. Положим

$$\begin{aligned} f^1 &= Mf^0 + h, \\ f^2 &= Mf^1 + h, \\ &\dots \\ f^i &= Mf^{i-1} + h. \end{aligned}$$

После достаточного числа итераций f^i будет стремиться к точному решению f при условии, что матрица M удовлетворяет некоторым необходимым условиям. Если учесть, что

$$f = Mf + h,$$

то можно переписать уравнение в виде

$$f^i - f = M(f^{i-1} - f) = M^i(f^0 - f).$$

Следовательно, независимо от того, как выбран вектор f^0 , $\|f^i - f\|$ будет стремиться к нулю, если $\|M^i\| \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$. Так как $\rho(M) < 1$, то из свойства С.10 вытекает, что $\|f^i - f\|$ действительно будет стремиться к нулю.

В последующих разделах нам будет необходимо сравнить эффективность различных итерационных процессов. Чтобы сделать это, введем понятие скорости сходимости процесса $R(M)$:

$$R(M^i) = -(\ln \|M^i\|/i).$$

Если матрица M такова, что $\|M\| = \rho(M)$, то

$$R(M^1) = R(M^2) = \dots = -\ln \rho(M).$$

Значит, если мы хотим итерировать до тех пор, пока первоначальная ошибка не уменьшится, скажем, в 100 раз, необходимо потребовать, чтобы

$$\|M^i\| < 0,01 \quad \text{или} \quad iR < -\ln(0,01) = 4,76.$$

В общем случае $R(M^i)$ изменяется с номером i , но можно показать, что

$$\lim_{i \rightarrow \infty} R(M^i) = -\ln(\rho(M)).$$

С.13. Асимптотическая скорость сходимости есть скорость при достаточно больших величинах i . Рассмотрим две матрицы

$$\begin{pmatrix} 0,9 & 1 \\ 0 & 0,9 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 0,95 & 0 \\ 0 & 0,95 \end{pmatrix}.$$

В этом случае $R(M^i) \approx -\ln(0,9^i + i \cdot 0,9^{i-1})$ для первой матрицы и $R(M^i) = -i \ln(0,95)$ для второй. Таким образом, первая матрица имеет лучшую асимптотическую скорость сходимости, но сходится более медленно при первых восьмидесяти итерациях, чем вторая.

§ 2.11. МЕТОД ВЕРХНЕЙ РЕЛАКСАЦИИ

2.11.1. Вернемся теперь к проблеме решения уравнения (2.34) с $\varepsilon_{s,t} = 0$, т. е.

$$a_{s,t} f_{s+1,t} + b_{s,t} f_{s,t+1} + c_{s,t} f_{s-1,t} + d_{s,t} f_{s,t-1} - e_{s,t} f_{s,t} + h_{s,t} = \varepsilon_{s,t}, \quad (2.101)$$

или в эквивалентной матричной форме

$$Wf = h, \quad (2.102)$$

где W — матрица порядка NM .

Таким образом, необходимо решить систему из NM уравнений. Прямые методы решения являются в данном случае неэффективными, так как они не учитывают тот факт, что матрица W имеет большое число (а именно $(NM)^2$ — $5NM$) нулевых элементов. В свое время рассматривались прямые методы, в которых использована схема расчленения матрицы W на блоки, однако для решения систем произвольного порядка такие методы не подходят. Обзор этих методов дан в работах Хассита [11] и Фокса [12].

Еще до появления ЭВМ уравнения подобного вида решались методами релаксации [13]. Сущность метода релаксации состоит в выборе предполагаемого решения (обозначим его f^0) и в его коррекции с помощью выражения

$$f_{s,t}^{n+1} = \frac{1}{e_{s,t}} [a_{s,t} f_{s+1,t}^n + b_{s,t} f_{s,t+1}^n + c_{s,t} f_{s-1,t}^n + d_{s,t} f_{s,t-1}^n - e_{s,t} f_{s,t}^n + h_{s,t}] \quad (2.103)$$

для $n = 1, 2, \dots$ сначала в одной точке, затем в другой и т. д. Иногда проводят коррекцию сразу для целого блока точек.

Удобно записать (2.103) в другой форме:

$$f^n = (U + L) f^{n-1} + h, \quad (2.104)$$

где h — вектор-столбец с элементами $[h_{s,t}/e_{s,t}]$, $U + L$ — матрица с элементами $a_{s,t}/e_{s,t}$, $b_{s,t}/e_{s,t}$, $c_{s,t}/e_{s,t}$ и $d_{s,t}/e_{s,t}$. Разобьем $U + L$ на две части так,

чтобы U состояла из элементов a/e и b/e , а L — из c/e и d/e . Обращаясь к уравнению (2.40), заметим, что U является верхней треугольной, а L — нижней треугольной матрицей.

2.11.2. Франкел [14] предположил, что процесс (2.104) нетрудно реализовать на ЭВМ при условии его систематизации. Например, можно рассчитывать (2.104) для $s = 1, t = 1$, затем для $s = 2, t = 1$, затем для $s = 3, t = 1$ и так до $s = N, t = 1$, после чего надо проводить расчет для $s = 1, t = 2$ и т. д. вплоть до $s = N, t = M$. Этим заканчивается расчет одного цикла и затем подобные циклы повторяются снова и снова. В этом процессе по достижении точки (s, t) точки $(s - 1, t)$ и $(s, t - 1)$ оказываются уже обчисленными в данном цикле. Можно использовать полученную таким образом информацию и заменить (2.104) на

$$f^n = Uf^{n-1} + Lf^n + h. \quad (2.105)$$

Найдено, что в ручных расчетах по методу релаксации лучше всего использовать процесс

$$f^n = \omega [Uf^{n-1} + Lf^n + h] + (1 - \omega)f^{n-1}, \quad (2.106)$$

где ω — некоторая константа, причем $\omega > 1$. Франкелу удалось рассмотреть тестовую задачу и рассчитать оптимальную величину для ω . Янг [15] сумел рассчитать оптимальную величину ω для общей формы конечно-разностного уравнения.

2.11.3. Уравнение (2.106) определяет процесс, который мы будем называть верхней релаксацией. Существует много названий для аналогичных или подобных процессов, сходных с методами, использованными Гауссом и Зейделем, Либманом и др.

В литературе 40-х годов описан ряд неудачных попыток решить сложные уравнения на электромеханических машинах. Янг в своей диссертации в 1950 г. впервые предложил строгое и общее решение проблемы. Варга и другие авторы показали после этого, что многие результаты Янга можно получить, применяя старые теоремы Перрона и Фробениуса. Уравнение (2.106) выводилось многими учеными, но заслуга Янга состоит в нахождении оптимальной величины ω для достаточно общих условий.

2.11.4. Проиллюстрируем результаты, полученные Янгом, на простом примере. Рассмотрим задачу, для которой уравнение (2.101) сводится к виду

$$\begin{vmatrix} -\sigma & 1 \\ 1 & -\sigma \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_1 \\ h_2 \end{vmatrix}. \quad (2.107)$$

Можно построить такую задачу следующим образом. Возьмем две узловые точки в направлении r и четыре точки в направлении оси z ; в точке (s, t) со значениями $s = 1$ и $t = 0$ или $t = 3$ используем граничное условие $f_s, t = 0$. Запишем f_1 вместо $f_{0,1}$ и f_2 вместо $f_{0,2}$. Метод (2.104) запишется теперь в виде

$$\begin{vmatrix} f_1^n \\ f_2^n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 1/\sigma \\ 1/\sigma & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1^{n-1} \\ f_2^{n-1} \end{vmatrix} - 1/\sigma \begin{vmatrix} h_1 \\ h_2 \end{vmatrix}. \quad (2.108)$$

Если f — окончательное решение этого уравнения и если

$$f^n = f + f^{*n}, \quad (2.109)$$

$$\begin{vmatrix} f_1^{*n} \\ f_2^{*n} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 1/\sigma \\ 1/\sigma & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1^{*n-1} \\ f_2^{*n-1} \end{vmatrix}. \quad (2.110)$$

Собственные числа и собственные векторы матрицы в уравнении (2.110) суть

$$\begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix} \text{ и } 1/\sigma, -1/\sigma.$$

Можно выразить f^* в виде комбинации этих двух векторов

$$f^{*0} = \frac{f_1^{*0} + f_2^{*0}}{2} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix} + \frac{f_1^{*0} - f_2^{*0}}{2} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix}.$$

Тогда

$$f^{*n} = \frac{f_1^{*0} + f_2^{*0}}{2} (1/\sigma)^n \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \end{vmatrix} + \frac{f_1^{*0} - f_2^{*0}}{2} (-1/\sigma)^n \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix}.$$

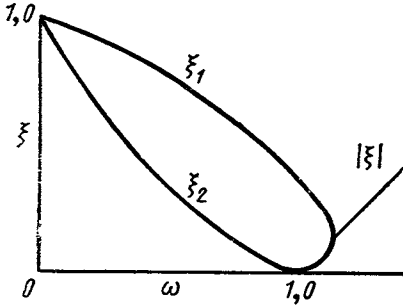


Рис. 2.13. Зависимость ξ от ω для $\sigma = 1,666$.

Если величина $\sigma > 1$, то f^{*n} будет стремиться к нулю, а f^n — к f при $n \rightarrow \infty$. Скорость сходимости в этом случае определяется величиной $\ln \sigma$.

2.11.5. Если подставить (2.109) в (2.106) и перенести члены с f^{*n} в правую часть, то

$$(I - \omega L) f^{*n} = ((1 - \omega)I + \omega U) f^{*n-1}$$

или

$$f^{*n} = (I - \omega L)^{-1} ((1 - \omega)I + \omega U) f^{*n-1}, \quad (2.111)$$

где I — единичная матрица. Применяя этот процесс к задаче (2.107), получаем

$$f^{*n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\omega/\sigma & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 - \omega & \omega/\sigma \\ 0 & 1 - \omega \end{bmatrix} f^{*n-1},$$

$$f^{*n} = \begin{bmatrix} 1 - \omega & \omega/\sigma \\ \omega(1 - \omega)/\sigma & \omega^2/\sigma^2 + 1 - \omega \end{bmatrix} f^{*n-1}. \quad (2.112)$$

Собственные числа матрицы в уравнении (2.112) определяются выражением

$$\xi_1, \xi_2 = 1 - \omega + \frac{\omega}{2\sigma^2} \pm \frac{\omega}{\sigma} \left[1 - \omega + \frac{\omega^2}{4\sigma^2} \right]^{1/2}. \quad (2.113)$$

На рис. 2.13 показано поведение ξ как функции ω . Для $\omega > 1,111$ оба собственных числа ξ комплексны и имеют модуль $\omega - 1$. Когда

$$1 - \omega + \frac{\omega^2}{4\sigma^2} = 0, \quad (2.114)$$

что отвечает значению $\omega \approx 1,111$, собственные числа совпадают при величине $\omega - 1$.

§ 2.12. ТЕОРИЯ МЕТОДА ВЕРХНЕЙ РЕЛАКСАЦИИ

2.12.1. В § 2.9 было показано (свойство С.12), что для корректно поставленной задачи W — невырожденная матрица. Определим f^∞ соотношением

$$f^\infty = W^{-1} h. \quad (2.115)$$

Напишем соотношение для процесса верхней релаксации

$$f^n = \omega [Uf^{n-1} + Lf^n + h] + (1 - \omega)f^{n-1}. \quad (2.116)$$

Можно переписать (2.115) в виде

$$[U + L - I]f^\infty = h$$

или

$$f^\infty = \omega [(U + L)f^\infty + h] + (1 - \omega)f^\infty. \quad (2.117)$$

Определим

$$f^{*n} = f^n - f^\infty. \quad (2.118)$$

Тогда

$$f^{*n} = \omega [Uf^{*n-1} + Lf^{*n}] + (1 - \omega)f^{*n-1}$$

или

$$f^{*n} = [I - \omega L]^{-1} [\omega U + (1 - \omega) I] f^{*n-1}, \quad (2.119)$$

Матрица $[I - \omega L]$ невырождена: L — нижняя треугольная матрица, следовательно, $I - \omega L$ имеет детерминант, равный $+1$. Введем матрицу

$$J = [I - \omega L]^{-1} [\omega U + (1 - \omega) I]. \quad (2.120)$$

Тогда асимптотическая скорость сходимости процесса (2.116) будет равна спектральному радиусу $\rho(J)$ матрицы J .

Пусть ξ — любое собственное число матрицы J . Тогда из свойства С.4 вытекает существование такого вектора g , что

$$Jg = \xi g, \quad (2.121a)$$

т. е.

$$[\omega U + (1 - \omega) I] g = [I - \omega L] \xi g. \quad (2.121b)$$

Возвращаясь к уравнениям (2.109) и (2.104), видим, что уравнение (2.121b) можно записать как

$$\begin{aligned} \frac{a_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s+1,t} + \frac{b_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s,t+1} + \xi \frac{c_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s-1,t} + \xi \frac{d_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s,t-1} + \\ + \frac{1 - \omega - \xi}{\omega} g_{s,t} = 0. \end{aligned} \quad (2.122)$$

Пусть теперь

$$g_{s,t} = (\xi)^{\frac{s+t}{2}} g_{s,t}^*,$$

тогда

$$\begin{aligned} \frac{a_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s+1,t}^* + \frac{b_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s,t+1}^* + \frac{c_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s-1,t}^* + \frac{d_{s,t}}{e_{s,t}} g_{s,t-1}^* + \\ + \frac{1 - \omega - \xi}{\omega \sqrt{\xi}} g_{s,t}^* = 0. \end{aligned} \quad (2.123)$$

Из (2.123) следует, что выражение $(1 - \omega - \xi)/\omega \sqrt{\xi}$ есть собственное число матрицы с элементами a/e , b/e , c/e , d/e . Другими словами, если ξ — ненулевое собственное число матрицы J и если

$$\frac{1 - \omega - \xi}{\omega} = -\eta \sqrt{\xi}, \quad (2.124)$$

то η — собственное число матрицы $L + U$.

2.12.2. Из разд. 2.10.4 мы знаем, что величина η лежит в диапазоне $0 < \eta < 1$. Теперь необходимо проверить соотношение между ξ и η для различных величин ω . Рассматривая уравнение (2.124) как квадратное относительно $\sqrt{\xi}$, получаем

$$\sqrt{\xi} = +\frac{1}{2} \omega \eta \pm \left[1 - \omega + \frac{1}{4} \omega^2 \eta^2 \right]^{1/2}$$

или

$$\xi = 1 - \omega + \frac{1}{2} \omega^2 \eta^2 \pm \omega \eta \left[1 - \omega + \frac{1}{4} \omega^2 \eta^2 \right]^{1/2}. \quad (2.125)$$

Можно показать, что соотношение (2.113) является частным случаем этого результата. Пусть $\omega(\eta)$ — решение уравнения

$$1 - \omega + \frac{1}{2} \omega^2 \eta^2 = 0,$$

т. е.

$$\omega(\eta) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \eta^2}}. \quad (2.126)$$

Тогда, если $2 \geq \omega > \omega(\eta)$, ξ — комплексное число и $|\xi| = \omega - 1$; если $\omega = \omega(\eta)$, ξ — действительное число и $\xi = \omega - 1$; если $1 \leq \omega \leq \omega(\eta)$, ξ — действительное число. На рис. 2.14 показана зависимость ξ от ω . Видно, что (для величин η , близких к единице) ξ сначала уменьшается медленно от величины η^2 при $\omega = 1, 0$ и затем резко спадает к оптимальной величине $2/(1 + \sqrt{1 - \eta^2})$; после этого $|\xi|$ растет под углом 45° к оси ω . Предположим,

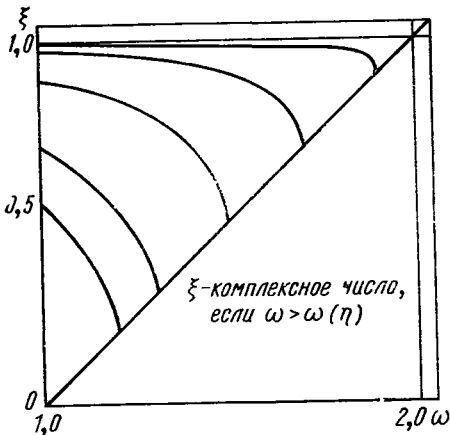


Рис. 2.14. Зависимость ξ от ω .

что матрица $L + U$ имеет различные собственные значения $1 > \eta_1 \geq \eta_2 \geq \eta_3 \dots > 0$. Если выбрать $\omega = \omega(\eta_1)$, то J будет иметь по крайней мере одно действительное собственное число $\omega - 1$ и несколько комплексных собственных чисел с модулем $\omega - 1$. Значит, спектральный радиус $\rho(J)$ равен $\omega - 1$. Если $\omega > \omega(\eta_1)$, то все собственные числа комплексные и $\rho(J) = \omega - 1 > \omega(\eta_1) - 1$. Если $\omega < \omega(\eta_1) - 1$, то (см. рис. 2.14) $\rho(J) > \omega(\eta_1) - 1$. Таким образом, $\rho(J)$ имеет минимум

$$\rho(J) = \omega(\eta_1). \quad (2.127)$$

Из рис. 2.14 видно, что $\xi \leq \eta^2$ и, следовательно, процесс верхней релаксации имеет лучшую асимптотическую

скорость сходимости, чем метод простой релаксации, соответствующий процессу (2.104). Например, если $\eta = 0,99$, то $\xi = 0,752$. Соотношение $0,99^{28,3} = 0,752$ показывает, что в этом случае процесс верхней релаксации в 28 раз быстрее процесса простой релаксации.

2.12.3. Уравнение (2.127) является основным результатом этого раздела. Стоит несколько подробнее проанализировать этот результат и способ его получения. Из вывода следует, что если ξ является ненулевым собственным числом матрицы J , то оно связано с собственным числом η матрицы $L + U$. Кроме того, было получено соотношение между соответствующими собственными векторами. Однако вполне возможно, что матрица $L + U$ имеет полную систему собственных векторов, а J — неполную систему. Выше мы рассмотрели матрицу $L + U$, которая была матрицей размерности 2×2 с собственными числами $+1/\sigma$ и $-1/\sigma$. J была 2×2 -матрицей с собственными числами, определенными соотношением (2.113). Оптимальная величина ω удовлетворяет уравнению

$$1 - \omega + \frac{\omega^2}{4\sigma^2} = 0. \quad (2.128)$$

Следовательно, собственные числа матрицы J совпадают при величине $\omega - 1$. Кроме того,

$$J - (\omega - 1)I = \begin{bmatrix} 2(1 - \omega) & \omega/\sigma \\ \omega(1 - \omega)/\sigma & 2(1 - \omega + \omega^2/\sigma^2) \end{bmatrix},$$

$$J - (\omega - 1)I = \begin{bmatrix} -\kappa^2/2 & \kappa \\ -\kappa^3/4 & \kappa^2/2 \end{bmatrix}, \quad \kappa = \omega/\sigma. \quad (2.129)$$

Эта матрица имеет ранг, равный 1, и, следовательно, J обладает только одним собственным вектором. Можно показать в общем случае, что если ω равна оптимальной величине, то каноническая форма матрицы J является недиагональной. Таким образом, скорость сходимости $\omega - 1$ отвечает истине только асимптотически. Более точная оценка скорости сходимости дается формулой

$$\|J^n\|/[n(\omega - 1)^{n-1}] = \text{const} \quad (2.130)$$

для больших n^* . Интересный результат можно вывести из (2.124), когда

$$\omega = 1, \quad \xi = \eta^2. \quad (2.131)$$

В этом случае процесс (2.105) сходится (асимптотически) вдвое быстрее процесса (2.104).

2.12.4. Для использования метода верхней релаксации необходимо оценить ω . Это нетрудно сделать, если иметь хорошую оценку η_1 — наибольшего собственного числа матрицы $L + U$. На рис. 2.14 видно, что ξ изменяется быстро, когда величина ω намного меньше ее критического значения. Видимо, полезно потратить разумное количество времени для расчета оптимального значения ω . Метод, удобный для использования на практике, соответствует схеме

$$f^n = (U + L)f^{n-1},$$

в которой

$$\|f^n\|/\|f^{n-1}\| \rightarrow \eta_1. \quad (2.132)$$

Другая и более привлекательная схема определяется процессом

$$f^n = Uf^{n-1} + Lf^n,$$

для которого

$$\|f^n\|/\|f^{n-1}\| \rightarrow \eta_1^2. \quad (2.133)$$

Тем не менее существует ряд трудностей, связанных с этой схемой [16], которые состоят в следующем. Предположим, что матрица $L + U$ имеет размерность $n \times n$. Тогда в общем случае существуют n простых корней, а именно $\pm \eta_1, \pm \eta_2, \dots, \pm \eta_{n/2}$ (мы рассматриваем случай четного n). Матрица $(I - L)^{-1}U$, связанная со схемой (2.133), имеет $n/2$ собственных чисел вида $\eta_1^2, \eta_2^2, \dots$. Остальные числа равны нулю. Более того, нулевым собственным числам соответствует только один собственный вектор. В этом случае необходимо сделать $n/2$ итераций, прежде чем соотношение (2.133) будет соответствовать истине. Детальное обсуждение этого вопроса проведено Вакспрессом [32] в § 4.6.

§ 2.13. РАЗЛИЧНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВЕРХНЕЙ РЕЛАКСАЦИИ

2.13.1. В § 2.3 уравнение

$$Wf = h \quad (2.134)$$

рассматривалось в простой форме

$$f_{s+1,t} + f_{s,t+1} + f_{s-1,t} + f_{s,t-1} - (4 + \alpha^2 l^2) f_{s,t} = -l^2 h_{s,t}. \quad (2.135)$$

В применении к этой задаче метод (2.104) имеет скорость сходимости $-\ln \eta$, где η — максимальное собственное число уравнения

$$\frac{1}{4 + \alpha^2 l^2} (f_{s+1,t} + f_{s,t+1} + f_{s-1,t} + f_{s,t-1}) = \eta f_{s,t}. \quad (2.136)$$

* Более строгие результаты обсуждаются в работе [8], гл. 4.

Действительно, легко видеть, что собственный вектор этого уравнения есть

$$f_{s,t} = \sin\left(\frac{\pi l}{X}\right) \sin\left(\frac{\pi l}{Y}\right), \quad (2.137)$$

причем

$$\eta = \frac{2 \cos\left(\frac{\pi l}{X}\right) + 2 \cos\left(\frac{\pi l}{Y}\right)}{4 + \kappa^2 l^2} \approx 1 - \frac{l^2}{4} \left[\kappa^2 + \left(\frac{\pi}{X}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{Y}\right)^2 \right]. \quad (2.138)$$

Мы рассмотрели также процесс (2.105) или

$$f_{s,t}^n = \frac{1}{4 + \kappa^2 l^2} \left[f_{s+1,t}^{n-1} + f_{s,t+1}^{n-1} + f_{s-1,t}^n + f_{s,t-1}^n + l^2 h_{s,t} \right], \quad (2.139)$$

который, как мы заключили из (2.131), сходится вдвое быстрее. Можно проводить вычисления по схеме (2.139), заменив одно из значений f значением из следующей итерации, и рассмотреть процесс

$$f_{s,t}^n = \frac{1}{4 + \kappa^2 l^2} \left[f_{s+1,t}^n + f_{s,t+1}^{n-1} + f_{s-1,t}^n + f_{s,t-1}^n + l^2 h_{s,t} \right]. \quad (2.140)$$

Скорость сходимости этого процесса зависит от η :

$$\eta f_{s,t} = \frac{1}{4 + \kappa^2 l^2} (\eta f_{s+1,t} + f_{s,t+1} + \eta f_{s-1,t} + \eta f_{s,t-1}). \quad (2.141)$$

Положим $f_{s,t} = f_{s,t}^* (\sqrt{\eta})^{t/2}$. Тогда

$$(4 + \kappa^2 l^2) f_{s,t}^* \sqrt{\eta} = \sqrt{\eta} f_{s+1,t}^* + f_{s,t+1}^* + \sqrt{\eta} f_{s-1,t}^* + f_{s,t-1}^*,$$

откуда

$$(4 + \kappa^2 l^2) \sqrt{\eta} = 2 \cos\left(\frac{\pi l}{Y}\right) + 2 \sqrt{\eta} \cos\left(\frac{\pi l}{X}\right)$$

или

$$\sqrt{\eta} = \frac{2 \cos\left(\frac{\pi l}{Y}\right)}{4 + \kappa^2 l^2 - 2 \cos\left(\frac{\pi l}{X}\right)} \approx 1 - \frac{l^2}{2} \left[\frac{\kappa^2}{2} + \left(\frac{\pi}{Y}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{X}\right)^2 \right]. \quad (2.142)$$

Таким образом, если в уравнении (2.138) $\eta = 0,99$, то в процессе (2.140) $\eta = 0,98^2$. Таким образом, процесс (2.140) сходится приблизительно вдвое быстрее процесса (2.139).

2.13.2. Пусть

$$f_t = \begin{vmatrix} f_{1,t} \\ f_{2,t} \\ \vdots \\ f_{N-1,t} \end{vmatrix}, \quad e_t = \begin{vmatrix} e_{1,t} & -a_{1,t} \\ -c_{2,t} & e_{2,t} - a_{2,t} \\ \dots & \dots \\ -c_{N-1,t} & e_{N-1,t} \end{vmatrix}, \quad b_t = \begin{vmatrix} b_{1,t} \\ b_{2,t} \\ \vdots \\ b_{N-1,t} \end{vmatrix}. \quad (2.143)$$

Подобную же структуру имеют d_t и h_t . Таким образом, $e_{s,t}$ используется для обозначения матричного элемента, а e_t — для обозначения блочной матрицы. Уравнение (2.40) можно записать в виде

$$\begin{vmatrix} e_1 & -b_1 \\ -d_1 & e_2 & -b_1 \\ & \cdot \\ & & e_{M-1} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{M-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_{M-1} \end{vmatrix}. \quad (2.144)$$

Теперь нетрудно записать схему процесса итераций

$$f_i^n = \omega e_i^{-1} [b_i f_{i+1}^{n-1} + d_i f_{i-1}^n + h_i] + (1 - \omega) f_i^{n-1}, \quad (2.145)$$

который определяет метод последовательной линейной верхней релаксации. Анализ оптимальной величины ω можно провести с помощью описанной выше схемы. Повторим схему перехода от уравнения (2.115) к уравнению (2.124). Пусть f_i и ξ — суть собственный вектор и собственное число процесса

$$f_i^n = \omega e_i^{-1} [b_i f_{i+1}^{n-1} + d_i f_{i-1}^n] + (1 - \omega) f_i^{n-1}. \quad (2.146)$$

Тогда

$$\xi f_i = \omega e_i^{-1} (b_i f_{i+1} + \xi d_i f_{i-1}) + (1 - \omega) f_i.$$

Положив $f_i = (\xi)^{1/2} f_i^*$, получим

$$\frac{\xi + \omega - 1}{\omega \sqrt{\xi}} f_i^* = e_i^{-1} |b_i f_{i+1}^* + d_i f_{i-1}^*|, \quad (2.147)$$

т. е.

$$\frac{\xi + \omega - 1}{\omega \sqrt{\xi}} = \eta, \quad (2.148)$$

где η — собственное число процесса

$$\eta f_i^* = e_i^{-1} (b_i f_{i+1}^* + d_i f_{i-1}^*). \quad (2.149)$$

Ясно, что метод линейной верхней релаксации связан с линейным одноточечным методом релаксации так же, как точечный процесс верхней релаксации (2.106) связан с одноточечным процессом (2.104). Оптимальная величина ω определяется выражением

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \eta_1^2}}, \quad (2.150)$$

где η_1 — наибольшее собственное число процесса (2.149).

2.13.3. Для тестовой задачи было показано, что если η (точечное) равно 0,99, то η (линейное) равно приблизительно 0,98. Выигрыш при переходе от точечного метода к линейному определяется отношением $(\omega_{\text{лин}} - 1)/(\omega_{\text{точ}} - 1) = 0,66/0,75$. Потребуется 16 точечных и лишь 10 линейных итераций для уменьшения первоначальной погрешности в 100 раз. Анализируя форму уравнений (2.138) и (2.142), можно сделать следующее утверждение. Если член поглощения (κ^2) велик, то оба метода характеризуются быстрой сходимостью. Если член поглощения мал, то линейный метод всегда эффективнее, но он особенно эффективен, когда имеется много узловых точек в y -направлении (l/Y мало).

Уравнение (2.145) решается так. Из соотношения

$$e_i \tilde{f}_i = b_i \tilde{f}_{i+1}^{-1} + d_i \tilde{f}_{i-1}^n + h_i \quad (2.151)$$

следует найти \tilde{f} и положить

$$f_i^n = \tilde{f}_i^{n-1} + \omega (\tilde{f}_i - \tilde{f}_i^{n-1}). \quad (2.152)$$

Уравнение (2.151) требует решения системы $N - 1$ уравнений. Однако матрица e_i является тридиагональной и можно использовать простое рекуррентное соотношение, приведенное в гл. 1 (разд. 1.2.3). Методы (2.157) и (2.152) с соответствующим применением рекуррентных соотношений обычно требуют несколько больше машинного времени, чем точечный процесс верхней релаксации. Тем не менее выигрыш в сходимости обычно намного превышает добавочные затраты в одной итерации. В работе [17] описан один из методов упрощения этих расчетов.

2.13.4. Линейный итерационный метод особенно эффективен, если система имеет много узловых точек в z -направлении и мало точек в r -направлении. Линейный метод можно обобщить и получить полилинейный метод. В соответствии с (2.151) необходимо было решить систему N уравнений для нахождения f_i^n . В двухлинейном методе [18] необходимо решить систему $2N$ уравнений относительно f_i^n и f_{i+1}^n . Конечно-разностные уравнения при этом записываются в трехдиагональной форме (2.144), где каждая блочная матрица e_1 , b_1 , d_1 и т. д. имеет теперь размерность $2N \times 2N$. Путем специального упорядочения точек можно получить матрицы e в пятидиагональной форме.

§ 2.14. МЕТОДЫ ПЕРЕМЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

2.14.1. Методы переменных направлений можно рассматривать как повторяющиеся линейные релаксационные процессы: сначала проводится линейная релаксация в направлении оси y , затем в направлении оси x , снова в направлении оси y и т. д. Обращаясь к матрице W в уравнении (2.39), определим подматрицы

$$W = H + V + K, \quad (2.153)$$

где

$$H = \begin{vmatrix} & & -a_{11} & & & & \\ -c_{21} & & & -a_{21} & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & -a_{m-1, m-1} \end{vmatrix}, \quad K = \begin{vmatrix} k_{11} & & & & & & \\ & \cdot & & & & & \\ & & \cdot & & & & \\ & & & \cdot & & & \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \\ & & & & & & k_{m-1, m-1} \end{vmatrix}$$

и

$$V = W - (H + K). \quad (2.154)$$

Можно показать, что H содержит члены, появляющиеся от оператора $\partial^2/\partial x^2$, V — от оператора $\partial^2/\partial y^2$ и K содержит члены, возникающие из-за наличия поглощения. Метод Писемэна-Рэчфорда определяется уравнениями

$$\left(H + \frac{1}{2} K + \omega_n I\right) f^{n+1/2} = \left(\omega_n I - V - \frac{1}{2} K\right) f^n = h, \quad (2.155a)$$

$$\left(V + \frac{1}{2} K + \omega_n I\right) f^{n+1} = \left(\omega_n I - H - \frac{1}{2} K\right) f^{n+1/2} + h, \quad (2.155b)$$

где параметр ω_n должен быть выбран из условий оптимизации процесса сходимости. Скорость сходимости метода зависит от свойств матрицы P , для которой

$$P_n = \left(V + \frac{1}{2} K + \omega_n I\right)^{-1} \left(\omega_n I - H - \frac{1}{2} K\right) \times \\ \times \left(H + \frac{1}{2} K + \omega_n I\right)^{-1} \left(\omega_n I - V - \frac{1}{2} K\right). \quad (2.156)$$

Теперь необходимо проанализировать свойства матрицы P .

2.14.2. Если ω не зависит от n , то провести такой анализ нетрудно. Предположим, что $\omega \geq 0$ и пусть $\omega_n = \omega$. Тогда матрица $V + \frac{1}{2} K + \omega I$ невырожденна и, следовательно, спектральный радиус матрицы P есть

$$\rho(P) = \rho\left(\left(V + \frac{1}{2} K + \omega I\right) P \left(V + \frac{1}{2} K + \omega I\right)^{-1}\right) = \\ = \rho\left(\left(\omega I - H - \frac{1}{2} K\right) \left(\omega I + H + \frac{1}{2} K\right)^{-1} \left(\omega I - V - \frac{1}{2} K\right) \left(\omega I + V + \frac{1}{2} K\right)^{-1}\right). \quad (2.157)$$

Поскольку соотношение $\rho(P) \leq \|P\|$ справедливо для любой матрицы, используя свойство С.8, получаем

$$\rho(P) \leq \left\| \left(\omega I - H - \frac{1}{2} K \right) \left(\omega I + H + \frac{1}{2} K \right)^{-1} \right\| \times \left\| \left(\omega I - V - \frac{1}{2} K \right) \left(\omega I + V + \frac{1}{2} K \right) \right\|. \quad (2.158)$$

Так как исходная матрица W симметрическая, то симметрическими являются H и P и, следовательно, четыре матрицы в уравнении (2.158) также симметрические. Легко доказать, что если матрица $(H + \frac{1}{2} K)$ имеет собственное число h , то матрица $(\omega I - H - \frac{1}{2} K) (\omega I + H + \frac{1}{2} K)^{-1}$ имеет собственное число $(\omega - h)/(\omega + h)$. Более того, последняя матрица — симметрическая и поэтому ее спектральная норма равна спектральному радиусу. Аналогичное утверждение справедливо, если матрица $(V + \frac{1}{2} K)$ имеет собственное число v . Следовательно,

$$\rho(P) \leq \max |(\omega - h)/(\omega + h)| \max |(\omega - v)/(\omega + v)|. \quad (2.159)$$

Можно показать, что $h \geq 0$ и $v \geq 0$. $H + \frac{1}{2} K$ и $V + \frac{1}{2} K$ обычно положительно определены. В некоторых случаях либо $H + \frac{1}{2} K$, либо $V + \frac{1}{2} K$ могут быть вырожденными, однако не могут быть вырожденными сразу обе матрицы (в этом случае была бы вырожденной матрица W). Отсюда следует, что

$$\rho(P) < 1 \quad (2.160)$$

и, таким образом, процесс (2.155) сходится.

2.14.3. Результат (2.160) — один из нескольких общих выводов относительно процесса Писемэна-Рэчфорда. Так как другие выводы не являются общими, а получить их сложно, мы сформулируем лишь окончательные результаты.

1. Если величина ω фиксированна и положительна, процесс Писемэна-Рэчфорда сходится.

2. Для рассматриваемой задачи процесс (с оптимальной фиксированной величиной ω) сходится с той же скоростью, что и оптимальный точечный метод верхней релаксации.

3. Если матрицы $H + \frac{1}{2} K$ и $V + \frac{1}{2} K$ коммутируют, то

$$\|P_1 \cdot P_2 \cdot \dots\| = \max_n \left| \frac{(\omega_1 - h_n)(\omega_1 - v_n)}{(\omega_1 + h_n)(\omega_1 + v_n)} \cdot \frac{(\omega_2 - h_n)(\omega_2 - v_n)}{(\omega_2 + h_n)(\omega_2 + v_n)} \dots \right|, \quad (2.161)$$

где h_n, v_n — произвольные собственные числа матриц $H + \frac{1}{2} K$ и $V + \frac{1}{2} K$.

4. Если $H + \frac{1}{2} K$ и $V + \frac{1}{2} K$ коммутируют и можно определить числа ρ и σ такие, что $0 \leq \rho \leq h_n, v_n \leq \sigma$ при всех n , то оптимальные величины для $\omega_1, \omega_2 \dots$ можно рассчитать.

5. Для задач с малым количеством узловых точек метод Писемэна-Рэчфорда обычно слабее метода верхней релаксации, но для задач с достаточно большим числом узловых точек этот метод много мощнее любых других известных методов.

Обзор метода Писемэна-Рэчфорда дан в работе Биркхофа и др. [19].

2.14.4. Матрицы $H + \frac{1}{2} K$ и $V + \frac{1}{2} K$ коммутируют, если

$$\left(H + \frac{1}{2} K \right) \left(V + \frac{1}{2} K \right) = \left(V + \frac{1}{2} K \right) \left(H + \frac{1}{2} K \right). \quad (2.162)$$

Если это соотношение справедливо, то можно показать, что любой собственный вектор одной матрицы является собственным вектором и другой. Без этого свойства нельзя написать такое выражение, как (2.161). Можно показать, однако, что (2.162) обычно не выполняется на практике.

Вакспресс и Хабетлер [20] продемонстрировали другую схему процесса (2.155), где единичная матрица I заменена диагональной общего типа. Эта диагональная матрица выбирается так, чтобы улучшить свойства соответствующих матриц.

2.14.5. В общем случае конечно-разностных задач, возникающих при решении многогрупповых уравнений диффузии, матрицы H и V не коммутируют. Не существует строгих методов выбора оптимальных по сходимости параметров и поэтому иногда метод непригоден для решения практических задач*.

§ 2.15. ДРУГИЕ МЕТОДЫ

2.15.1. Простейший из возможных итерационных методов соответствует схеме

$$f^{n+1} = (L + U)f^n + h. \quad (2.163)$$

Альтернативным методом для него может быть

$$(1 - \omega_n)f^{n+1} = (L + U - \omega_n)f^n + h, \quad (2.164)$$

где ω_n — некоторые параметры, выбираемые из условий оптимизации процесса. Фландерс и Шотли [21] рассмотрели метод этого типа и связали оптимальную величину ω_n с корнями некоторого полинома Чебышева. Анализ этого случая подобен анализу, изложенному в разд. 2.16.12. Можно показать, что оптимальная асимптотическая скорость сходимости этого процесса совпадает с асимптотической скоростью сходимости оптимального метода верхней релаксации. Скорости сходимости равны лишь асимптотически. Процесс Чебышева более предпочтителен в неасимптотической области. Чебышевский метод нельзя использовать в форме (2.164), так как быстро накапливаются ошибки округления. Его необходимо переформулировать и использовать рекуррентные свойства полиномов Чебышева. Представленный в этой рекуррентной форме метод требует сохранения f^n и f^{n-1} в процессе расчета f^{n+1} . Однако это можно сделать без особых затрат памяти машины**.

2.15.2. Методы, обсуждавшиеся до сих пор, были основаны на схеме итерации источника (см. § 2.11). Можно тем не менее использовать совершенно другой подход. Для упрощения изложения рассмотрим двухгрупповую задачу. Получим конечно-разностные уравнения обычным способом, но теперь запишем уравнение (2.38) для обеих групп, т. е.

$$a_{s,t}^{(1)} f_{s+1,t}^{(1)} + b_{s,t}^{(1)} f_{s,t+1}^{(1)} + c_{s,t}^{(1)} f_{s-1,t}^{(1)} + d_{s,t}^{(1)} f_{s,t-1}^{(1)} - e_{s,t}^{(1)} f_{s,t}^{(1)} + v^{(21)} f_{s,t}^{(2)} = 0, \quad (2.165a)$$

$$a_{s,t}^{(2)} f_{s+1,t}^{(2)} + \dots \dots + v^{(12)} f_{s,t}^{(1)} = 0, \quad (2.165b)$$

где $f^{(1)}$ — поток нейтронов в группе 1, $v^{(12)}$ — коэффициент, характеризующий процесс перехода нейтронов из группы 1 в группу 2 и т. д. Можно записать

* Используя результаты Пирси [29], можно добавить ряд параметров и добиться сходимости.

** Дальнейшее обсуждение процесса Чебышева и его связь с другими методами можно найти в работе [30].

уравнения (2.165) в виде системы матричных уравнений

$$a_{s,t} f_{s+1,t} + b_{s,t} f_{s,t+1} + c_{s,t} f_{s-1,t} + d_{s,t} f_{s,t-1} - e_{s,t} f_{s,t} + v_{s,t} f_{s,t} = 0, \quad (2.166)$$

где

$$v_{s,t} = \begin{vmatrix} 0 & v_{s,t}^{(12)} \\ v_{s,t}^{(21)} & 0 \end{vmatrix}, \quad a_{s,t} = \begin{vmatrix} a_{s,t}^{(1)} & 0 \\ 0 & a_{s,t}^{(2)} \end{vmatrix}, \quad f_{s,t}^{(1)} = \begin{vmatrix} f_{s,t}^{(1)} & 0 \\ 0 & f_{s,t}^{(2)} \end{vmatrix}. \quad (2.167)$$

Таким образом, a , f , b и т. д. являются диагональными матрицами размерности 2×2 . В общем случае для задач с g группами они имеют размерность $g \times g$. Заметим, что матричная диагональная форма является лишь удобным способом записи уравнения (2.165). Мы должны сохранять не g^2 , а лишь g элементов для каждого параметра. В некоторых задачах матрицы v могут иметь g^2 ненулевых элементов.

Определим теперь итерационную схему

$$a_{s,t} f_{s+1,t}^n + b_{s,t} f_{s,t+1}^n + c_{s,t} f_{s-1,t}^n + d_{s,t} f_{s,t-1}^n - e_{s,t} f_{s,t}^n + v_{s,t} f_{s,t}^n = 0. \quad (2.168a)$$

Опишем эту схему словесно. Пусть f_t означает поток во всех энергетических группах и во всех узловых точках столбца t , так что

$$f_t = (f_{1t}^{(1)}, f_{2t}^{(1)}, \dots, f_{nt}^{(1)}, f_{1t}^{(2)}, f_{2t}^{(2)}, \dots). \quad (2.168б)$$

Допустим, что в некоторой итерации мы уже рассчитывали величины $f_1^n, f_2^n, \dots, f_{t-1}^n$. Предположим также, что $f_1^{n-1}, f_2^{n-1}, \dots, f_{t-1}^{n-1}, f_t^{n-1}$ известны из предыдущей итерации. Рассчитаем теперь f_t^n , решая уравнение

$$b_{s,t} f_{s,t+1}^n + d_{s,t} f_{s,t-1}^n - e_{s,t} f_{s,t}^n + v_{s,t} f_{s,t}^n = - (a_{s,t} f_{s+1,t}^{n-1} + c_{s,t} f_{s-1,t}^{n-1}), \quad (2.168в)$$

где члены в правой части фиксированы. Решение уравнения — сама по себе достаточно сложная задача; это одномерная многогрупповая задача, которую можно решить стандартными методами итерации источника, описанными в гл. 1.

2.15.3. Применение процесса (2.168) описано в [4]. Предположим известной величину коэффициента размножения реактора. Реализуем процесс (2.168) и рассчитаем отношение

$$\sum_g \sum_{s,t} f_{s,t}^n / \sum_g \sum_{s,t} f_{s,t}^{n-1}.$$

Если это отношение больше единицы, то система надкритична и коэффициент размножения необходимо снизить. Обратное утверждение справедливо, если это отношение меньше единицы. Если оценка коэффициента размножения слишком высока (или если сетка в направлении оси z плохо выбрана), то уравнение (2.168в) решить невозможно. На практике этот факт редко приводит к трудностям, и процесс итерации источника при решении (2.168в) обычно быстро сходится. Процесс (2.168) можно улучшить, используя метод верхней релаксации или применяя чебышевскую схему ускорения. Последний процесс легко использовать на практике, и он был применен в программах, описанных в работе [4].

2.15.4. Достоинство этого метода состоит в следующем: 1) он упрощает структуру программы в ЭВМ (см. § 2.16) и может дать экономию времени при обмене информацией с внешней памятью; 2) метод итерации источника может оказаться слишком медленным, если существует рассеяние нейтронов вверх по энергии, в то время как процесс (2.168) замедляется не слишком сильно при наличии такого рассеяния. Но ему присущи также и некоторые недостатки: 1) малогрупповая многоточечная задача решается методом итераций источни-

ка с меньшим числом обращений к магнитным лентам; 2) процесс, описанный в разд. 2.15.3, рассчитывает эффективный коэффициент размножения косвенным путем; этот же коэффициент получается непосредственно из метода итераций источника; 3) расчет оптимальных параметров ускорения сходимости затруднен, так как схема (2.168) имеет однородную форму, в то время как схема (2.163) — неоднородную.

На практике применение рассматриваемого метода можно оправдать в многогрупповых задачах с малым числом узловых точек, например с 1000 узловых точек для каждой группы. В последнем варианте программы, описанной в работе [4], возможны два метода решения двухмерных уравнений диффузии. Если задача имеет менее семи энергетических групп, менее 4000 точек на одну группу и если существует рассеяние в следующую группу, то программа автоматически использует стандартную схему итераций источника с последовательной линейной верхней релаксацией [уравнение (2.149)]. Эти ограничения позволяют программе минимизировать количество обращений к магнитной ленте. Если ограничения отсутствуют, то программа будет использовать процесс, который описывается схемой (2.168).

2.15.5. Другой метод решения (2.166) использовался в программе «Кандид» [28]. Метод основан на тройном итерационном процессе. Пусть f^{n-1} — оценка f после $n-1$ итераций; $f^{n,m}$ — результат m -й итерации матрицы для функции f^{n-1} . Тогда

$$f_{t,s}^{n,0} = f_{s,t}^{n-1}, \quad (2.169a)$$

$$a_{s,t} f_{s+1,t}^{n,m-1} + b_{s,t} f_{s,t+1}^{n,m} + c_{s,t} f_{s-1,t}^{n,m} + \\ + d_{s,t} f_{s,t-1}^{n,m} - e_{s,t} f_{s,t}^{n,m} + h_{s,t}^{n,m} + h_{s,t}^{*n} / \lambda^{n-1} = 0, \quad (2.169б)$$

$$f_{s,t}^n = \lim_{m \rightarrow \infty} f_{s,t}^{n,m}. \quad (2.169в)$$

Решение уравнения (2.169б) требует итерационного решения одномерной многогрупповой задачи для каждого значения t . Эти задачи решаются в порядке $(s=1, m=1), (s=2, m=1), \dots, (s=N, m=1), (s=1, m=2), (s=2, m=2) \dots$. Величина $h^{n,m}$ определяется из условия, что величина h равна не связанной с делением части $\nu f^{n,m}$, а $h^{*n} = \nu f^n - h^n$. Величина λ^{n-1} является последней оценкой коэффициента размножения, т. е.

$$\lambda^{n-1} = [\sum f^{n-1} f^{n-2} / \sum f^{n-2} f^{n-2}]^{1/2}, \quad (2.170)$$

где Σ означает суммирование по всем группам и всем узловым точкам. В уравнении (2.169) член источника деления поддерживается постоянным в течение нескольких прогонок по сетке. В схеме (2.168) в качестве источника деления всегда используется последнее распределение потока. Процесс (2.169) имеет два преимущества по сравнению с процессом (2.168). Во-первых, можно показать, что для любой корректно поставленной задачи внешние (по n) итерации сходятся, внутренние (по m) итерации тоже сходятся, итерации, требующиеся для решения уравнения (2.169б), всегда сходятся; если $h_{s,t}$ содержит только члены, описывающие замедление нейтронов, то (для данных величин n, m и t) уравнение (2.169б) можно решить вообще без итераций. Во-вторых, λ^n стремится к ν , где ν — известный коэффициент, имеющий прямой физический смысл. Можно показать, что f^n соответствует потоку, который получается после n итераций по стандартной схеме метода итераций источника. Схема (2.168) сильно отличается от обычного метода. Схема (2.169) в корне отличается от обычного метода в структуре внутренних итераций, но идентична ему в организации внешних итераций. Приемы, описанные в разд. 2.16.11, могут быть использованы для ускорения сходимости последовательности $f^1, f^2 \dots$. Можно показать, что схема (2.169) уступает обычному методу в задачах, учитывающих лишь процессы замедления, но превосходит его в некоторых многогрупповых задачах с рассеянием вверх по энергии. Проигрыш связан с арифметическими

действиями. При разумной же организации алгоритма и эффективном использовании памяти ЭВМ схема (2.169) может получить преимущество. Так как для этих двух методов характерны радикально различные способы организации внутренних итераций, невозможно установить, какой метод лучше. Для некоторых задач и некоторых машин лучше подходит один метод, для других — другой. Конечно-разностные схемы относительно просто запрограммировать на ЭВМ. Все большие программы снабжаются различными методами решения при идентичных форматах входной и выходной информации.

2.15.6. Новый метод решения уравнения (2.1) был недавно предложен Ти [26]. Напомним, что одномерное уравнение диффузии можно решить методом факторизации разностных уравнений. Хотелось бы использовать этот прием в двухмерной геометрии, но оказывается, что метод является как неустойчивым, так и неэкономичным: две матрицы, на которые распадается матрица W , имеют примерно N^2 ненулевых элементов, в то время как W имеет лишь $5N$ ненулевых элементов. Ти выбрал обратный подход: вместо разложения матрицы W на две матрицы он попытался из этих двух матриц составить комбинацию и получить W . Предположим, что факторизация приводит к следующим соотношениям:

для «направления вперед»

$$\hat{f}_{i,j}^* = a_{i,j} \hat{f}_{i-1,j}^* + b_{i,j} \hat{f}_{i-1,j-1}^* + c_{i,j} \hat{f}_{i,j-1}^* + g_{i,j}^* \quad (2.171a)$$

для «направления назад»

$$\hat{f}_{i,j} = a_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j} + b_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j+1} + c_{i,j}^* \hat{f}_{i,j+1} + \hat{f}_{i,j}^* \quad (2.171б)$$

Величины, использованные в этих уравнениях, нельзя путать с какими-либо другими параметрами, встречающимися в этой главе; a , b , c , a^* , b^* и c^* — шесть коэффициентов, свойства которых мы определим. Комбинируя эти два уравнения, получаем

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i,j} = & a_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j} + b_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j+1} + c_{i,j}^* \hat{f}_{i,j+1} + a_{i,j} \hat{f}_{i-1,j}^* + \\ & + b_{i,j} \hat{f}_{i-1,j-1}^* + c_{i,j} \hat{f}_{i,j-1}^* + g_{i,j}^* \end{aligned} \quad (2.171в)$$

Используем соотношение (2.171б) в форме

$$\hat{f}_{i,j}^* = \hat{f}_{i,j} - (a_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j} + b_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j+1} + c_{i,j}^* \hat{f}_{i,j+1}),$$

чтобы получить выражение

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i,j} = & a_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j} + b_{i,j}^* \hat{f}_{i+1,j+1} + c_{i,j}^* \hat{f}_{i,j+1} + \\ & + a_{i,j} \hat{f}_{i-1,j}^* - a_{i,j} (a_{i-1,j}^* \hat{f}_{i,j} + b_{i-1,j}^* \hat{f}_{i,j} + c_{i,j}^* \hat{f}_{i-1,j+1}) + \\ & + b_{i,j} \hat{f}_{i-1,j-1}^* - \dots \end{aligned} \quad (2.171г)$$

Это выражение имеет форму девятиточечного конечно-разностного уравнения. Ти показал, что можно выбрать коэффициенты a , b , c , a^* , b^* , c^* и g^* так, чтобы уравнение (2.171г) являлось бы достаточно точным конечно-разностным представлением уравнений в форме (2.3). Метод решения подобен решению одномерной задачи: необходимо рассчитать коэффициенты, применить рекуррентное соотношение сначала в направлении вперед и затем — в направлении назад. Итераций в этом случае не требуется.

2.15.7. Метод Ти еще не был применен к задачам расчета реакторов. Существует два возможных источника трудностей. Во-первых, необходимо приспособить уравнение (2.171) к использованию на внутренних границах системы. Это, несомненно, можно будет сделать. Во-вторых, коэффициенты должны быть выбраны такими, чтобы ошибки округления не возрастали очень сильно

при использовании соотношений (2.171а) и (2.171б) или при расчете коэффициентов.

В книге Вакспресса [32] содержится много дополнительной информации относительно рассмотренных методов и их модификаций. Там же описан вариационный метод, который, по-видимому, обладает большими возможностями.

§ 2.6. ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ

2.16.1. В разд. 2.2.5 было уже отмечено, что большим преимуществом конечно-разностного метода является его гибкость. Можно продемонстрировать это, рассматривая, как решается задача на ЭВМ. В то же самое время мы получим представление об объеме и сложности задач, которые можно решить.

2.16.2. Обычным способом описания алгоритма расчета является использование обозначений на языке типа ФОРТРАН, что облегчает выбор различных символов для обозначения различных величин. Пусть $R(I)$, $Z(J)$ — координаты узловой точки (I, J) . В большинстве реакторов величины, описывающие свойства среды (например, коэффициент диффузии D), зависят от пространственных координат, но обычно существует целая группа ячеек сетки, где D имеет постоянную величину. Следовательно, можно разделить реактор на зоны, в которых сечения реакций остаются постоянными. Пусть далее $NZ(I, J)$ — номер зоны, связанный с узловой точкой (I, J) , $D(K, NZ)$ — величина коэффициента диффузии в группе K и зоне NZ , $A(K, NZ)$ — аналогичная величина для сечения A и т. д., $ASQ = \alpha^2$. Первым этапом в программе является расшифровка входящей информации, которая может быть представлена в компактной форме. Можно, например, определить радиальные узловые точки с помощью обозначения

RMESH 0(8.25) 2(6.0) 5(5.0) 10,

которое расшифровывается так:

$$R(2) - R(1) = R(1) = 8,25;$$

$$R(5) - R(4) = R(4) - R(3) = R(3) - R(2) = 6,0;$$

$$R(10) - R(9) = \dots = 5,0.$$

Кроме того, используем обозначение

ZONE 1 1.25 0.025 1.668 0.001 ...

ZONE 2 2.68 0.364 ...,

показывающее, что $D(1,1) = 1,25$; $A(1,1) = 0,025$; $D(2,1) = 1,668$ и т. д. Затем необходимо определить номера зон, что удобно сделать следующим образом:

NZONE 1 0 10 0 8

NZONE 2 0 10 9 20

NZONE 1 0 10 21 22

Это указывает, что $NZ(I, J) = 1$ для $I = 0 \div 10$, $J = 0 \div 8$ и $J = 21 \div 22$; $NZ(I, J) = 2$ для $I = 0 \div 10$ и $J = 9 \div 20$.

2.16.3. В процессе ввода программа переводит информацию из компактной формы в обычную. Например, $R(1) = 8,25$; $R(2) = 16,5$; $R(3) = 22,5$; ...; $R(10) = 84,5$. Для номеров зон $NZ(0,0) = 1$; $NZ(0,1) = 1$, ...; $NZ(0,9) = 2$... На этом этапе программа использует наиболее общую формулировку задания, игнорируя, например, тот факт, что $NZ(0,0) = NZ(0,1) = NZ(0,2) = \dots$. Пусть $CFA(I, J)$ — коэффициент $a_{i,j}$, определенный в уравнении (2.35).

Аналогичные обозначения используются и для других параметров CFB , CFC и т. д. Уравнение (2.35) будет кодироваться в виде

$$CFA(I, J, K) = 3.14159 \times (D(K, NZ(I, J)) \times Z(J+1) - Z(J)) + \\ + D(K, NZ(I, J-1)) \times (Z(J) - Z(J-1)) \times (1.5 \times R(I) - \\ - 0.5 \times R(I+1)) / (R(I+1) - R(I)). \quad (2.172)$$

Расчет коэффициентов конечно-разностной сетки осуществляется только один раз, а в процессе решения они должны периодически использоваться. Таким образом, потеря времени при использовании общей формы (2.172) не является определяющей. Преимущество же, состоящее в гибкости этой формы, очень важно. Типичная программа расчета реактора допускает использование сетки размером до 100×100 , количество различных зон достигает 1000 и количество энергетических групп — $16 \div 20$. Сложность в организации таких программ связана с ограничением оперативной памяти ЭВМ. Расчет же коэффициентов конечно-разностных уравнений даже в наиболее сложных задачах не представляет трудности.

2.16.4. В добавление к величинам $D(I, J)$ и $A(I, J)$ имеется массив сечений деления и массив сечений рассеяния. В стадии, когда формируется CFA , формируются также CFB , ..., CFE , которые являются коэффициентами, связанными с параметрами b , ..., e . Для каждого сечения деления или рассеяния в каждой группе в каждой узловой точке используется формула, аналогичная (2.38). Таким образом, в конце этой стадии мы имеем следующую информацию в машине:

$CFA(I, J, K)$, $CFB(I, J, K)$, $CFC(I, J, K)$, $CFD(I, J, K)$, $CFE(I, J, K)$,
 $CFF(I, J, K)$, $CFS(I, J, K, KPRIME)$.

Последние два массива связаны с процессом деления в группе K и рассеянием из группы K в группу $KPRIME$ соответственно. Массивы с CFA по CFE имеют объем $N \times M \times L$, где L — число групп. Массив CFS может иметь объем $N \times M \times L \times L$, но мы наложим ограничение на матрицу рассеяния и будем предполагать существование рассеяния вверх и вниз только в соседнюю группу. Конечно-разностные коэффициенты можно хранить на магнитной ленте, где они обычно группируются, как показано в табл. 2.1. На практике эта информация часто распределяется между двумя лентами, чтобы сократить время на перемотку ленты. Количество информации, связанной с коэффициен

Таблица 2.1

Расположение информации на магнитных лентах

| | | | | |
|---|--------------------------------|--|--------------------------------------|-----------------|
| Начало ленты $CFF(I, J, 1)$ $CFF(I, J, 2)$ ⋮ | Сечение деления для всех групп | $FLUX(I, J, 1)$ $FLUX(I, J, 2)$ ⋮ | Поток в группе 1 Поток в группе 2 | |
| $CFF(I, J, L)$ $CFA(I, J, 1)$ $CFB(I, J, 1)$ $CFC(I, J, 1)$ $CFD(I, J, 1)$ $CFE(I, J, 1)$ ⋮ | | Коэффициент диффузии и сечение поглощения в группе 1 | | $FLUX(I, J, L)$ |
| $CFS(I, J, 1, 2)$ ⋮ | | | | |
| $CFA(I, J, 2)$ | Аналогично для остальных групп | | | |

тами; определяется числом $N \times M \times (6 + L + L - 1)$, и, следовательно, для типичной задачи с $N=M=50$ и $L=4$ требуется иметь $2500 \times 27 = 60\,500$ коэффициентов. Кроме того, мы должны хранить $N \times M \times L$ величин потоков. Для предыдущего примера это число было бы 10 000. В многогрупповой задаче обычно допускается рассеяние вниз по энергии через несколько групп и это в значительной степени увеличивает число коэффициентов. При наличии рассеяния через 5 групп имеется уже $N \times M \times (6 \times L + 5 \times L)$ коэффициентов и при $N=M=50$ и $L=6$ это число достигает 440 000. Хотя указанное число велико, оно остается все же в пределах памяти магнитных лент и диска. При хранении коэффициентов CFF и CFS можно экономить память — эти коэффициенты, деленные на объемные члены, постоянны внутри каждой зоны.

2.16.5. Расчет коэффициентов конечно-разностных уравнений, т. е. полной информации, находящейся на ленте A (см. табл. 2.1), завершает первую часть алгоритма. Предположим, что необходимо использовать процесс итерации источника, а для внутренних итераций выбран процесс линейной верхней релаксации. Следующим шагом является использование рекуррентного соотношения [см. гл. 1, уравнение (1.6)] для обращения коэффициентов CFB , CFD и CFE в линейную форму. Следуя по этому пути, необходимо рассчитать оптимальный коэффициент релаксации в каждой группе. Это осуществляется с помощью процесса (2.132).

2.16.6. Для начала внешнего процесса итераций необходимо предположить форму потока. Разумным предположением является $FLUX(I, J, K) = 1,0$ для $I = 1 \div M$, $J = 1 \div M$ и $K = 1 \div L$. Если уже имеется решение подобной задачи, то наиболее эффективным выбором начальной формы потока является именно ее решение. Перечислим те этапы, которые мы прошли до сих пор.

1. Чтение входящей информации. Приведение ее в наиболее общую форму.
2. Расчет коэффициентов конечно-разностных уравнений во всех группах.
3. Изменение коэффициентов на каждой линии в процессе подготовки к линейной релаксации.
4. Расчет оптимальной величины ω для верхней релаксации в каждой группе.
5. Предположение о форме решения или чтение информации, оценивающей предполагаемую форму потока.

Теперь можно проводить общий цикл итерации источника, но сначала необходимо описать некоторые детали.

2.16.7. Определим

$$FISSU(I, J) = \sum_K CFF(I, J, K) \times FLUX(I, J, K), \quad (2.173a)$$

$$SUM = \sum_I \sum_J FISSU(I, J), \quad (2.173б)$$

$$FISSN(I, J) = FISSU(I, J)/SUM. \quad (2.173в)$$

Здесь $FISSN$ — источник деления, нормированный так, что сумма источников по объему всего реактора равна единице. Используем знак Σ в его нормальном математическом смысле суммирования, чтобы избежать длинного обозначения символа «DO» на языке ФОРТРАН. Теперь положим $K = 1$ и рассчитаем

$$SOURCE(I, J) = CHI(K) \times FISSN(I, J) \text{ для всех } I, J, \quad (2.174)$$

т. е. источник в группе K . Затем следует вызвать подпрограмму

$$\begin{aligned} &CALL\ INNER(CFA(1, 1, K), CFB(1, 1, K), CFC(1, 1, K), \\ &CFD(1, 1, K), SOURCE(1, 1), FLUX(1, 1, K), \\ &OMEGA(K)), \end{aligned} \quad (2.175)$$

где OMEGA — коэффициент верхней релаксации. Подпрограмма INNER, которую мы рассмотрим позже, выполняет расчеты, определенные уравнением (2.145). INNER находит решение с помощью процесса линейной верхней релаксации: она использует текущие значения величин FLUX (I, J, K) в качестве первой оценки решения и помещает результаты снова в FLUX (I, J, K). Определяются новые величины в массиве FLUX (I, J, K), необходимо проверить, является ли K номером последней группы. Если это так, то цикл заканчивается, т. е.

$$\begin{aligned} \text{SOURCE}(I, J) = & \text{CHI}(K + 1) \times \text{FISSN}(I, J) + \\ & + \text{CFS}(I, J, K, K - 1) \times \text{FLUX}(I, J, K), \end{aligned} \quad (2.176)$$

происходит замещение K на $K + 1$ и снова вызывается подпрограмма (2.175). Пройдя таким образом все группы, мы используем процедуру (2.173) по отношению к новому потоку, и этим полностью завершается первый внешний цикл.

2.16.8. Перед обсуждением дальнейших деталей расчета необходимо рассмотреть некоторые вопросы теории итерационного процесса. В разд. 2.8.3 мы проанализировали двухгрупповую задачу, в которой групповые конечно-разностные уравнения имели вид

$$\begin{vmatrix} W_1 & \nu C_1 \\ C_2 & W_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.87')$$

Процесс, описанный в разд. 2.16.7, с использованием обозначений (2.87') выражается в виде

$$f_u = \nu C_1 f_2, \quad (2.173a')$$

$$f_N = f_u / |f_u|, \quad (2.173b')$$

$$f_1 = -W_1^{-1} f_N, \quad (2.175')$$

$$f_2 = -W_2^{-1} C_2 f_1, \quad (2.175'')$$

где f_u и f_N означают FISSU и FISSN соответственно. Уравнение (2.173) используется тогда с новой величиной f_2 . Итерация источника может быть записана следующим образом:

$$f_u = S f_u / |f_u|, \quad (2.177)$$

где

$$S = \nu C_1 W_1^{-1} C_2 W_2^{-1}. \quad (2.178)$$

Наибольшее собственное число матрицы S дает критическую величину ν^{-1} . S является матрицей, которая представляет результат одной итерации источника. Обобщение этого заключения на общую многогрупповую задачу очевидно. Биркгоф и Варга [22] детально изучили такую задачу. Отдельные элементы матрицы S неотрицательны, что является следствием неотрицательности C и свойств матрицы W . Это отвечает физическому смыслу: любой источник должен всюду генерировать положительный поток нейтронов. Предположим, что вектор f расщеплен на две составляющие. Обозначим через f_c ту часть, которая связана с узловыми точками в активной зоне реактора, а через f_r — часть, относящуюся к точкам отражателя. Активная зона — такая часть системы, для которой диагональные элементы C_1 не равны нулю. Разделяя указанным способом реактор, можно показать, что S имеет форму

$$\begin{vmatrix} S_{cc} & S_{cr} \\ 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (2.179)$$

Это соответствует тому факту, что любой источник быстрых нейтронов (в активной зоне или в отражателе) будет создавать в любой точке реактора тепло-

вые нейтроны и производить нейтроны деления в активной зоне. Матрицы, имеющие форму (2.179), обладают определенными интересными свойствами.

Но нам удобнее рассмотреть несколько более легкую задачу. В численных методах, которые мы будем использовать, составляющая f_r источника деления всегда равна нулю. Поэтому следует рассмотреть упрощенную задачу

$$\dot{f}_c = S_{cc} f_c / |f_c|. \quad (2.177')$$

Значит, нас будут интересовать лишь свойства матрицы S_{cc} . Эта матрица является неприводимой. Более того, для корректно поставленной задачи она также и примитивная матрица*. Непримитивной неприводимой матрицей считается такая матрица, которую путем перенумераций узловых точек можно привести к форме

$$\begin{array}{ccc} 0 & X_{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & X_{2,3} \\ & & \dots \\ X_{n,1} & & 0 \end{array},$$

где $X_{i,j}$ — подматрица.

Уместно сформулировать теорему.

С.14. Если матрица X неприводима и все ее элементы неотрицательны, то наибольшее собственное число этой матрицы — простое (т. е. соответствующая часть канонической жордановой формы диагональна). Более того, собственный вектор, соответствующий этому числу, имеет только положительные элементы. Например, матрица

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

имеет два собственных числа, т. е. два числа с модулями, равными $\rho(X)$, и одно из этих собственных чисел, а именно $+1$, имеет положительный собственный вектор.

С.15. Если матрица X неприводима и примитивна, то только одно собственное число является наибольшим по модулю.

2.16.9. Было бы разумным рассмотреть детально свойства матрицы S , так как можно придумать задачи, в которых будут появляться приводимые или непримитивные матрицы S . Рассмотрим следующую задачу. Пусть есть четыре энергетические группы. Активная зона разделена на две области, называть которые будем левой и правой частями. Нейтроны деления рождаются в группе 1. Те нейтроны, которые находятся в левой части, могут замедляться только в группу 2; те, что находятся справа, могут замедляться только в группу 3. Нейтроны в группе 2 могут попадать в правую часть в группу 4, а нейтроны группы 3 замедляются в группу 4, попадая в левую часть реактора. Существует черный барьер, который запрещает обмен нейтронами между правой и левой частями в группах 1 и 4. Результирующая матрица S не является примитивной, и обычные методы, используемые в программах расчета реакторов, могут оказаться непригодными. Но данный пример построен искусственным образом, подобные ситуации не возникают в обычных задачах. Однако иногда случается, что многогрупповые программы используются для решения нестандартных задач — задач, в которых нет строгого многогруппового процесса деления и замедления, но которые можно свести к многогрупповой форме. В таких задачах существует опасность появления приводимых и непримитивных матриц, распознать которые программа не может. Но в большинстве

* Это действительно так. Пусть $S_{cc} \geq 0$ есть $n \times n$ -матрица. В этом случае $S_{cc}^m > 0$ для некоторого положительного целого m тогда и только тогда, когда S_{cc} примитивна.

случаев имеется простой тест, гарантирующий соответствующие свойства матрицы S .

С.16. Если каждый элемент матрицы X положителен, то матрица X неприводима и примитивна. Свойство С.16 является, конечно, достаточным условием, но не необходимым.

Существует еще одно свойство, которое может оказаться полезным.

С.17. Если X — неприводимая матрица и все ее элементы неотрицательны, а x — вектор, все элементы которого положительны, то

$$\min_i \left| \frac{\sum_j X_{i,j} x_j}{x_i} \right| \leq \rho(X) \leq \max_i \left| \frac{\sum_j X_{i,j} x_j}{x_i} \right|.$$

Эти свойства матриц доказаны в работе [8].

2.16.10. Рассмотрим теперь схему итераций, изложенную в разд. 2.16.7. Необходимо уметь различать итерации. Будем использовать индекс n для обозначения величин в n -й итерации. Таким образом, $FLUX_0$ означает первоначальное предполагаемое распределение потока, $FISSN_1$ — источник деления, полученный на основе этого распределения, и т. д., $FISSU_{n+1}$ является результатом одной итерации источника, примененной к $FISSN_n$. Возвращаясь к уравнению (2.177), можно установить, что процесс перехода от $FISSN_n$ к $FISSU_{n+1}$ эквивалентен оперированию с матрицей S_{cc} . Из свойства С.17 вытекает, что

$$\begin{aligned} \min_{I, J} |FISSU_{n+1}(I, J)/FISSN_n(I, J)| &\leq \rho(S) \leq \\ &\leq \max_{I, J} |FISSU_{n+1}(I, J)/FISSN_n(I, J)|. \end{aligned} \quad (2.180)$$

Заметим, что не было необходимости обращаться к S по явной схеме, матрица S всегда используется неявно. Соотношение (2.180) служит для определения момента окончания внешних итераций. Оно информирует о близости к точному решению конечно-разностной задачи, но не может ничего сказать об абсолютной точности, т. е. об эффектах округления и т. д.

2.16.11. Процесс, определенный в разд. 2.16.7, в конце концов дает возможность получить критический поток. Возможно также улучшить сходимость метода. Пусть $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \dots$ и s_1, s_2, \dots означают собственные числа и векторы матрицы S_{cc} соответственно. Необходимо предположить, что собственные числа — вещественные и простые. Справедливость этого допущения нельзя доказать в общем случае, исключая некоторые простые задачи. Если собственные числа простые, то можно выразить вектор $FISSN_1$ в форме

$$FISSN_1 = s_1 + s_2 + s_3 + \dots \quad (2.181a)$$

Из уравнения (2.177)

$$FISSU_{n+1} = S FISSU_n,$$

а из уравнения (2.173)

$$FISSN_{n+1} = FISSU_{n+1}/SUM_{n+1}.$$

Следовательно,

$$SUM_{n+1} \times FISSN_{n+1} = S FISSN_n. \quad (2.181b)$$

Применяя последовательно эту формулу, получаем

$$PROD_{n+1} \times FISSN_{n+1} = S^n FISSN_1 = \rho_1^n s_1 + \rho_2^n s_2 + \dots, \quad (2.181b)$$

где

$$PROD_{n+1} = SUM_{n+1} \times SUM_n \times \dots \times SUM_2.$$

Если (2.181b) просуммировать по всем узловым точкам, то

$$PROD_{n+1} = \rho_1^n \sum s_1 + \rho_2^n \sum s_2 + \dots, \quad (2.182a)$$

где Σ означает суммирование по всем точкам. Для больших n первый член ряда будет много больше остальных и поэтому

$$\text{SUM}_{n+1} = \text{PROD}_{n+1} / \text{PROD}_n \approx \rho_1. \quad (2.182б)$$

Используя оценку ρ_1 и принимая во внимание первые два члена ряда (2.181в), получаем оценку ρ_2 :

$$\begin{aligned} (\rho_2 - \rho_1) \rho_2^n s_2 &\approx \text{PROD}_{n+1} \times \text{FISSN}_{n+1} - \rho_1 \text{PROD}_n \times \text{FISSN}_n \approx \\ &\approx \text{PROD}_{n+1} \times (\text{FISSN}_{n+1} - \text{FISSN}_n). \end{aligned} \quad (2.183)$$

Уравнение (2.182а) выведено суммированием по всем узловым точкам. Можно получить более точную формулу, умножая каждое уравнение в форме (2.181в) на некоторую подходящую весовую функцию и складывая результаты. Наилучший вес — сопряженная к FISSN_{n+1} функция. Одногрупповые задачи можно считать самосопряженными. Многогрупповые задачи не являются самосопряженными и расчет сопряженных функций столь же трудоемок, что и расчет самих FISSN . В этом случае наиболее разумно положить весовую функцию равной единице. При выводе формулы усреднения из (2.183) необходимо учесть, что вектор s_2 не является положительным во всех точках. Поэтому при суммировании по абсолютным величинам s_2 большие погрешности округления будут частично компенсироваться. Суммирование уравнений (2.183) по всем точкам и деление полученной суммы на аналогичный результат для ρ_2^{n-1} дает

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} \approx \frac{\sum_{I,J} |\text{FISSN}_{n+1} - \text{FISSN}_n|}{\sum_{I,J} |\text{FISSN}_n - \text{FISSN}_{n-1}|}. \quad (2.184)$$

Эта оценка ρ_2 может быть использована для улучшения сходимости. В уравнении (2.184) $|x|$ означает абсолютную величину x .

2.16.12. Процесс, описанный в разд. 2.16.7, можно улучшить, переопределив FISSN . Пусть уравнения (2.173б) и (2.173в) приведены к виду:

$$\text{FISSUD}_{n+1}(I, J) = \text{FISSU}_{n+1}(I, J) - \tau_n \text{FISSN}_n(I, J), \quad (2.185а)$$

$$\text{SUM}_{n+1} = \sum_I \sum_J \text{FISSUD}_{n+1}(I, J), \quad (2.185б)$$

$$\text{FISSN}_{n+1} = \text{FISSUD}_{n+1}(I, J) / \text{SUM}_{n-1}, \quad (2.185в)$$

где τ_n — параметр, подлежащий определению. Модифицированный процесс трансформирует уравнение (2.181в) и сведет его к форме

$$\begin{aligned} \text{PROD}_{n+1} \text{FISSN}_{n+1} &= (\rho_1 - \tau_n) (\rho_1 - \tau_{n-1}) \dots s_1 + \\ &+ (\rho_2 - \tau_n) (\rho_2 - \tau_{n-1}) \dots s_2 + \dots, \end{aligned}$$

т. е.

$$\text{PROD}_{n+1} \text{FISSN}_{n+1} = p_n(\rho_1) s_1 + p_n(\rho_2) s_2 + \dots, \quad (2.186)$$

где

$$p_n(\rho) = (\rho - \tau_n) (\rho - \tau_{n-1}) \dots (\rho - \tau_1). \quad (2.187)$$

Ясно, что наилучшим выбором p_n является такой, при котором $p_n(\rho_2)$, $p_n(\rho_3)$ и т. д. малы по сравнению с $p_n(\rho_1)$. Полиномы Чебышева имеют свойства, сходные с необходимыми для нас свойствами. Пусть $C_n(\rho)$ — полиномы Чебышева степени n . Известно, что $C_n(\rho) \leq 1$ для $-1 \leq \rho \leq 1$ и $C_n(\rho)$ быстро возрастает при $\rho > 1$. Фактически, если $D_n(\rho)$ — любой другой вещественный полином степени n такой, что $|D_n(\rho)| \leq 1$ для $|\rho| \leq 1$, то $D_n(\rho)$ меньше $C_n(\rho)$ для $\rho > 1$. Полином $C_n(2\rho/\rho_2 - 1)$ имеет аналогичные свойства в области $0 \leq \rho \leq \rho_2$. Следовательно, в качестве τ удобнее всего брать

$$\tau_i = i\text{-й корень } C_n(2\rho/\rho_2 - 1). \quad (2.188)$$

На практике можно использовать эту схему ускорения, проделывая несколько простых внешних итераций, затем оценивая ρ_2 из (2.184) и рассчитывая τ_i из уравнения (2.188). При расчете τ_i величина n должна быть фиксирована. Часто полагают, например, $n = 5$ и затем выполняют пять итераций. После этих итераций можно сделать новую оценку ρ_2 .

В описанном процессе ускорения возникают трудности, если члены FISSU_{n+1} и $\tau_n \text{FISSN}_n$ в уравнении (2.185а) приблизительно равны. В таком случае происходит потеря точности, что может помешать расчету. Это не является следствием ограниченности числа ячеек разрядной сетки ЭВМ, а объясняется тем, что FISSN рассчитывается с помощью итерационного процесса (внутренних итераций), который имеет ограниченную точность. Точность внутренних итераций обсуждалась выше. Ситуацию можно облегчить, если использовать полиномы Чебышева низкой степени. Однако это ухудшает эффективность процесса ускорения. Одним из способов уменьшения указанных трудностей является выбор τ с понижающимся порядком величины. Лучшее решение этой проблемы — использовать рекуррентное соотношение между полиномами Чебышева

$$C_{n+1}(\rho) = 2C_n(\rho)\rho - C_{n-1}(\rho) \quad (2.189)$$

и переформулировать уравнение (2.185а) так, чтобы выразить FISSUD_{n+1} через FISSU_{n+1} , FISSN_n и FISSN_{n-1} . Это потребует хранения лишнего массива FISSN_{n-1} , но такой массив включает лишь источник деления и не слишком велик по размерам.

2.16.13. В описании внешних итераций было введено два массива FISSU и FISSN . Существуют две причины для обоснования процесса нормирования. Во-первых, все числа в течение расчета будут оставаться внутри разумных пределов, хотя это и неособенно важно, так как допустимая область варьирования чисел с плавающей запятой в ЭВМ велика. Вторая и вместе с тем достаточно важная причина состоит в том, что нормирование источника деления улучшает эффективность внутренних итераций. Член источника в уравнении (2.175) остается почти одним и тем же для всех внешних итераций и, следовательно, результат внутренних итераций приблизительно тот же для всех итераций. Таким образом, поток нейтронов, получаемый из предыдущей внешней итерации, образует хорошую начальную форму для текущей внутренней итерации.

Обобщим теперь все, что было сказано до сих пор. В разделе 2.16.7 был описан процесс внешних итераций. Применяемый на практике процесс отличается от простой схемы в двух аспектах. Во-первых, процесс изменен так, что FLUX_n является хорошим начальным приближением для FLUX_{n+1} . Таким образом, схема преобразована в более удобную форму. Во-вторых, простая итерация была заменена более сложным чебышевским процессом для улучшения скорости сходимости. Некоторые задачи, обычно связанные с системами, где имеет место большая утечка нейтронов, можно легко решить без использования чебышевского процесса. Однако для больших тепловых реакторов с толстым отражателем отношение ρ_2/ρ_1 может достигать 0,98 и прямые внешние итерации будут очень медленно сходиться.

2.16.14. Мы описали в некоторых деталях внешнюю итерацию. Рассмотрим теперь внутреннюю итерацию. Алгоритм, содержащийся в подпрограмме INNER , упоминался в связи с выражением (2.175). Начальным приближением для внутренних итераций является результат предыдущей внешней итерации. Цикл внешней итерации начинается с FISSN_{n-1} и FLUX_{n-1} для каждой группы. Для каждой энергетической группы можно организовать внутренние итерации с заданной точностью. Однако нет необходимости иметь высокую точность, так как массив FISSN_{n-1} известен недостаточно точно. Независимо от того, насколько точно рассчитан FLUX_n , FISSN_n будет оставаться неточным. Именно, FISSN_n не будет равен FISSN , так как FLUX_n зависит от FISSN_{n-1} . На практике внутренние итерации проводят до получения разумной точности.

Пусть $FLUX_n^m(I, J, K)$ обозначает величину оцениваемого потока в точке (I, J) в группе K после m -й внутренней итерации n -го внешнего цикла. Мы использовали $FLUX_n(I, J, K)$ для обозначения величины $FLUX_n^m(I, J, K)$ после того, как все внутренние итерации закончены. Тот факт, что $FLUX_{n-1}$ является первой оценкой $FLUX_n$, можно выразить в форме

$$FLUX_n^0(I, J, K) = FLUX_{n-1}(I, J, K). \quad (2.190)$$

Итерации в группе K продолжаются пока не окажется, что

$$G_n^m(K) < \varepsilon G_n^1(K), \quad (2.191)$$

где

$$G_n^m(K) = \sum_{I,J} |FLUX_n^m(I, J, K) - FLUX_n^{m-1}(I, J, K)| \quad (2.192)$$

и ε — некоторое малое число, например $\varepsilon = 0,01$. Типичное поведение G_n

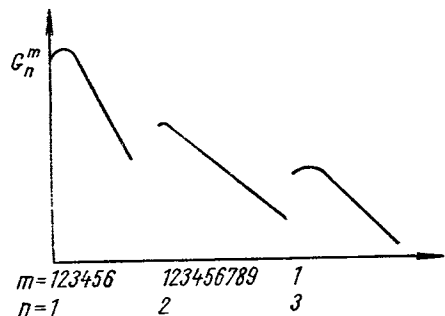


Рис. 2.15. Типичное поведение функции G_n^m .

в процессе расчета показано на рис. 2.15. Во время внешнего цикла G_n уменьшается в 100 раз, но G_{n+1} еще остается заметно больше G_n . Однако величина G_n^m в общем падает так, что внешние итерации решаются все с большей и большей точностью. Очевидно, что оптимальная величина ε должна изменяться от группы к группе и от задачи к задаче, хотя выбор оптимальной величины ε не совсем ясен.

§ 2.17. О РЕШЕНИИ ДВУХМЕРНЫХ ЗАДАЧ НА ЭВМ

2.17.1. Двухмерные уравнения диффузии можно решать на всех ЭВМ от малых до больших. Но обычно используют ЭВМ типа IBM7090. Эта машина имеет следующие характеристики: оперативная память может хранить 32 768 чисел; в машине имеется от шести до двенадцати блоков с магнитными лентами, каждая магнитная лента хранит до 10^6 чисел; время сложения двух чисел в системе с плавающей запятой составляет 18 *мксек*. Машины последующей серии, такие, как CDC6600, UNIVAC1108 или IBM360/75, обладают большей мощностью, но имеют приблизительно те же основные характеристики. Единственной отличительной их чертой можно считать появление дисковой памяти, способной хранить несколько миллионов слов. Рассмотрим теперь некоторые практические аспекты использования таких машин.

2.17.2. Рассмотрим сначала все вопросы, касающиеся скорости расчетов. Точечная релаксация, а именно процесс (2.106), примененный к одной точке, сводится приблизительно к шести операциям умножения и пяти операциям сложения и, следовательно, занимает 330 *мксек* на ЭВМ IBM7090. Это лишь приближенная цифра, так как необходимо проделывать некоторые индексные операции. Рассмотрим задачу с 4500 узловыми точками в каждой из четырех групп. Это потребует 6 *сек* на каждую внутреннюю итерацию. Может оказаться необходимым сделать 20 внутренних итераций на группу, так что общее время на одну внешнюю итерацию составит 2 *мин*. Разумное число внешних итераций оценивается числом 15, поэтому общее время равно 30 *мин*. Мы игнорировали некоторое дополнительное время, возможно около 10%, которое расходуется на считывание информации с магнитной ленты, формирование источников деления и т. д. В настоящее время CDC6600 работает примерно в 10 раз быстрее, чем IBM7090, так что можно проводить некоторые расчеты за 3 *мин*. Но если мы хотим на CDC6600 решить задачу с 9000 узловых точек и 16 группами, нам потребуется около 30 *мин*. Современные ЭВМ могут решать неко-

торые весьма сложные двухмерные многогрупповые задачи за несколько минут. Однако имеется много задач, жизненно необходимых для расчетов конструкций реакторов, которые сильно загружают сегодняшние машины и будут загружать ЭВМ обозримого будущего.

2.17.3. Рассмотрим вопрос об объеме оперативной памяти машины. На различных стадиях расчета может потребоваться большая память. Не будем касаться вводимой информации и вопросов расчета конечно-разностных коэффициентов, так как они получаются раз и навсегда. Главной ступенью итерационного процесса являются расчет массива FISSU в формуле (2.173a) и расчеты внутри подпрограммы INNER. В период работы INNER необходимо разместить в оперативной памяти массивы CFA , ..., CFE , SOURCE и одну группу FLUX. Требуется хранить только одну группу массива FLUX, так как новые величины массива FLUX записываются на месте старых. Если используется $N \times M$ узловых точек, то необходимо иметь $7NM$ чисел в памяти. Сама программа потребует для размещения несколько сотен ячеек. К сожалению, программы управления и ввода—вывода информации занимают большой объем памяти, поэтому в распоряжении остается 28 000 или еще меньше ячеек. Таким образом, при выполнении внутренних итераций требуется выполнение неравенства $7NM \leq 28\,000$. Можно улучшить это соотношение и заменить его требованием $6NM \leq 28\,000$, если использовать соотношения симметрии (2.35). Возможна также экономия памяти за счет сохранения лишь одной системы коэффициентов для каждой области, а не отдельной системы для каждой точки.

Задачи с более чем 5000 или 6000 точек решаются с большим трудом. Для таких задач невозможно хранить всю информацию, нужную для подпрограммы INNER, в оперативной памяти. В этом случае очень трудно написать эффективную программу. Одна операция процесса точечной релаксации требует шести чисел: необходимо затратить приблизительно 2500 мксек для считки этих чисел с магнитной ленты и только 1330 мксек для выполнения необходимых арифметических операций. Достигнутые сейчас скорости обмена информацией сильно сократили время считывания, но возрастание скорости арифметических операций снова восстанавливает указанное соотношение и связанные с ним трудности. Существуют различные методы уменьшения потерь на обмен информацией между оперативной и внешней памятью, однако их применение сильно усложняет программы. Если увеличить оперативную память в 3 или 4 раза, то можно действительно решить проблему (однако решение трехмерных задач будет еще по-прежнему сопряжено с различными ограничениями). Сетка размером 100×100 может оказаться недостаточной для представления некоторых физических систем. Однако необходимость увеличения числа точек указывает скорее на необходимость обсуждения вопроса о законности применения диффузионного приближения. Объем памяти IBM360, например, не подходит для решения задач двух- и трехмерной диффузии, если только не использовать четыре или больше модулей памяти одновременно.

2.17.4. Для расчета источника деления необходимо иметь массивы $CFF(I, J, K)$ и FLUX (I, J, K) . Отведем один блок памяти объемом $N \times M$ для массива CFF , другой блок — для массива FLUX и еще один блок отведем для FISSU. Массивы CFF и FLUX считываются с магнитной ленты по одной энергетической группе. Уравнение (2.176) решить сравнительно просто, но иногда желательно иметь более общее соотношение

$$\begin{aligned} \text{SOURCE}(I, J) &= CH(K+1) \times \text{FISSN}(I, J) + \\ &+ \sum_{KD} CFS(I, J, K, KD) \times \text{FLUX}(I, J, KD). \end{aligned} \quad (2.193)$$

Если поток записан на магнитную ленту, то расчет по формуле (2.193) становится неэффективным. Лента должна быть перемотана несколько раз в течение каждой внешней итерации. Для ЭВМ с дисковой памятью общая форма (2.193)

не увеличивает сложность написания эффективной программы. Как было упомянуто в разд. 2.16.5, число коэффициентов конечно-разностной схемы может быть очень велико, но задачи, решаемые в разумно короткий срок, не будут насыщены обращениями к лентам или дискам.

§ 2.18. СРАВНЕНИЕ РАЗНЫХ МЕТОДОВ

2.18.1. В различных задачах рассмотренные методы могут иметь те или иные преимущества. Существуют три типа программ расчета реакторов: 1) программы, созданные для решения конкретных частных задач; 2) программы для решения большого числа вариантов сходных задач; 3) программы для решения по возможности наиболее широкого класса задач. Программы, относящиеся к последней категории, должны быть достаточно мощными, чтобы практически устранить необходимость в создании специальных программ. Даже если такие универсальные программы решают задачу неоптимальным образом, то это делается с меньшими усилиями, чем если бы пришлось создавать специальную отдельную программу. Программы второй категории могут часто иметь преимущество. Например, если задачи схожи по структуре и, следовательно, можно иметь в распоряжении хорошие начальные распределения, то использование таких программ дает большой эффект. Для задач подобного типа возможно создание специальных и более эффективных методов, которые не могут по разным причинам работать при решении задач широкого класса.

2.18.2. Наиболее важные черты программ для решения задач широкого класса — надежность и гибкость. Как было указано выше, в рамках конечно-разностных схем допускается почти неограниченный выбор композиции реактора и размеров сетки. В прошлом программы заметно отличались выбором числа энергетических групп и общности матрицы рассеяния. Эти различия создавали трудности при пользовании внешними блоками ЭВМ. Как отмечалось в разд. 2.16.4, при записи потока на магнитных лентах трудно обработать большие по размерам матрицы рассеяния. С введением дисковой и увеличением оперативной памяти стало возможным рассчитать систему с полной матрицей рассеяния. Существуют две трудности в этой проблеме. Одна из них связана с большим объемом памяти, необходимым для решения общей задачи, вторая обусловлена самим методом итераций источника. Один из способов преодоления первой трудности состоит в том, что пользователь определяет форму матрицы рассеяния. Например, четырехгрупповая задача с рассеянием только вниз по энергии может быть задана с помощью массива

$$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0, \end{matrix}$$

который указывает, что $CFS(I, J, L, KDASH) = 0$, за исключением случаев, когда $(K, KDASH) = (1, 2)$ или $(2, 3)$ или $(3, 4)$. Программа обычно располагает простым способом хранения только ненулевых элементов массива CFS .

2.18.3. Вторая трудность появляется вследствие того, что простой метод итерации или неприменим или неэффективен. В тепловом реакторе нейтроны в тепловой части спектра часто рассматриваются как моноэнергетические, хотя иногда необходимо включить в рассмотрение несколько тепловых групп. В этом случае метод итераций источника обычно модифицируется, так что приходится делать несколько итераций для этих тепловых групп, прежде чем пересчитывать источник делений.

2.18.4. Программы общего типа часто используются для решения нестандартных задач. Например, они могут применяться не только для расчета потока нейтронов по реактору в целом, но и для расчета потока в топливных кассетах или потока от точечного источника в подкритической системе, или потока внутри некоторых деталей экспериментального оборудования в реакторе. Программы

можно использовать в расчетах быстрых, тепловых реакторов, реакторов с различными замедлителями и т. д. В таких случаях нельзя основываться только на разумности результатов с точки зрения физики процессов. Теория методов расчета должна основываться на твердом математическом фундаменте. Большим преимуществом конечно-разностных итерационных методов является не только прочность математических основ, но и легкость реализации.

2.18.5. Класс точечных, линейных и многолинейных методов верхней релаксации имеет подобную математическую основу. Программирование линейного метода лишь немногим сложнее программирования точечного метода. Игнорируя некоторые особенности ЭВМ (например, на некоторых ЭВМ деление производится слишком медленно), можно сказать, что нет причин применять точечный метод. Методы переменных направлений потенциально мощнее методов верхней релаксации, особенно в задачах с большим числом узловых точек. Тем не менее их теория еще недостаточно развита и, хотя эти методы были успешно использованы в решении многих практических задач, они не могут являться основой универсальных программ. В большой программе процесс только внутренних итераций занимает небольшую ее часть. Можно комбинировать несколько различных методов в одной программе. Дополнительные затраты труда при этом невелики. Программа [4], например, основана на линейном процессе верхней релаксации. Однако если число групп становится большим, для решения применяется метод описанный в разд. 2.15.2.

§ 2.19. ТРЕХМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ

2.19.1. Двухмерные задачи в некоторых отношениях существенно отличаются от одномерных задач диффузии. Между двух- и трехмерными задачами имеются лишь небольшие различия, ввиду чего методы решения одних задач можно развить для решения других. Рассмотрим, например, задачу в (x, y, z) -геометрии. В этом случае можно использовать метод итераций источника и, следовательно, можно ограничиться однорупповой задачей. Вводится трехмерная сетка способом, подобным описанному в разд. 2.4.1. Пусть $D_{s, t, u}$ и $B_{s, t, u}$ обозначают величины $D(x, y, z)$ и $B(x, y, z)$ в объеме

$$x_s \leq x \leq x_s + \Delta x_s; \quad y_t \leq y \leq y_t + \Delta y_t; \quad z_u \leq z \leq z_u + \Delta z_u \quad (2.194)$$

и т. д. Конечно-разностное уравнение в точке (x_s, y_t, z_u) получается интегрированием уравнения диффузии по объему

$$\begin{aligned} x_s - \Delta x_{s-1} \leq x \leq x_s + \Delta x_s; \quad y_t - \Delta y_{t-1} \leq y \leq y_t + \Delta y_t; \\ z_u - \Delta z_{u-1} \leq z \leq z_u + \Delta z_u. \end{aligned} \quad (2.195)$$

Очевидно, что конечно-разностное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} a_{s, t, u} f_{s+1, t, u} + b_{s, t, u} f_{s, t+1, u} + c_{s, t, u} f_{s-1, t, u} + \\ - d_{s, t, u} f_{s, t-1, u} + p_{s, t, u} f_{s, t, u+1} + q_{s, t, u} f_{s, t, u-1} + e_{s, t, u} f_{s, t, u} = h_{s, t, u}, \end{aligned} \quad (2.196)$$

где

$$e_{s, t, u} = a_{s, t, u} + b_{s, t, u} + c_{s, t, u} + d_{s, t, u} + p_{s, t, u} + q_{s, t, u} + k_{s, t, u}. \quad (2.197)$$

Можно записать уравнение, подобное (2.38), именно

$$\begin{aligned} k_{s, t, u} = B_{s, t, u} V_{s, t, u} + B_{s-1, t, u} V_{s-1, t, u} + B_{s, t-1, u} V_{s, t-1, u} + \\ + B_{s-1, t-1, u} V_{s-1, t-1, u} + B_{s, t, u-1} V_{s, t, u-1} + B_{s-1, t, u-1} V_{s-1, t, u-1} + \\ + B_{s, t-1, u-1} V_{s, t-1, u-1} + B_{s-1, t-1, u-1} V_{s-1, t-1, u-1}, \end{aligned} \quad (2.198)$$

где V — объем, определенный в (2.195). Формула, аналогичная (2.35), имеет вид

$$\begin{aligned} a_{s, t, u} = (D_{s, t, u} \Delta y_t \Delta z_u + D_{s, t-1, u} \Delta y_{t-1} \Delta z_u + \\ + D_{s, t, u-1} \Delta y_t \Delta z_{u-1} + D_{s, t-1, u-1} \Delta y_{t-1} \Delta z_{u-1}) / 2 \Delta x_s. \end{aligned} \quad (2.199)$$

Этот метод получения конечно-разностных уравнений подразумевает использование соотношений симметрии

$$a_{s,t,u} = c_{s+1,t,u}; \quad b_{s,t,u} = d_{s,t+1,u}; \quad p_{s,t,u} = q_{s,t,u+1}. \quad (2.200)$$

Диагональный член e снова больше суммы недиагональных элементов.

2.19.2. Имеется несколько методов решения трехмерных конечно-разностных уравнений. Например, можно использовать точечный, линейный и плоский методы верхней релаксации. Точечному методу соответствует схема итераций

$$f_{s,t,u}^n = \omega(a_{s,t,u} f_{s+1,t,u}^{n-1} + b_{s,t,u} f_{s,t+1,u}^{n-1} + c_{s,t,u} f_{s-1,t,u}^{n-1} + d_{s,t,u} f_{s,t-1,u}^n + p_{s,t,u} f_{s,t,u+1}^{n-1} + q_{s,t,u} f_{s,t,u-1}^n - h_{s,t,u}) / e_{s,t,u} + (1 - \omega) f_{s,t,u}^{n-1}. \quad (2.201)$$

Линейным методом верхней релаксации решается задача одновременно для целой линии точек. Уравнения решаются в последовательности: $s = 1, t = 1$ и все u ; $s = 2, t = 1$ и все u и т. д. Рассмотрим тот момент, когда необходимо решить уравнение в точках $s = s, t = t$ и для всех u . Величины потоков в n -й итерации известны в точках $(s - 1, t, u)$ и $(s, t - 1, u)$. Величины потоков в $n - 1$ -й итерации известны в точках $(s + 1, t, u)$ и $(s, t + 1, u)$. Линейный итерационный метод сводится к решению уравнения

$$e_{s,t,u} \tilde{f}_{s,t,u} - p_{s,t,u} \tilde{f}_{s,t,u+1} - q_{s,t,u} \tilde{f}_{s,t,u-1} = a_{s,t,u} f_{s+1,t,u}^{n-1} + b_{s,t,u} f_{s,t+1,u}^{n-1} + c_{s,t,u} f_{s-1,t,u}^n + d_{s,t,u} f_{s,t-1,u}^n - h_{s,t,u} \quad (2.202a)$$

относительно величин $\tilde{f}_{s,t,u}$. При этом s имеет фиксированное значение s, t — фиксированное значение t , а u пробегает все возможные значения u . Уравнения (2.202a) имеют тридиагональную форму и могут быть решены рекуррентным способом, описанным в гл. 1. Следующая стадия линейного итерационного метода определяется соотношением

$$f_{s,t,u}^n = f_{s,t,u}^{n-1} + \omega (f_{s,t,u} - f_{s,t,u}^{n-1}). \quad (2.202b)$$

Оптимальная величина ω может быть найдена методом, изложенным в разд. 2.12.1. Для демонстрации подобия трех- и двухмерной теорий напомним уравнение (2.202a) в другой форме, именно

$$f_{s,t}^n = e_{s,t}^{-1} (a_{s,t} f_{s+1,t}^{n-1} + b_{s,t} f_{s,t+1}^{n-1} + c_{s,t} f_{s-1,t}^n + d_{s,t} f_{s,t-1}^n - h_{s,t}) + (1 - \omega) f_{s,t}^{n-1}. \quad (2.203)$$

В этом уравнении $f_{s,t}$ означает вектор $f_{s,t} = (f_{s,t,1}, f_{s,t,2} \dots)$, $e_{s,t}$ означает матрицу

$$\begin{vmatrix} e_{s,t,1} & -p_{s,t,1} & & & \\ -q_{s,t,2} & e_{s,t,2} & -p_{s,t,2} & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix},$$

$a_{s,t}$ — диагональная матрица с элементами $a_{s,t,1}, a_{s,t,2}$ и т. д. Согласно методу, описанному в разд. 2.13.2, асимптотическая скорость сходимости определяется величиной ξ , где ξ — наибольшее собственное число оператора

$$a_{s,t} g_{s+1,t} + b_{s,t} g_{s,t+1} + c_{s,t} g_{s-1,t} + d_{s,t} g_{s,t-1} = e_{s,t} (1 - \omega - \xi) g_{s,t} / \omega. \quad (2.204)$$

Выполняя преобразование

$$g_{s,t}^* = (\xi)^{s+t/2} g_{s,t}, \quad (2.205)$$

получаем, что

$$\frac{1 - \omega - \xi}{\omega} = -\eta \sqrt{\xi}, \quad (2.206)$$

где η — собственное число оператора

$$a_{s,t} g_{s+1,t} + b_{s,t} g_{s,t+1} + c_{s,t} g_{s-1,t} + d_{s,t} g_{s,t+1} = \eta e_{s,t} g_{s,t}. \quad (2.207)$$

Можно показать, что оптимальная величина ω отвечает уравнению (2.127).

2.19.3. Плоскостной метод верхней релаксации определяется уравнением, подобным (2.122). Каждый шаг внутренней итерации теперь должен осуществляться итерационным образом. Эта добавочная итерационная стадия требует тщательной оценки количества итераций в каждой плоскости.

2.19.4. Существует класс методов, сходных с методом переменных направлений: задача решается сначала в x -направлении, затем — в y -направлении и наконец — в z -направлении. Эти методы описаны Дугласом и Рэчфордом [24] и Дугласом [25]. Трудности, возникающие при реализации двухмерного метода переменных направлений, конечно, существуют и в трехмерном случае в дополнение к другим трудностям, указанным Дугласом, Келлогом и Варга [31].

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- A — сечение поглощения или увода
- a — коэффициент конечно-разностного уравнения
- B — $A + D\alpha^2$
- C — типичное сечение процесса (см. § 2.2)
- C_n — полином Чебышева (§ 2.16)
- c — коэффициент конечно-разностного уравнения
- D — коэффициент диффузии нейтронов
- d — коэффициент конечно-разностного уравнения
- e — коэффициент конечно-разностного уравнения
- F — поток нейтронов
- f — поток нейтронов
- G — точность внутренней итерации [см. (2.192)]
- g — поток нейтронов
- h — член источника в конечно-разностном уравнении
- I — единичная матрица
- i — индекс
- J_0 — функция Бесселя
- j — индекс
- J — матрица, определенная в (2.120)
- k — коэффициент конечно-разностного уравнения
- L — нижняя треугольная матрица
- L — утечка нейтронов
- l — длина интервала сетки в § 2.3, индекс в § 2.8
- M — верхний предел индекса s
- M — матрица (см. разд. 2.10.4)
- m — индекс
- N — верхний предел индекса t
- n — размерность матрицы в § 2.10, индекс итерации
- P — $M \times N$
- P — матрица, определенная в (2.156)
- p_n — полином, используемый в разд. 2.16.12
- $P_{s,t}, u$ — конечно-разностный коэффициент в § 2.19
- Q — источник нейтронов
- q — коэффициент конечно-разностного уравнения
- $R_{s,t}$ — площадь поверхности, определенная в (2.32)
- R — максимальная величина r
- r_s — геометрическая координата
- S — площадь поверхности
- S — матрица, определенная в (2.178)
- s_i — собственный вектор матрицы S
- s — индекс
- t — индекс
- T — верхний индекс, означающий транспонирование
- T — некоторая матрица в § 2.4
- U — верхняя треугольная матрица [см. (2.104)]
- V — объем
- W — матрица [см. (2.40)]
- X — матрица общего типа
- x — вектор общего типа
- x, y, z — геометрические координаты

- X, Y, Z — максимальные величины x, y, z соответственно
 $Z_{s,t}$ — площадь поверхности, определенная в (2.32)
 μ — собственное число
 α — баклинг [поток изменяется как $\cos \alpha s$]
 γ — корень функции Бесселя J_0
 ε — малое число
 Φ — поток нейтронов
 Ψ — поток нейтронов
 φ — поток нейтронов
 κ — баклинг [см. (2.6)]
 κ_g — геометрический параметр
 λ — длина экстраполяции
 ν — матрица, определенная в (2.167)
 ν — число в интервале $[0, 1]$
 ξ — собственное число матрицы J
 ξ — собственное число матрицы J
 Δ — разность, например $\Delta r_s = (r_{s+1} - r_s)/2$
 β — геометрическая координата
 $\psi_{s,t}$ — коэффициент, использующийся в (2.4)
 ψ_s — коэффициент, использующийся в (2.5)
 ∇^2 — оператор Лапласа
 ∇f — производная f по нормали к границе
 σ — константа, используемая в (2.107)
 ω — параметр в процессе итераций
 η — собственное число матрицы $L + U$
 $\rho(X)$ — спектральный радиус матрицы X
 ρ — собственное число матрицы S
 τ — параметр, использующийся в (2.185a)
 Σ — символ суммирования
 $\| \cdot \|$ — спектральная норма
 $f^{(4)}$ — четвертая производная от f : аналогично $f^{(2)}, f^{(3)}$
 $*$ — в § 2.8 означает сопряжение

ЛИТЕРАТУРА

1. Glasstone S., Edlund M. C. The Elements of Nuclear Theory. D. Van Nostrand. 1952. (См. на русском языке: Глестон С., Эдлунд М. Основы теории ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1954.)
2. Feinberg S. M. Heterogeneous Methods for Calculating Reactors. Progress in Nuclear Energy, Series I. Vol. I, 311, 1956.
3. Forsythe G. E., Wasow W. R. Finite Difference Methods for Partial Differential Equations. John Wiley, 1960.
4. Hassitt A. A Computer Program to Solve the Multigroup Diffusion Equations. TRG 229(R), H.M.S.O., London, 1962.
5. Enderby J. A Two Dimensional Flux and Temperature Distribution Program for Thermal Reactors. FTD-2, TRG 46(R), H.M.S.O., London, 1961.
6. Woods L. C. The Relaxation Treatment of Singular Points in Poisson's Equation. Quart. J. Mech. and Appl. Math., 6, 163.
7. MacNeal R. H. An Asymmetrical Finite Difference Network. Quart. Appl. Math., 11, 295 (1953).
8. Varga R. S. Matrix Iterative Analysis. Prentice-Hall, 1962.
9. Weinberg A., Wigner E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. The University of Chicago Press, Chicago, 1958. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
10. Householder A. S. Principles of Numerical Analysis. McGraw-Hill, 1953.
11. Hassitt A. Methods of Calculation of Heterogeneous Reactors, Prog. in Nuclear Energy. Series I, Vol. 28, 271. Pergamon Press, 1955.
12. Fox L. Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations. Addison—Wesley, 1962.
13. Southwell R. V. Relaxation Methods in Theoretical Physics. Oxford, 1946.
14. Frankel S. P. Convergence Rates of Iterative Treatment of Partial Differential Equations. Math. Tables Aids Comput., 4, 65 (1950).
15. Young D. M. Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type. Trans. Amer. Math. Soc., 76, 92 (1954).
16. Tee G. J. Eigenvectors of the Successive Over-Relaxation Process, and Its Combination With Chebyshev Semi-Iteration. Computer Journal, 6, No. 3, 250 (1963).
17. Cuthill E. H., Varga R. S. A Method of Normalized Block Iteration. J. Assoc. Comput. Mach., 6, 236 (1959).
18. Parter S. V. On Two Line Iterative Methods for the Laplace and Biharmonic Difference Equations. Numerische Math., 1, 240 (1959).

19. Birkhoff G., Varga R. S., Young D. M. Alternating Direction Implicit Methods. *Advances in Computers*, **3**, Academic Press, 1962.
20. Wachspress E. L., Habetler G. J. An Alternating Direction Implicit Iteration Technique. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, **8**, 403 (1960).
21. Flanders D. A., Shortley G. Numerical Determination of Fundamental Modes. *J. Appl. Phys.*, **21**, 1326 (1950).
22. Birkhoff G., Varga R. S. Reactor Criticality and Non-Negative Matrices. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, **6**, 354 (1958).
23. Hassitt A. A Program for Solving the Multigroup Neutron Diffusion Equation. AERE T/R 2487, H.M.S.O., London, 1958.
24. Douglas J., Rachford H. H. On the Numerical Solution of Heat Conduction Problems in Two or Three Space Variables. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **82**, 421 (1956).
25. Douglas J. Alternating Direction Methods for Three Space Variables. *Numerische Math.*, **4**, 41 (1962).
26. Tee G. J. A New Method for Solving Elliptic Partial Differential Equations. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, **12**, 311 (1964).
27. Pearce R. M. A Numerical Method for Solving the Two Dimensional Neutron Diffusion Equation. *J. Nuclear Energy*, **2**, 277 (1956).
28. CANDID 2D. A two dimensional neutron diffusion program. Control Data Corporation, publication number 60, 136, 900, 1965.
29. Percy C. On Convergence of Alternating Direction Procedures. *Numerische Math.*, **4**, 172 (1962).
30. Gorub G. H., Varga R. S. Chebyshev semi-iterative methods, successive over relaxation iterative methods and second order Richardson iterative methods. Part I, II *Numerische Math.*, **3**, 147 (1961).
31. Douglas J., Jr., Kellogg R. B., Varga R. S. Alternating Direction Iteration Methods for n Space Variables. *Mathematics of Computation*, **17**, 279 (1963).
32. Wachspress E. L. Iterative Solution of Elliptic Systems. Prentice-Hall, 1966.

Глава 3

ТЕОРИЯ ПЕРЕНОСА. МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ

Б. Карлсон, К. Латрон

(Лос-Аламосская научная лаборатория, Калифорнийский университет)

Метод дискретных ординат для численного решения уравнений, описывающих нейтронные ансамбли, можно сформулировать многими способами. Эта глава описывает способы, основанные на принципах физики переноса нейтронов. Физические принципы используются не только для обеспечения соответствия между математическим и физическим описаниями переноса нейтронов, но также и для достижения сходимости численного решения и ускорения ее. Существование сходимости к истинному решению является предположением, но для методов, которые обсуждаются ниже, это предположение подтверждается прагматической проверкой численных расчетов. Другими словами, для широкого круга тестовых задач численные результаты, полученные этими методами, согласуются с точными решениями (когда эта проверка возможна), с решениями, полученными другими методами, и с результатами эксперимента, если принимать во внимание неопределенности в сечениях.

Мы начнем описание методов дискретных ординат с основных определений и исходных предположений. Задача теории переноса нейтронов — определить функцию распределения $\psi(\mathbf{r}, v\Omega, t)$. В общем случае ψ — функции трех пространственных переменных (\mathbf{r}), двух угловых (Ω), скорости v и времени t . В этих обозначениях ψ/v — распределение плотности нейтронов, т. е. количество нейтронов в единице объема, в единичном интервале скоростей ($v\Omega$), в момент времени t . При некоторых предположениях сохранение баланса нейтронов выражается линейным уравнением Больцмана. Именно предполагается, что: а) нейтроны не изменяют направления полета между столкновениями с ядрами среды; б) количество нейтронов велико, так что статистическими флуктуациями можно пренебречь, и в то же время достаточно мало, чтобы не учитывать нейтрон-нейтронные взаимодействия; в) возмущение среды под воздействием нейтронного газа отсутствует в течение рассматриваемого интервала времени; г) квантовомеханические эффекты незначительны. В настоящей главе предполагается выполнение этих условий. Однако излагаемые здесь методы могут быть использованы и в случаях, когда некоторые из них не выполняются [1, 2]. Общее линейное уравнение Больцмана для ψ имеет вид [3]

$$\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, v\Omega, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, v\Omega, t) + \Sigma_{tot} \psi(\mathbf{r}, v\Omega, t) = \iiint \psi(\mathbf{r}', v'\Omega', t') \Sigma(v'\Omega', t' \rightarrow v\Omega, t) dt' d\Omega' dv' + Q(\mathbf{r}, v\Omega, t), \quad (3.1)$$

где Σ_{tot} — полное макроскопическое сечение [которое может также быть функцией от (\mathbf{r}, v, t)] и Σ — макроскопическая вероятность перехода $v'\Omega', t' \rightarrow v\Omega, t$. Например, для изотропного рассеяния без изменения скорости $\Sigma = \Sigma_s(\mathbf{r}, v', t) \delta(v' - v) \delta(t' - t) / 4\pi$, где Σ_s — макроскопическое сечение рассеяния. Источник, не зависящий от ψ , обозначен Q . Вид оператора дивергенции для простых ортогональных геометрий приведен в табл. 3.2. (см. разд. 3.1.1).

В этой главе описаны два способа формулирования уравнения дискретных ординат. В § 3.1 эти уравнения выводятся для конечной ячейки в фазовом пространстве способом, аналогичным тому, который использовался для вывода аналитического уравнения переноса. Этот вывод дает дискретно-ординатное представление в терминах средних по ячейке от функции распределения ψ . Отношение этих средних для отдельной вариации внутри ячейки исследуется в § 3.5, где используются разностные соотношения, чтобы уменьшить число неизвестных в уравнении переноса, и устанавливаются условия эквивалентности между аналитическими уравнениями моментов и дискретно-ординатными представлениями. Остальная часть главы посвящена описанию схем, использующихся для решения уравнений дискретных ординат, сформулированных в § 3.1. Выбор угловых квадратурных коэффициентов обсуждается в § 3.3, где обращается внимание на принципы инвариантности относительно вращений. Использование этого принципа уменьшает возможность зависимости решения от геометрической ориентации системы.

В § 3.4 описаны схемы, уменьшающие сложность уравнения переноса. Например, выводится приближение, аналогичное диффузионному в аналитической теории. Методы решения изложены в § 3.5 и 3.6.

В § 3.5 выводятся разностные уравнения, необходимые для исключения неизвестных из уравнения переноса. Некоторые разностные соотношения выбраны по соображениям простоты; другие, потенциально более точные, выводятся усреднением приближенного распределения ψ . В § 3.5 освещены также методы рекуррентного решения и решения с помощью обращения матриц. В § 3.6 выводятся принципы оценки решения, необходимые для устойчивости численного счета. Итерационная стратегия и вопросы сходимости рассмотрены в § 3.7; в § 3.8 методы § 3.6—3.7 используются при решении достаточно простой задачи; § 3.9 и 3.10 посвящены развитию метода дискретных ординат для решения интегрального уравнения переноса и сопряженного уравнения.

§ 3.1. ФОРМУЛИРОВКА УРАВНЕНИЙ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ В ТЕРМИНАХ ДИСКРЕТНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Уравнения дискретных ординат можно записать, применяя разностные методы к аналитической форме уравнения Больцмана, но этот способ имеет некоторые недостатки. Результирующие уравнения отражают условия баланса нейтронов только в пределах малых интервалов. Можно показать, что они численно неустойчивы. Решение может стать комплексным и вообще лишеным физического смысла. Мы выведем уравнение Больцмана для конечных ячеек в фазовом пространстве, используя средние от функции ψ по \mathbf{r} , v , Ω и t . Исходя из требования сохранения баланса нейтронов, получено простое и устойчивое по отношению к численному счету разностное уравнение. Средние величины от ψ , которые обозначаются N , часто используются самостоятельно и обычно детальная связь между N и ψ не исследуется. Однако рассматриваемый подход допускает корректную формулировку разностных уравнений, начиная от представления ψ .

Методы этого раздела являются развитием идей, разрабатываемых в течение более чем десяти последних лет. Общее направление развития шло от решения отдельных форм уравнения Больцмана к разработке методов, применимых к общему уравнению переноса. Руководствуясь численными экспериментами и физической интуицией, мы отказались от одних идей (например, метода связанных прямолинейных сегментов) и приняли другие (например, метод перенормировки для обеспечения баланса). Вместо того чтобы подробно проследить историю методов, мы дадим вывод сложившейся к настоящему времени формулировки, отсылая читателя к библиографии [4—16].

Мы начнем с определения координатных систем как пространственных, так и угловых. Затем внутри элементарной ячейки фазового пространства, определяемой этими координатными системами, введем средние по ячейке от

функции распределения $\psi(r, v, \Omega, t)$. Далее эти средние используем для записи уравнения баланса нейтронов внутри ячейки, т. е. для вывода уравнения Больцмана в форме уравнения дискретных ординат. Этот вывод сначала осуществляется для простой прямоугольной системы координат и без детального рассмотрения члена источника нейтронов, связанного со столкновениями. Случай криволинейных ортогональных геометрий рассмотрен в разд. 3.1.4, что является развитием метода для решения уравнений, содержащих члены с производными по угловым переменным. И, наконец, в разд. 3.1.5 вывод транспортного уравнения дискретных ординат завершается подробным рассмотрением члена источника.

3.1.1. Системы координат. Область изменения r определяется набором неперекрывающихся ячеек сетки. Объемы этих ячеек обозначаются $V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}$, где смещенные на $1/2$ нижние индексы определяют центр ячейки, а i, j и k указывают положение ячейки в системе координат r . Поверхности ячеек обозначаются величинами с несмещенными индексами, например $A_{i, j+1/2, k+1/2}$.

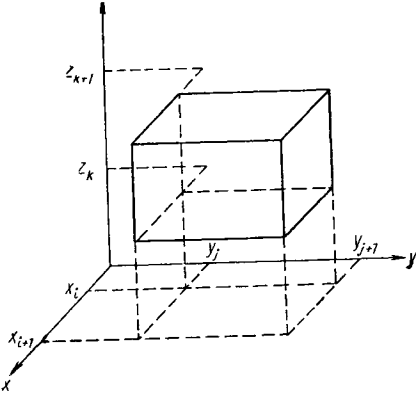


Рис. 3.1. Ячейка в прямоугольной геометрии.

Часто удобно хотя и не необходимо выбрать ортогональные системы координат, в которых ячейки образуются при пересечении ортогональных поверхностей. Например, в прямоугольной геометрии (x, y, z) ячейки представляют собой параллелепипеды (рис. 3.1). Объем ячейки есть $V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} = (x_{i+1} - x_i)(y_{j+1} - y_j)(z_{k+1} - z_k) = \Delta x \Delta y \Delta z$. Площадь поверхности, перпендикулярной направлению x при $x = x_i$, равна $A_{i, j+1/2, k+1/2} = \Delta y \Delta z$. Площадь параллельной ей поверхности при $x = x_{i+1}$ есть $A_{i+1, j+1/2, k+1/2}$

и такова же по величине. Площади двух поверхностей, перпендикулярных оси y , $B_{i+1/2, j, k+1/2}$ и $B_{i+1/2, j+1, k+1/2}$ равны $\Delta x \Delta z$ и площади остальных поверхностей $C_{i+1/2, j+1/2, k}$ и $C_{i+1/2, j+1/2, k+1}$ равны $\Delta x \Delta y$. Элементарные площади поверхностей и объемы для ортогональной прямоугольной, цилиндрической и сферической геометрий различных размерностей приведены в табл. 3.1. Заметим, что хотя в A, B, C используются все три индекса, на самом деле площади в общем случае не являются функциями всех индексов. Индексы изменяются в пределах i от 0 до IM , j от 0 до JM , k от 0 до KM , причем точка с координатами $(0, 0, 0)$ расположена в начале координат. При таких обозначениях в i -направлении находится IM интервалов и $IM + 1$ координатных поверхностей. В дальнейшем рассматриваются геометрии, указанные в табл. 3.1 (см. также табл. 3.2). Когда используются ортогональные геометрические системы координат, угловые переменные можно измерять в прямоугольной системе координат (μ, η, ξ) , построенной в данной точке параллельно единичным векторам геометрической системы (см., например, рис. 3.2). Для дискретного направления Ω_m компоненты Ω_m вдоль осей μ, η и ξ суть μ_m, η_m и ξ_m ; эти проекции являются направляющими косинусами вектора Ω_m . Следовательно, $\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1$. Направление Ω_m можно изобразить точкой на поверхности единичной сферы, с которой связан элемент поверхности w_m . Тогда w_m можно приписать роль угловых квадратурных весов с понятным требованием, чтобы сумма их равнялась величине поверхности единичной сферы. Будем говорить, что величина поверхности сферы измеряется в единицах 4π , т. е. $\sum_{m=1}^M w_m = 1$. В дальнейшем при выводе уравнений дискретных

ординат возникнут дополнительные ограничения на Ω_m и w_m . Отметим, что скорость в диапазоне $(v_{g-1/2}, v_{g+1/2})$ обозначается как $v_g, g = 1, 2, \dots, G$, и время в интервале от t_s до t_{s+1} — как $t_{s+1/2}, s = 0, 1, \dots, S$, причем малые

Выражения для поверхностей и объемов в различных геометриях

| Геометрия | Переменные | V | A | B | C |
|-----------------------------|----------------------|------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------|-------------------------|
| Прямоугольная | x | Δx_i | 1 | | |
| | x, y | $\Delta x_i \Delta y_j$ | Δy_j | Δx_i | |
| | x, y, z | $\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$ | $\Delta y_j \Delta z_k$ | $\Delta x_i \Delta z_k$ | $\Delta x_i \Delta y_j$ |
| Цилиндрическая ^a | r | R_i | $2\pi r_i$ | | |
| | r, θ | $R_i \Delta \theta_j$ | $2\pi r_i \Delta \theta_j$ | Δr_i | |
| | r, z | $R_i \Delta z_k$ | $2\pi r_i \Delta z_k$ | | R_i |
| | r, θ, z | $R_i \Delta \theta_j \Delta z_k$ | $2\pi r_i \Delta \theta_j \Delta z_k$ | $\Delta r_i \Delta z_k$ | $R_i \Delta \theta_j$ |
| Сферическая ^a | r | S_i | $4\pi r_i^2$ | | |
| | r, θ | $S_i S_j$ | $4\pi r_i^2 S_j$ | $R_i \sin 2\pi \theta_j$ | |
| | r, θ, φ | $S_i S_j \Delta \varphi_k$ | $4\pi r_i^2 S_j \Delta \varphi_k$ | $R_i \sin 2\pi \theta_j \varphi_k$ | $R_i \Delta \theta_j$ |

^a θ и φ измеряются в радианах, $R_i = \pi (r_{i+1}^2 - r_i^2)$; $S_i = 4\pi (r_{i+1}^3 - r_i^3)/3$; $S_j = (\cos 2\pi \theta_j - \cos 2\pi \theta_{j+1})/2$; $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ и аналогично для других переменных.

значения z относятся к начальным моментам времени, а малые значения g — к самым высоким скоростям.

3.1.2. Локальные средние от функции распределения. Первое среднее от функции ψ , которое мы получим, является средним в интервале скоростей от

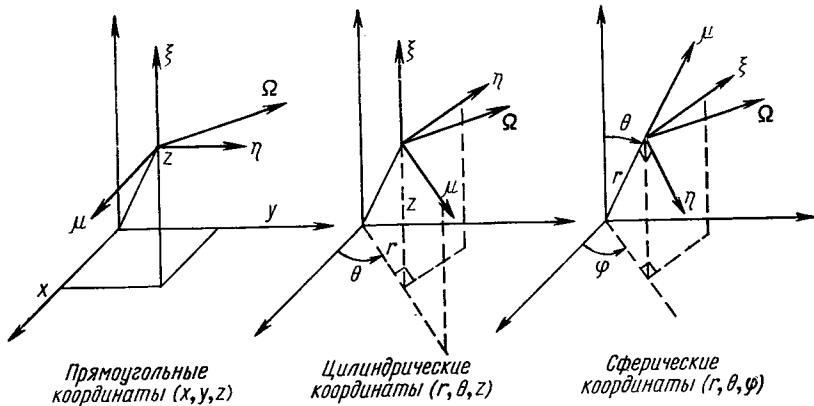


Рис. 3.2. Расположение угловой координатной системы.

$v_{g-1/2}$ до $v_{g+1/2}$ распределением $\psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t)$. Это означает переход к многогрупповому приближению. Количество нейтронов в конкретном интервале скоростей обозначается $N_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t) = \psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t) (v_{g-1/2} - v_{g+1/2})$. Все нейтроны в этом диапазоне рассматриваются как единое целое. Однако если окажется необходимым детально рассмотреть распределение нейтронов по энергии (например, в возрастном приближении), будет использоваться величина ψ_g — количество нейтронов в единичном интервале скоростей. В многогрупповом приближении фигурируют усредненные по скорости сечения, которые отмечены индексом g .

Кроме усредненной по скорости величины ψ требуются еще усредненные по каждой, кроме одной, из оставшихся переменных. Например, средняя вели-

Аналитические формы $\nabla \cdot (\Omega \psi)$ в некоторых ортогональных геометриях

| Геометрия | Пространственные переменные ^а | Угловые переменные ^а | $\nabla \cdot \Omega \psi$ |
|-----------------------------|--|---------------------------------|--|
| Прямоугольная | x | μ | $\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}$ |
| | x, y | μ, η | $\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y}$ |
| | x, y, z | μ, η, ξ | $\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z}$ |
| Цилиндрическая ^б | r | ω, ξ | $\frac{\mu}{r} \cdot \frac{\partial (r\psi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial (\eta\psi)}{\partial \omega}$ |
| | r, θ | ω, ξ | $\frac{\mu}{r} \cdot \frac{\partial (r\psi)}{\partial r} + \frac{\eta}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial (\eta\psi)}{\partial \omega}$ |
| | r, z | ω, ξ | $\frac{\mu}{r} \cdot \frac{\partial (r\psi)}{\partial r} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial (\eta\psi)}{\partial \omega}$ |
| | r, θ, z | ω, ξ | $\frac{\mu}{r} \frac{\partial (r\psi)}{\partial r} + \frac{\eta}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial (\eta\psi)}{\partial \omega}$ |
| Сферическая ^в | r | μ | $\frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2\psi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial [(1-\mu^2)\psi]}{\partial \mu}$ |
| | r, θ | μ, ω | $\frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2\psi)}{\partial r} + \frac{\eta}{r \sin \theta} \cdot \frac{\partial (\sin \theta \psi)}{\partial \theta} +$ $+ \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial [(1-\mu^2)\psi]}{\partial \mu} - \frac{\text{ctg } \theta}{r} \frac{\partial (\xi\psi)}{\partial \omega}$ |
| | r, θ, φ | μ, ω | $\frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2\psi)}{\partial r} + \frac{\eta}{r \sin \theta} \cdot \frac{\partial (\sin \theta \psi)}{\partial \theta} +$ $+ \frac{\xi}{r \sin \theta} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \frac{\partial [(1-\mu^2)\psi]}{\partial \mu} - \frac{\text{ctg } \theta}{r} \cdot \frac{\partial (\xi\psi)}{\partial \omega}$ |

^а θ, φ и ω измеряются в радианах.

^б $\mu = (1 - \xi^2)^{1/2} \cos \omega$, $\eta = (1 - \xi^2)^{1/2} \sin \omega$, ω — угол поворота вокруг оси ξ .

^в $\eta = (1 - \mu^2)^{1/2} \cos \omega$, $\xi = (1 - \mu^2)^{1/2} \sin \omega$, ω — угол поворота вокруг оси μ .

чина N_g по объему ячейки $V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}$ и по поверхности единичной сферы направлений ω_m при $t = t_s$ записывается следующим образом:

$$N_{g,s,m,i+1/2,j+1/2,k+1/2} = \iint_{V\Omega} N_g(\mathbf{r}, \Omega, t_s) dV d\Omega / \iint_{V\Omega} dV d\Omega. \quad (3.2)$$

В этом обозначении индексы $i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2, m, g$, но не s соответствуют серединам интервалов. Это среднее имеет размерность потока нейтронов в единице объема внутри единичного телесного угла, т. е. такую же размерность, как $N_g(\mathbf{r}, \Omega, t_s)$. Аналогично в прямоугольной геометрии средняя величина N_g на поверхности ячейки $x = x_i$ в угловом диапазоне ω_m в интервале времени $\Delta t = t_{s+1} - t_s$ записывается как

$$N_{g,s+1/2,m,i,j+1/2,k+1/2} = \iiint_{A\Omega t} N_g(\mathbf{r}, \Omega, t) dA d\Omega dt / \iint_{A\Omega t} dA d\Omega dt. \quad (3.3)$$

Здесь только индекс i не соответствует середине интервала, и N имеет такую же размерность, как $N_g(\mathbf{r}, \Omega, t)$. В прямоугольной геометрии требуется шесть усреднений N по поверхностям граней ячейки, по направлениям и времени,

одно усреднение по объему, направлениям и времени и два усреднения по объему и направлениям при фиксированных моментах времени. В криволинейной геометрии нужны еще дополнительно средние от N_g по времени и объему на «гранях ячейки направлений»*. Все эти средние имеют размерность такую же, как $N_g(\mathbf{r}, \Omega, t)$, все они являются неизвестными функциями транспортного уравнения в дискретной форме и требуются различные разностные соотношения, чтобы уравнивать число неизвестных с числом уравнений.

3.1.3. Уравнение переноса нейтронов в трехмерной прямоугольной геометрии. Внутри ячейки (см. рис. 3.1) скорость изменения количества нейтронов есть разность между увеличением числа нейтронов вследствие приточки из соседних ячеек, наличия источника и уменьшением вследствие утечки и соударений с ядрами среды. Разница между количеством нейтронов в ячейке в m -м угловом диапазоне в интервале времени (t_s, t_{s+1}) имеет вид (в терминах средних, введенных выше)

$$\omega_m (N_{g,s+1,m,i+1/2,j+1/2,k+1/2} - N_{g,s,m,i+1/2,j+1/2,k+1/2}) \times \\ \times V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}/v_g. \quad (3.4)$$

Количество нейтронов, пересекающих поверхность ячейки в m -м угловом диапазоне в интервале времени Δt , зависит от среднего потока на поверхности, среднего косинуса угла между направлением полета нейтронов и нормалью к поверхности от величины телесного угла, величины поверхности ячейки и временного интервала. В прямоугольной геометрии ориентация угловой координатной системы такова, что средние косинусы углов между нормалью поверхности и направлением полета нейтронов такие же, как направляющие косинусы угловой координатной системы. Если для удобства направление Ω_m выбрано так, что μ_m , η_m и ξ_m положительны, то поток нейтронов *внутри* ячейки есть

$$\omega_m \mu_m A_{i,j+1/2,k+1/2} N_{g,s+1/2,m,i,j+1/2,k+1/2} \Delta t + \\ + \omega_m \eta_m B_{i+1/2,j,k+1/2} N_{g,s+1/2,m,i+1/2,j,k+1/2} \Delta t + \\ + \omega_m \xi_m C_{i+1/2,j+1/2,k} N_{g,s+1/2,m,i+1/2,j+1/2,k} \Delta t. \quad (3.5)$$

Для противоположного направления (*из* ячейки) поток нейтронов имеет вид

$$\omega_m \mu_m A_{i+1,j+1/2,k+1/2} N_{g,s+1/2,m,i+1,j+1/2,k+1/2} \Delta t + \\ + \omega_m \eta_m B_{i+1/2,j+1,k+1/2} N_{g,s+1/2,m,i+1/2,j+1,k+1/2} \Delta t + \\ + \omega_m \xi_m C_{i+1/2,j+1/2,k+1} N_{g,s+1/2,m,i+1/2,j+1/2,k+1} \Delta t. \quad (3.6)$$

Заметим, что соотношения (3.5) и (3.6) безразмерны.

Наличие источника нейтронов, возникающих в единице объема в единичном телесном угле в единицу времени, учитывается введением средней величины $S_{g,s+1/2,m,i+1/2,j+1/2,k+1/2}$. Количество нейтронов источника, образующихся в ячейке, дается соотношением

$$\omega_m S_{g,s+1/2,m,i+1/2,j+1/2,k+1/2} V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} \Delta t. \quad (3.7)$$

Важно понять, что коль скоро уравнение Больцмана сформулировано в соответствующей размерности, действительная размерность средних N соответствует размерности источника. Например, в решении для сопряженной функции источник может иметь размерность макроскопического сечения [17].

Член источника нейтронов, представленный формулой (3.7), необходимо дополнить вкладом нейтронов, появляющихся вследствие рассеяния в рассма-

* Смысл выражения «границы ячейки направлений» станет понятным при рассмотрении углового перераспределения нейтронов.

триваемый телесный угол и в данный интервал скорости*. Подробное рассмотрение члена источника проводится в разд. 3.1.5.

Количество нейтронов, выведенных из ячейки посредством столкновений, зависит от полного макроскопического сечения, среднего потока в ячейке, величины телесного угла, объема ячейки и временного интервала:

$$\omega_m \Sigma_{g, s+1/2, i+1/2, j+1/2, k+1/2} N_{g, s+1/2, m, i+1/2, j+1/2, k+1/2} \times V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \Delta t. \quad (3.8)$$

Используя соотношения (3.4)—(3.8), запишем баланс нейтронов для ячейки:

$$(N_{s+1} - N_s) V / v \Delta t = \mu (A_i N_i - A_{i+1} N_{i+1}) + \eta (B_j N_j - B_{j+1} N_{j+1}) + \xi (C_k N_k - C_{k+1} N_{k+1}) + SV - \Sigma NV. \quad (3.9)$$

В уравнении (3.9) каждый член разделен на $\omega_m \Delta t$. Указаны только те индексы, которые соответствуют серединам интервалов.

Уравнение (3.9) является точным соотношением баланса нейтронов для конечной ячейки. В нем каждый член имеет ясный физический смысл. В случае прямоугольной геометрии уравнение (3.9) может быть записано в виде

$$\frac{N_{s+1} - N_s}{v \Delta t} + \frac{\mu (N_{i+1} - N_i)}{\Delta x} + \frac{\eta (N_{j+1} - N_j)}{\Delta y} + \frac{\xi (N_{k+1} - N_k)}{\Delta z} + \Sigma N = S. \quad (3.10)$$

В пределе при $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ и $\Delta z \rightarrow 0$

$$\frac{1}{v} \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\mu \partial N}{\partial x} + \frac{\eta \partial N}{\partial y} + \frac{\xi \partial N}{\partial z} + \Sigma N = S. \quad (3.11)$$

Получена аналитическая форма уравнения переноса в многогрупповом приближении.

3.1.4. Уравнение переноса нейтронов в криволинейных геометриях. В криволинейных геометриях ориентация угловой координатной системы изменяется с изменением пространственных координат. Иными словами, по мере перемещения нейтрона в системе проекции направления его полета на угловые координатные оси изменяются, даже если нейтрон не изменяет направления своего полета. В аналитической записи уравнения переноса угловые производные определяют изменение направления. Для получения разностного уравнения можно использовать конечно-разностную форму этих производных. Однако при этом баланс нейтронов, так точно сохраненный в уравнении (3.9), может нарушиться. Более того, подобная операция может породить сильную угловую корреляцию, физически необъяснимую, что повлечет за собой плохую сходимость итерационного процесса. Например, уравнение (3.9) включает неизвестную N для одного направления с индексом m , а учет изменения угловой координаты может ввести неизвестные, зависящие от нескольких величин m (см. разд. 3.2.2). Прием, с помощью которого сохраняется баланс нейтронов и уменьшается угловая корреляция, состоит в следующем. Уравнение (3.9) записывается для стационарного случая, когда сечения и внешние источники не зависят от времени, в геометрии, криволинейной в одном направлении, скажем, в цилиндрической:

$$\mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \eta (B_{j+1} N_{j+1} - B_j N_j) + \xi (C_{k+1} N_{k+1} - C_k N_k) + (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) / \omega_m + V \Sigma N = VS. \quad (3.12)$$

В это уравнение входят члены с коэффициентом α , представляющие собой члены тока через поверхности ячейки направлений. $N_{m-1/2}$ есть среднее от нейтронного потока по объему ячейки за интервал времени Δt по направлению $m - 1/2$.

* Этот подход можно обобщить, включив в рассмотрение нейтроны, испущенные в более ранние промежутки времени, которые попали в рассматриваемый временной интервал, т. е. запаздывающие нейтроны.

Направления $m \pm 1/2$ определяют границы углового диапазона ω_m . Величина $\alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} \Delta t$ — поток нейтронов, обусловленный угловым перераспределением, в рассматриваемый угловой диапазон; он аналогичен потоку нейтронов через геометрическую поверхность ячейки. В уравнение (3.12) входит эта величина, разделенная на $\omega_m \Delta t$.

Коэффициенты α определяются из условия отсутствия перетечки, т. е. из условия $V \Sigma N = VS$. Тогда все N одинаковы и для криволинейной в одном направлении геометрии $B_{j+1} = B_j$ и $C_{k+1} = C_k$. Оставшиеся члены в уравнении (3.12) дают рекуррентное соотношение для α

$$\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} = -\omega_m \mu_m (A_{i+1} - A_i). \quad (3.13)$$

Чтобы процесс углового перераспределения не влиял на баланс нейтронов, члены с α не должны зависеть ни от рождения, ни от поглощения нейтронов. Иными словами, после умножения уравнения (3.12) на ω_m и суммирования результата по m (т. е. интегрирования по всем направлениям), получающееся выражение

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^M (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) = \\ = \alpha_{M+1/2} N_{M+1/2} - \alpha_{1/2} N_{1/2} \end{aligned} \quad (3.14)$$

должно быть равно нулю. Если направления выбраны так, что из первой ячейки нейтроны только вытекают ($\alpha_{1/2} = 0$), а в последнюю ячейку только втекают ($\alpha_{M+1/2} = 0$), то выражение (3.14) будет равно нулю для любого N и баланс нейтронов сохраняется. Если ω_m положительны, $A_{i+1} > A_i$ и направления сетки разбиения выбраны так, что μ_m монотонно увеличивается, то коэффициенты α обладают свойством неотрицательности и поэтому члены в уравнении (3.12) можно интерпретировать как поток. Если $\alpha_{1/2} = \alpha_{M+1/2} = 0$, то сумма по m левых частей каждого из уравнений (3.13) равна нулю, следовательно, должно выполняться и соотношение

$$\sum_{m=1}^M \omega_m \mu_m = 0, \quad (3.15)$$

которое представляет собой дополнительное ограничение на угловые квадратурные коэффициенты. Уравнение (3.15) удовлетворяется при любом угловом разбиении, которое симметрично относительно средней точки диапазона μ . Несимметричное разбиение нежелательно, так как результаты расчета не инвариантны относительно геометрической инверсии. Симметричная сетка гарантирует также, что если $\alpha_{1/2} = 0$, то и $\alpha_{M+1/2} = 0$.

В пределе при уменьшении величин интервалов описанная выше схема приводит к возникновению производных по угловым координатам. Например, в одномерной сферически симметричной системе уравнение (3.12) может быть записано в виде

$$\frac{\mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i)}{V} + \frac{(\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2})}{V \omega_m} + \Sigma N = S. \quad (3.16)$$

Первый член (см. табл. 3.1)

$$\frac{3\mu (r_{i+1}^2 N_{i+1} - r_i^2 N_i)}{(r_{i+1}^2 + r_i r_{i+1} + r_i^2) (r_{i+1} - r_i)} \quad (3.17)$$

в пределе дает $\frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2 N)}{\partial r}$. Второй член переходит в производную по направлению μ от величины αN . Из уравнения (3.14) получаем соотношение

$$\frac{\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}}{V \omega_m} = -\frac{\mu_m (A_{i+1} - A_i)}{V} = -\frac{3\mu (r_{i+1} + r_i)}{r_{i+1}^2 + r_i r_{i+1} + r_i^2} \quad (3.18)$$

И в пределе этот член дает $\partial\alpha/\partial\mu = -2\mu/r$, а после интегрирования $\alpha = -\mu^2/r + \text{const}$. Но в пределе α исчезает на обоих концах углового диапазона ($\alpha_{1/2} = \alpha_{M+1/2} = 0$), т. е. при $\mu = \pm 1$. Поэтому окончательно $\alpha = (1 - \mu^2)/r$. Уравнение (3.16) принимает вид

$$\frac{\mu}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2 N)}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial [(1-\mu^2) N]}{\partial \mu} + \Sigma N = S, \quad (3.19)$$

что является балансной формой уравнения Больцмана в одномерной геометрии.

Цель введения α состояла в том, чтобы баланс сохранялся и для конечных интервалов. Отталкиваясь от уравнения (3.19), угловую производную можно записать в виде

$$\frac{(1-\mu_{m+1/2}^2) N_{m+1/2} - (1-\mu_{m-1/2}^2) N_{m-1/2}}{r\omega_m} \quad (3.20)$$

при условии, что $\mu_{M+1/2}^2 = \mu_{1/2}^2 = 1$. Однако часто уравнение (3.19) записывают в виде

$$\mu \frac{\partial N}{\partial r} + \frac{(1-\mu^2)}{r} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mu} + \Sigma N = S. \quad (3.21)$$

В этом случае аппроксимирующая угловая производная

$$\frac{(1-\mu_m^2) (N_{m+1/2} - N_{m-1/2})}{r\omega_m} \quad (3.22)$$

не приводит к балансным разностным уравнениям: после умножения выражения (3.22) на ω_m и суммирования результата по всем m нуль не получается.

В более общих случаях прямой переход к разностной форме уравнения может оказаться более сложным, но и здесь можно легко определить коэффициенты, аналогичные коэффициентам α . Например, если геометрия криволинейная в двух направлениях, так что $B_{j+1} \neq B_j$, то кроме α вводятся еще добавочные коэффициенты β

$$\beta_{m+1/2} - \beta_{m-1/2} = -\omega_m \eta_m (B_{j+1} - B_j) \quad (3.23)$$

(с $\beta_{1/2} = \beta_{M+1/2} = 0$), сохраняющие свойство балансности.

3.1.5. Определение члена источника. Член источника в уравнении (3.9) включает в себя вклад от внешних источников и источников деления и рассеяния. Внешние объемные источники обозначены выше $Q_{g, s+1/2, m, i+1/2, j+1/2, k+1/2}$ [нейтрон/(см³·сек·стер)]. Опыт показывает, что и внешние поверхностные источники можно представить как объемные в очень малой области. С вычислительной точки зрения трудности проблемы хранения в электронной машине информации о внешних источниках связаны с большим объемом памяти, необходимым для хранения массивов (возможно семимерной размерности).

Источники нейтронов деления предполагаются изотропными по угловой переменной, но имеющими энергетическую зависимость. Поскольку процесс деления предполагается изотропным, плотность нейтронов деления, рожденных в группе g , есть

$$(FN)_g = (v\Sigma_f)_g \bar{N}_g, \quad (3.24)$$

где $(v\Sigma_f)_g$ — сечение деления, умноженное на среднее число вторичных нейтронов на одно деление в группе g , \bar{N}_g — среднегрупповой поток*

$$\bar{N}_g = \sum_{m=1}^M \omega_m N_{gm} \quad (3.25)$$

или, что то же самое, нулевой коэффициент в разложении угловой зависимости потока нейтронов по полиномам Лежандра. Полное количество нейтронов де-

* Заметим теперь, что \bar{N}_g имеет размерность числа нейтронов, умноженных на скорость, в единице объема, так как N_{gm} умножается на угловой вес ω_m .

ления является суммой $(FN)_g$ по всем группам, а источник нейтронов в группе g получается как результат умножения полного количества нейтронов деления на спектр:

$$\begin{aligned} (\text{Источник нейтронов деления})_g &= \\ &= \chi_g \sum_{h=1}^G (FN)_h = \chi_g \sum_{h=1}^G v \Sigma_{f,h} \bar{N}_h = \chi_g F. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Здесь χ_g — доля полного количества нейтронов деления, попадающих в группу g . Более общее выражение для источника нейтронов деления может быть получено, если предположить, что спектр деления зависит от номера энергетической группы, в которой произошло деление, т. е.

$$\begin{aligned} (\text{Источник нейтронов деления})_g &= \\ &= \sum_{h=1}^G \chi_{gh} v \Sigma_{f,h} \bar{N}_h. \end{aligned} \quad (3.27)$$

где χ_{gh} — доля нейтронов, рожденных в группе g вследствие деления в группе h .

Еще более общее предположение, что спектр зависит от состава и структуры области, где происходит деление, т. е. является пространственно зависящей величиной, редко реализуется на практике.

Источник нейтронов от рассеяния представляет собой сумму по всем углам и группам произведений потока нейтронов группы h , имеющих направление m' на сечение перевода таких нейтронов в группу g с изменением направления на m :

$$\begin{aligned} (\text{Источник рассеянных нейтронов})_{gm} &= \\ &= \sum_{h=1}^G \sum_{m'=1}^M \omega_{m'} \Sigma_{s,ghmm'} N_{hm'}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

В пределе это выражение является двойным интегралом по всем направлениям и скоростям от произведения ядра рассеяния нейтронов на угловой поток. В терминах дискретных переменных интегрирование по углам сводится к суммированию по m' с весом $\omega_{m'}$, интегрированию по скоростям соответствует сумма по h , а весовые множители входят в N . Выражение (3.28) справедливо в общем случае анизотропного рассеяния. Но оно имеет некоторые вычислительные недостатки. Сечение перевода $\Sigma_{s,ghmm'}$ является по крайней мере четырехмерным массивом, который может зависеть еще и от пространственной переменной. Выражение (3.28) также требует знания углового распределения по всем точкам, группам и направлениям. Необходимость работы с такими массивами выдвигает проблему хранения и обращения с ними в электронной машине. Информация о полных сечениях перевода не всегда имеется в распоряжении, но во многих случаях она и не нужна. Если число членов в разложении по полиномам Лежандра, описывающем функцию рассеяния

$$\Sigma_s(v' \Omega' \rightarrow v \Omega) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}(v' \rightarrow v) P_l(\Omega' \Omega), \quad (3.29)$$

меньше M , как это обычно бывает, источник рассеяния удобно представлять в виде разложения по сферическим гармоникам в дискретном виде*:

$$\begin{aligned} (\text{Источник рассеянных нейтронов})_{gm} &= \sum_{l=0}^L (2l+1) \times \\ &\times \left\{ \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,igh} \left[P_l(\xi_m) \sum_{m'=1}^M \omega_{m'} P_l(\xi_{m'}) N_{hm'} + \right. \right. \\ &\left. \left. + 2 \sum_{r=1}^l \frac{(l-r)!}{(l+r)!} P_l^r(\xi_m) \sum_{m'=1}^M \omega_{m'} P_l^r(\xi_{m'}) \cos r(\varphi_m - \varphi_{m'}) N_{hm'} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.30)$$

* Выражение (3.30) записано для прямоугольной и цилиндрической геометрии. Для сферической геометрии $\xi_m \rightarrow \mu_m$, $\mu_m \rightarrow \eta_m$, $\eta_m \rightarrow \xi_m$ (см. рис. 3.2).

(множитель 4π включен в ω_m). Символ $\Sigma_{s, lgh}$ обозначает соответствующее среднее от величины $\Sigma_{s, l}(v' \rightarrow v)$ в выражении (3.29), а угол φ определяется следующим образом:

$$\mu_m = (1 - \xi_m^2)^{1/2} \cos \varphi_m; \quad \eta_m = (1 - \xi_m^2)^{1/2} \sin \varphi_m. \quad (3.31)$$

Когда система обладает симметрией, некоторые члены в формуле (3.30) отсутствуют. Член с $l = 0$ в выражении (3.30) имеет вид

$$\sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0gh} \sum_{m'=1}^M \omega_{m'} N_{hm'} = \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0gh} \bar{N}_h, \quad (3.32)$$

а член, отвечающий $l = 1$, после некоторых преобразований можно привести к виду

$$\sum_{h=1}^G 3\Sigma_{s, 1gh} (\mu_m I_h + \eta_m J_h + \xi_m K_h), \quad (3.33)$$

где

$$\left. \begin{aligned} I_h &= \sum_{m=1}^M \omega_m \mu_m N_{hm}, \\ J_h &= \sum_{m=1}^M \omega_m \eta_m N_{hm}, \\ K_h &= \sum_{m=1}^M \omega_m \xi_m N_{hm}. \end{aligned} \right\} \quad (3.34)$$

Следующие члены разложения имеют более сложный вид. Для случая линейной анизотропии рассеяния член источника в уравнении (3.7) записывается как

$$\begin{aligned} S_{gm} &= Q_{gm} + \chi_g \sum_{h=1}^G v \Sigma_{f, h} \bar{N}_h + \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0gh} \bar{N}_h + \\ &+ 3 \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 1gh} (\mu_m I_h + \eta_m J_h + \xi_m K_h). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Много практических задач можно решить, если использовать различные модификации сечения переноса [18]. Однако в некоторых случаях, особенно для расчетов защит, требуется использовать общее выражение (3.30). При расчете прохождения γ -излучения через защиту дифференциальное сечение рассеяния является сложной функцией. При высоких энергиях для корректного расчета вероятности появления вторичных γ -квантов, а также для корректного расчета потока частиц, рассеявшихся на малые углы, требуется учитывать большое число членов в выражении (3.29).

Преимущество использования выражения (3.29) в (3.30) состоит в том, что облегчаются требования расчленения и хранения информации в ЭВМ. Именно, выражение (3.30) можно записать в виде

$$\begin{aligned} (\text{Источник рассеянных нейтронов})_{gm} &= \\ &= \sum_{l=0}^L (2l+1) \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, lgh} \sum_{r=0}^l f_m^{lr} N_h^{lr}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

где N_h^{lr} — момент углового распределения, равный

$$N_h^{lr} = \sum_{m'=1}^M \omega_{m'} f_{m'}^{lr} N_{hm'}. \quad (3.37)$$

Здесь функции f — комбинации полиномов Лежандра с косинусами или синусами. Даже при таком разделенном представлении хранение и обработка информации в ЭВМ являются достаточно сложной проблемой, так как имеется

$(L + 1)$ -двухмерных массивов сечений $\Sigma_{s, lgh}$. Для учета пространственной зависимости вводится предположение, что свойства систем кусочно-постоянны. Массив f_m^{lr} можно представить как двухмерный массив с $(l + 1)$ значениями r для каждого l .

Несмотря на значительность проблемы хранения информации в ЭВМ, в одномерных программах было успешно использовано выражение (3.30) [19, 20] при расчете распространения γ -излучения. Из результатов вычислений с учетом анизотропии рассеяния [18, 21—23] можно заключить, что без потери точности L можно брать достаточно малым (≤ 5), но M должно быть большим, чтобы определить угловое распределение с достаточной точностью. Для двухмерных задач при $L = 2$ проблема хранения информации в ЭВМ с памятью 32 000 слов является почти неразрешимой. Однако с увеличением памяти и скорости счета ЭВМ решение такой задачи станет вполне возможным.

Чтобы использовать (3.30), необходимо иметь таблицы массивов величин $\Sigma_{s, lgh}$. Способы подготовки таких таблиц описаны в работе [23] для нейтронов и в работе [24] для γ -излучения.

§ 3.2. ВЫВОД УРАВНИЙ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ НЕПОСРЕДСТВЕННО ИЗ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ФОРМЫ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Хотя вывод уравнений дискретных ординат носит достаточно общий характер, полезно получить их непосредственно из аналитической формы уравнения переноса. Для этого следует рассмотреть обобщенное представление через моменты потока, включающее как частный случай сферические гармоники и установить эквивалентность моментного представления и представления дискретными ординатами. После установления эквивалентности можно получить важные выводы о структуре уравнений предыдущего параграфа. Обобщенные представления через моменты ценны сами по себе, так как выбор угловых представлений определяется выбором оператора моментов. Именно в представлении с помощью сферических гармоник угловая зависимость потока определяется угловыми моментами потока, а в обобщенной формулировке через моменты выбор углового представления потока свободен. Все существенные особенности этого подхода рассмотрены на примере стационарного односкоростного уравнения переноса в одномерной сферической геометрии.

3.2.1. Обобщенное представление уравнения переноса через моменты потока. Аналитическая форма уравнения переноса в сферической геометрии имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial (r^2 \mu \psi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial [(1 - \mu^2) \psi]}{\partial \mu} + \Sigma \psi(r, \mu) = S(r, \mu). \quad (3.38)$$

Для простоты будем считать внешний источник и источник нейтронов деления S_f изотропными, а рассеяние предположим линейно анизотропным. Тогда член источника запишется следующим образом:

$$S(r, \mu) = S_f(r) + \frac{\nu \Sigma_f + \Sigma_{s,0}}{2} \int_{-1}^{+1} \psi(r, \mu') d\mu' + \\ + \frac{3 \Sigma_{s,1} \mu}{2} \int_{-1}^{+1} \mu' \psi(r, \mu') d\mu' \equiv S_0(r) + 3\mu S_1(r). \quad (3.39)$$

Введем оператор моментов

$$\tilde{M}_m = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \mu^m d\mu \quad (3.40)$$

такой, что $\tilde{M}_m \psi = \psi_m$. Применяв его к уравнению (3.38), получим следующие уравнения для моментов ($m = 0, 1, \dots$):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 \psi_{m+1})}{dr} + \frac{m}{r} (\psi_{m+1} - \psi_{m-1}) + \Sigma \psi_m = \begin{cases} S_0/(m+1) & \text{для четных } m, \\ 3S_1/(m+2) & \text{для нечетных } m. \end{cases} \quad (3.41)$$

Первые n уравнений ($m = 0, 1, \dots, n-1$) можно решить аналитическими или численными методами. Но для этого надо сначала исключить ψ_n из уравнения, соответствующего $m = n-1$, чтобы число уравнений и число неизвестных оказались одинаковыми. Это можно сделать, введя предположение о конкретном представлении $\psi(r, \mu)$ как функции μ . Полагая, что ψ можно задать с помощью n произвольных коэффициентов как функций от пространственной переменной r , и действуя на это представление оператором \tilde{M} , для $m = 0, \dots, n$ получаем $n+1$ соотношения, которые используются, чтобы выразить ψ_n через ψ_m при $m < n$. При этом предположении можно решить уравнения для моментов и затем сконструировать угловое распределение потока нейтронов.

В качестве простого примера рассмотрим случай гомогенной среды с изотропным источником деления и изотропным рассеянием. Тогда $S_1 = 0$ и $S_0 = (v\Sigma_f + \Sigma_{s,0})\psi_0$. Если r измерять в длинах свободного пробега, то первые два уравнения системы (3.41) будут иметь вид

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} (r^2 \psi_1) + \psi_0 &= c\psi_0, \\ \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} (r^2 \psi_2) + \frac{1}{r} (\psi_2 - \psi_0) + \psi_1 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (3.42)$$

где $c = (v\Sigma_f + \Sigma_{s,0})/\Sigma$. Момент ψ_2 исключается, когда представляют $\psi(r, \mu)$ рядом по полиномам с двумя неопределенными коэффициентами

$$\psi(r, \mu) = a_0(r) + a_1(r)\mu. \quad (3.43)$$

Действуя оператором \tilde{M}_m на ψ для $m = 0, 1$ и 2 , можно получить соотношения

$$\psi_0 = a_0(r), \quad 3\psi_1 = a_1(r), \quad 3\psi_2 = a_0(r). \quad (3.44)$$

Последнее уравнение удовлетворяется, если $\psi_2 = \psi_0/3$. Использование этого соотношения в уравнениях (3.42) и исключение ψ_1 дает

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi_0}{dr} \right) + 3(c-1)\psi_0 = 0, \quad (3.45)$$

т. е. известное уравнение диффузионной теории. Решение его совместно с граничными условиями позволяет определить ψ_0 и ψ_1 . Тогда первые два уравнения (3.44) дают выражения для a_0 и a_1 и, следовательно, угловой поток по формуле (3.43).

Эта схема носит общий характер, особенно в отношении выбора представления ψ . Имеются три возможности такого представления:

а) с помощью одного полинома степени не выше $n-1$ во всем угловом интервале $\mu \in [-1, 1]$, т. е. $\psi(r, \mu) = \sum_{m=0}^{n-1} a_m(r)\mu^m$;

б) с помощью двух различных полиномов степени $n/2 - 1$, один из которых используется в интервале $[-1, 0]$, а другой — в $[0, +1]$;

в) с помощью последовательности ступенчатых функций с n различными амплитудами в интервале $[-1, +1]$.

Представление а) является методом сферических гармоник (пример с $n = 2$ был приведен выше); метод б) похож на метод Ивона* (двойной P_n -

* При формировании двойного P_n -метода необходимо ввести δ -функции, чтобы учесть разрывы потока (см. следующий раздел). Это связано с тем, что оператор (3.40) относится ко всему угловому интервалу μ ($-1 < \mu < 1$).

метод), но не эквивалентен ему: он используется как в прямоугольной, так и в криволинейной геометрии. Если в представлении ψ осуществляется разбиение углового интервала, то кроме n амплитуд появляются дополнительные степени свободы, представляющие собой весовые функции для оператора моментов (3.40).

Для задачи, в которой угловой поток нейтронов, влетающих внутрь области, равен нулю, граничные условия Маршака, будучи выраженными через моменты ψ , являются наиболее подходящими. Условия Маршака для нечетных m имеют вид

$$-\int_{-1}^0 d\mu \mu^m \psi(r, \mu) = 0 \quad (r \text{ — на границе}). \quad (3.46)$$

При $m = 0$ это условие соответствует равенству нулю тока втекающих нейтронов. Для представления (3.43) условия Маршака имеют вид $-a_0(r)/2 + a_1(r)/3 = 0$ при $2\psi_1(r) = \psi_0(r)$ на поверхности сферы.

Уравнения моментов можно обобщить, если ввести в оператор либо фиксированную весовую функцию, либо весовую функцию с параметрами, которые можно менять. Однако только в случае единичной весовой функции уравнение моментов при $m = 0$ является балансным. Если используется не единичная весовая функция, то уравнения (3.41) становятся зависящими от коэффициентов представления ψ . Подробное описание обобщенных уравнений для моментов для трех представлений ψ в трех одномерных геометриях приведено в работе [14].

3.2.2. Соответствие уравнений дискретных ординат представлению моментами. Пусть уравнение (3.38) записано для n дискретных значений $\mu = \mu_k$, $k = -n/2, \dots, -1, +1, \dots, n/2$. С учетом выражения для источника (3.39) имеем

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} (r^2 \mu_k \varphi_k) + \frac{1}{r} \sum_{l=-n/2}^{n/2} \beta_{kl} \varphi_l + \Sigma \varphi_k = S_0 + 3\mu_k S_1, \quad (3.47)$$

где $\varphi_k(r) = \psi(r, \mu_k)$ и сумма состоит из производных по μ функции ψ с неизвестными коэффициентами, которые надо определить. Разумное условие эквивалентности моментного и дискретно-ординатного представлений (3.47) состоит в выполнении условия соответствия. Для трех представлений $\psi(r, \mu)$, обсуждавшихся выше, оно может быть записано для четных n в виде

$$\sum_{m=0}^{n/2} C_{2m} \psi_{2m}(r) = 0. \quad (3.48)$$

Но в терминах дискретно-ординатных квадратур момент ψ_m записывается так

$$\psi_m(r) = \sum_{k=-n/2}^{n/2} \omega_k \mu_k^m \varphi_k(r), \quad (3.49)$$

и условие (3.48) после изменения порядка суммирования принимает вид

$$\sum_{k=-n/2}^{n/2} \omega_k \varphi_k \left(\sum_{m=0}^{n/2} C_{2m} \mu_k^{2m} \right) = 0. \quad (3.50)$$

Уравнение (3.50) выполняется, если μ_k — корни (со знаками \pm) полинома $\sum_{m=0}^{n/2} C_{2m} \mu_k^{2m} = 0$. Если используется представление $\psi(r, \mu)$ с помощью одного полинома во всем интервале, то можно показать, что эти корни являются корнями полиномов Лежандра $P_n(\mu)$.

Другое условие эквивалентности состоит в том, что уравнение для моментов (3.41) должно автоматически получаться в результате применения дискрет-

ного оператора моментов к уравнению (3.47) с моментами

$$M_m = \sum_{k=-n/2}^{n/2} \omega_k \mu_k^m, \quad (3.51)$$

определенными по формуле (3.49). После действия оператора M_m правая часть уравнения (3.47) становится эквивалентной правой части уравнения (3.41), если

$$\sum_{k=-n/2}^{n/2} \omega_k \mu_k^{2m} = 1/(2m+1), \quad m = 0, 1, \dots, n/2, \quad (3.52)$$

и левые части совпадают, если

$$m(\psi_{m+1} - \psi_{m-1}) = \sum_{k=-n/2}^{n/2} \omega_k \mu_k^m \sum_{l=-n/2}^{n/2} \beta_{kl} \varphi_l \quad (3.53)$$

или если

$$m \sum_k \varphi_k [\omega_k \mu_k^{m-1} (\mu_k^2 - 1)] = \sum_l \varphi_l \sum_k \omega_k \mu_k^m \beta_{kl}, \quad (3.54)$$

т. е. если для всех l

$$\sum_k \omega_k \mu_k^m \beta_{kl} = -m \omega_l \mu_l^{m-1} (1 - \mu_l^2) \quad (3.55)$$

при $m = 0, 1, \dots, n - 1$. Если уравнения (3.50), (3.52) и (3.55) удовлетворяются, то можно определить дискретно-ординатные квадратурные коэффициенты и тогда уравнения дискретных ординат будут эквивалентны уравнениям для моментов. Для рассмотренных выше представлений $\psi(r, \mu)$ и для четных n уравнение (3.50) определяет μ_k , которые симметричны относительно $\mu = 0$; уравнение (3.52) определяет все веса (одинаковые для симметричных направлений), а уравнение (3.54) определяет коэффициенты кривизны*. Для моментных уравнений сферических гармоник матрица β полная. Это как раз пример сильной угловой корреляции в уравнениях для потока, которая может иметь место в дискретно-ординатных представлениях (см. разд. 3.1.4).

Изложенный выше подход был распространен на одномерную цилиндрическую геометрию путем обобщения оператора моментов с учетом двух угловых переменных. Было обнаружено, что, для того чтобы удовлетворить всем условиям типа (3.48), необходимо наложить некоторые ограничения на квадратурные коэффициенты [14]. Хотя эти ограничения не были полностью исследованы, они кажутся подобными ограничениям, возникающим из свойств симметрии, которые обсуждаются ниже.

§ 3.3. ВЫБОР УГЛОВЫХ КВАДРАТУРНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Пусть направления указываются векторами Ω_m с компонентами (μ_m, η_m, ξ_m) и пусть веса, связанные с Ω_m , отнормированы на единицу так, что поверхность единичной сферы направлений измеряется в единицах 4π . В криволинейных геометриях сохранение нейтронного баланса может гарантироваться следующими условиями:

$$\sum_{m=1}^M \omega_m \mu_m = 0, \quad \sum_{m=1}^M \omega_m \eta_m = 0, \quad \sum_{m=1}^M \omega_m \xi_m = 0. \quad (3.56)$$

* Следует заметить, что моментные уравнения можно сформулировать без использования представления полиномами. Если выбран произвольный квадратурный набор и угловые моменты определены формулой (3.49), то из первых $n/2$ «четных» уравнений [$m = 0, 2, \dots, n-2$ в уравнении (3.49)] можно выразить $(\varphi_k + \varphi_{-k})$ через ψ_m и результаты использовать в уравнении при $m = n$, чтобы получить коэффициенты S_{2m} в соотношении (3.48). Для границы с вакуумом (где $\varphi_{-k} = 0$) из уравнения (3.49) можно выразить φ_k через ψ_m (m четное) и эти результаты затем использовать в уравнениях для нечетных m , чтобы получить граничные условия Маршака.

Существование физической симметрии системы дает дополнительные условия. Например, результаты вычислений в гетерогенном плоском слое должны быть инвариантно относительно геометрической ориентации слоя. Если слой состоит из двух областей, например из замедлителя и поглотителя, и поглотитель находится справа, то в области замедлителя можно использовать более редкую сетку, а в области поглотителя — более частую. Если поглотитель и замедлитель поменять местами, оставив прежней пространственную сетку, то маловероятно, что результаты расчетов не изменятся. При равномерной же сетке разбиения результаты расчетов не должны изменяться. Чтобы решения при геометрических преобразованиях оставались инвариантными, угловая сетка также должна быть инвариантна при геометрических преобразованиях. Именно в приближении дискретных ординат должно сохраняться свойство равновероятности для нейтрона при рассеянии попасть из точки \mathbf{r} в \mathbf{r}' и наоборот, что гарантируется квадратурными коэффициентами, инвариантными при геометрических преобразованиях.

Поясним эти рассуждения на примере трехмерной геометрии. Рассмотрим гомогенный куб. Поворот куба на 90° вокруг оси z эквивалентен повороту системы пространственных координат на 90° , при котором ось μ переводится в ось η . Чтобы выражение для потока не изменилось, нужно, чтобы положительная компонента μ_m была такой же, как положительная компонента η_m . Второй поворот на 90° вокруг оси z показывает, что положительная компонента μ_m должна быть такой же по величине, как отрицательная компонента μ_m , т. е. μ_m должна быть симметричной относительно $\mu = 0$. Другие вращения показывают, что набор ξ_m должен удовлетворять тем же условиям. Таким образом, чтобы сохранить физическую симметрию, набор квадратурных коэффициентов для интегрирования в кубе по угловой переменной должен быть выбран так, чтобы μ_m , η_m и ξ_m были одинаковы и расположены симметрично относительно начала координат. В этом случае соотношения (3.56) будут выполняться. При уменьшении размерности пространства ослабляются некоторые требования симметрии. Например, в двухмерной геометрии для μ_m и η_m следует использовать один и тот же набор, в то время как для ξ_m можно взять иной набор.

При одинаковом распределении направляющих косинусов каждой из осей точки направлений на поверхности единичной сферы лежат на широтах, что очень удобно с вычислительной точки зрения. Типичное полностью симметричное широтное расположение точек показано на рис. 3.3, где вдоль широты ξ меняются только μ и η , и поскольку $\mu^2 + \xi^2 + \eta^2 = 1$, то независимой переменной является только одна переменная.

В разбиении, приведенном на рис. 3.3, на поверхности единичной сферы расположено $n(n+2)$ точек ($n = 2, 4, 6, \dots$). (Именно это n имеют в виду, когда говорят о порядке S_n -метода дискретных ординат.) Как уже указывалось, n связано с набором симметрично расположенных точек, а не с набором квадратурных коэффициентов. Хотя такие наборы удовлетворяют ограничивающим условиям, некоторые степени свободы все же остаются и можно в каждом конкретном случае наложить дополнительные условия.

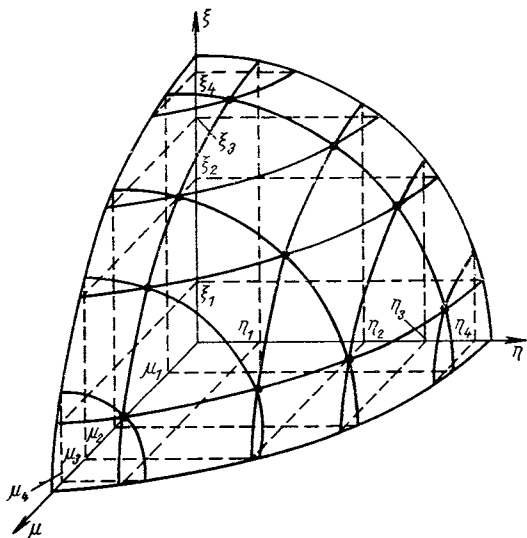


Рис. 3.3. Полностью симметричное расположение точек ($n = 8$).

Если полная симметрия не требуется, то широтное расположение точек на единичной сфере направлений может быть более произвольным. Например, в одномерной цилиндрической геометрии точки можно располагать только по ξ -широтам, как показано на рис. 3.4.

Если геометрия не трехмерная, то наличие полного числа точек во всем диапазоне изменения угловых переменных не является обязательным, даже если сохраняется полная симметрия. Например, в двухмерной (x, y) -геометрии поток симметричен относительно ξ и нужна только половина ξ -диапазона, скажем, верхняя полусфера. В одномерной цилиндрической геометрии поток симметричен по ξ и η и тогда необходим только один квадрант, содержащий полный диапазон изменения μ . В общем случае количество точек, необходимое для полностью симметричной сетки, есть

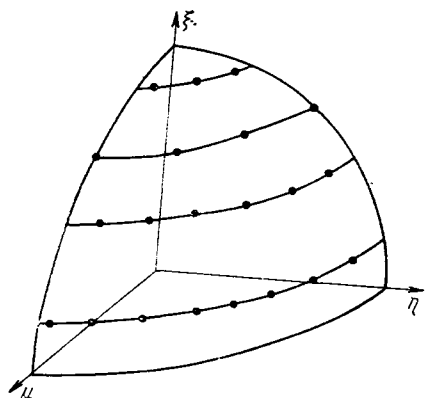
$$M = 2^d n(n+2)/8, \quad (3.57)$$

где d — геометрическая размерность. В одномерных пластинах и сферах поток не зависит от ξ и η и тогда необходимо только $M = n$ величин μ .

Для полностью симметричного широтного расположения точек и n направлений требование

$$\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1 \quad (3.58)$$

Рис. 3.4. Широтное расположение точек.



превращается в

$$\mu_i^2 + \mu_j^2 + \mu_{n/2+2-i-j}^2 = 1. \quad (3.59)$$

Здесь индексы относятся к координатам Ω_m ; $i = 1, 2, 3, \dots, n/2$; $j = 1, 2, 3, \dots, n/2 - i + 1$. Корреляция между индексами i и j и индексом m (указывающим количество точек на единичной сфере) может быть задана наиболее удобным образом. Например, при $n = 8$ (см. рис. 3.3) точка $m = 1$ может быть выбрана так, чтобы иметь координаты $\mu = \mu_1$, $\eta = \mu_1$ и $\xi = \mu_4$. Уравнение (3.59) тогда будет иметь вид $2\mu_1^2 + \mu_4^2 = 1$.

Решение уравнения (3.59) в общем случае можно записать в виде

$$\left. \begin{aligned} \mu_i^2 &= \mu_1^2 + (i-1) \Delta, \quad i = 1, 2, \dots, n/2, \\ \Delta &= 2(1 - 3\mu_1^2)/(n-2), \end{aligned} \right\} \quad (3.60)$$

что проверяется прямой подстановкой. Уравнение (3.60) показывает, как сильно влияние полной симметрии (только один направляющий косинус является независимым). Выбор μ_1 задает распределение направляющих косинусов осей. Для малых μ_1^2 косинусы сгруппированы у концов интервала $[0, 1]$. При больших μ_1^2 ($\leq \frac{1}{3}$) косинусы группируются около середины интервала.

Симметрия также накладывает ограничения на количество независимых точечных весов, которые должны быть инвариантны при геометрических преобразованиях. Можно показать [11], что квадратурные наборы, удовлетворяющие уравнению (3.60) с количеством независимых точечных весов, ограниченным $n/2 - 1$, также удовлетворяют соотношению

$$\sum_{m=1}^M w_m \mu_m^2 = 1/3. \quad (3.61)$$

Симметричные наборы для интегрирования четных степеней μ приведены в работе [16]. Для $n > 22$ появляются отрицательные веса, но такие большие величины n редко требуются.

Если полная симметрия не обязательна, многие из вышеупомянутых ограничений могут быть сняты. В частности, в одномерных плоских слоях и сфе-

рах интегрирование сводится к квадратуре по интервалу $[-1, 1]$, для которого можно с успехом использовать квадратурные наборы Гаусса. В этих случаях поток не зависит от η и ξ , так что для данного μ можно собрать все точечные веса и образовать «уровневые» веса — обычные веса для интегрирования вдоль линии. Квадратура Гаусса—Лежандра на интервале $[-1, +1]$ является известной P_{n-1} -системой квадратур дискретных ординат*.

Нужно подчеркнуть, что не существует оптимального типа квадратуры для всех случаев. Даже в гомогенном плоском слое $DP_{n/2-1}$ -квадратура, будучи весьма точной при малой толщине слоя, менее точна, чем P_{n-1} квадратура в очень толстых слоях. Это связано с тем, что в тонких пластинах важно правильное угловое представление вытекающего потока, который лучше описывается $DP_{n/2-1}$ -квадратурой, допускающей разрывное представление полиномами в каждой половине диапазона интегрирования. В толстых пластинах самую большую вероятность вылететь наружу имеют нейтроны, летящие в направлении $\mu = +1$, а квадратурные P_{n-1} -наборы имеют направляющие косинусы, близкие к $\mu = +1$ (и, следовательно, более точны, чем $DP_{n/2-1}$ -наборы того же порядка). Поскольку не существует общего оптимального квадратурного набора, то полностью симметричные наборы считаются более предпочтительными, а для отдельных задач, где это необходимо, используются специальные наборы.

Полностью симметричный набор предпочтителен, если анизотропное рассеяние аппроксимируется разложением в ряд по полиномам Лежандра, так что полиномы могут быть корректно проинтегрированы. Именно, если поток изотропен, то все моменты, кроме нулевого, должны обратиться в нуль и квадратурные наборы, интегрирующие полиномы, гарантируют выполнение этого.

Как показывает опыт, ошибки, возникающие в пространственной и угловой квадратурах, взаимозависимы. Качественно можно представить себе, что поверхность ошибок подобна долине между двумя хребтами. При неизменной пространственной сетке измельчение угловой сетки может существенно увеличить ошибку, и наоборот.

Эти качественные рассуждения иллюстрируются результатами расчетов, приведенными в табл. 3.3, где даны собственные значения в зависимости от

Таблица 3.3

Параметр k как функция порядка угловой квадратуры и числа пространственных интервалов ($k=1,0$ в критическом состоянии)

| Число пространственных интервалов | Порядок угловой квадратуры n | | | | | | |
|-----------------------------------|--------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | 4 | 8 | 12 | 16 | 24 | 32 | 48 |
| 10 | 1,00506 | 0,998564 | 0,997223 | 0,996722 | 0,996347 | 0,996212 | 0,996113 |
| 20 | 1,00514 | 0,998564 | 0,997204 | 0,996695 | 0,996316 | 0,996179 | 0,996079 |
| 40 | 1,00514 | 0,998554 | 0,997189 | 0,996679 | 0,996298 | 0,996161 | 0,996060 |
| 80 | 1,00515 | 0,998550 | 0,997185 | 0,996674 | 0,996293 | 0,996155 | 0,996055 |
| 160 | 1,00515 | 0,998549 | 0,997184 | 0,996673 | 0,996292 | 0,996154 | 0,996054 |

порядка угловой квадратуры и количества (равномерно расположенных) пространственных интервалов. Экспериментальная критическая сборка представляла собой гомогенную сферу радиусом 8,7 см, содержащую изотопы: U^{235} , U^{238} и U^{234} , концентрации которых были равны $0,04511 \cdot 10^{24}$, $0,00245 \cdot 10^{24}$ и $0,00045 \cdot 10^{24}$ соответственно. Для анализа использовались шестигрупповые сечения Хансена—Роаха [35]. Наличие U^{234} в расчетах не учитывалось, а расчет производился для концентраций U^{235} и U^{238} , равных $0,045447 \cdot 10^{24}$ и $0,00256 \cdot 10^{24}$ соответственно. Использовались квадратурные коэффициенты Гаусса—Лежандра (P_{n-1}) [26].

* Вспомним, однако, что формулировка в дискретных ординатах в разд. 3.1.4 не эквивалентна в криволинейных геометриях формулировке в сферических гармониках (см. разд. 3.2.2), если не используются одинаковые квадратурные коэффициенты и не введено специально понятие «криволинейных потоков».

§ 3.4. ПРИБЛИЖЕНИЯ И УПРОЩЕНИЯ

В некоторых задачах не требуется точное решение уравнений (3.9) и (3.12), записанных в общей форме. Ниже описываются методы, которые могут быть использованы для упрощения уравнений и уменьшения вычислительного времени на их решение.

В разд. 3.4.1 из дискретно-ординатной формы уравнения переноса выводится P_1 -приближение. Это приближение приводит к существенному упрощению транспортного уравнения и, кроме того, упрощает численное решение его. P_1 -приближение в случаях, когда рассеяние и источники нейтронов изотропны, эквивалентно так называемой «обычной» диффузионной теории [27]. Заметим, что в дискретно-ординатной форме уравнения определенные параметры (например, коэффициент диффузии и граничные условия) зависят от выбора угловых квадратурных коэффициентов.

В разд. 3.4.2 выводится выражение лапласианной поправки на утечку к полному сечению взаимодействия при понижении размерности уравнения.

В разд. 3.4.3 описаны упрощения, уменьшающие расчетные трудности получения члена источника, и даются рецепты для сохранения устойчивости численного счета в тех случаях, когда полный источник или полные сечения оказываются отрицательными. Конечно, использование того или иного упрощения должно основываться на полном понимании проблемы.

3.4.1. Диффузионное приближение. Диффузионное представление уравнения переноса нейтронов получается, если в уравнении (3.9) положить $n = 2$ и ввести предположение о том, что N_m является линейной функцией направляющих косинусов, т. е.

$$N_m = \bar{N} + 3\mu_m I + 3\eta_m J + 3\xi_m K. \quad (3.62)$$

При $n = 2$ существует восемь направлений, соответствующих двум величинам каждого из направляющих косинусов. После умножения выражения (3.62) на ω_m и суммирования результата по m слева получается \bar{N} , определенное уравнением (3.32). Справа будет \bar{N} только в том случае, если каждый вес равен $1/8$ и если оба направляющих косинуса равны друг другу по величине и противоположны по знаку. После умножения уравнения (3.62) на $\omega_m \mu_m$ и суммирования результата по m слева получается величина I , введенная в выражении (3.34), а справа I получится только тогда, когда $\mu^2 = 1/3$. Это значит, что должны удовлетворяться уравнение (3.61), иногда называемое условием диффузионного приближения. Величины η^2 и ξ^2 также должны быть равны $1/3$. Все эти условия удовлетворяются при полностью симметричном пространственном разбиении.

Сведение уравнения (3.9) к системе диффузионных уравнений производится по такой же схеме, как в аналитической теории. Заметим, однако, что преобразование членов, связанных с кривизной геометрии, требует дополнительных предположений. Проиллюстрируем это для уравнения (3.9), записанного для геометрии, криволинейной в i -направлении:

$$\begin{aligned} (N_{s+1} - N_s) V / \nu \Delta t + \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \eta (B_{j+1} N_{j+1} - B_j N_j) + \\ + \xi (C_{k+1} N_{k+1} - C_k N_k) + (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \\ - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) / \omega_m + \Sigma N V = S V. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Умножая эти уравнения на ω_m и суммируя результат по m , получаем для любого n уравнение баланса нейтронов

$$\begin{aligned} (\bar{N}_{s+1} - \bar{N}_s) V / \nu \Delta t + A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + B_{j+1} J_{j+1} - \\ - B_j J_j + C_{k+1} K_{k+1} - C_k K_k + \Sigma \bar{N} V = \bar{S} V, \end{aligned} \quad (3.64)$$

где \bar{S} — изотропная компонента источника $\bar{S} = \Sigma \omega_m S_m$. Следующий шаг — получение уравнения для токов в i -направлении путем умножения уравнения

(3.63) на $w_m \mu_m$ и суммирования результата по m . Схема становится яснее, если определить восемь направлений:

$$\left. \begin{aligned} N_1 &= \bar{N} - \sqrt{3}I - \sqrt{3}J - \sqrt{3}K, \\ N_2 &= \bar{N} + \sqrt{3}I - \sqrt{3}J - \sqrt{3}K, \\ N_3 &= \bar{N} - \sqrt{3}I + \sqrt{3}J - \sqrt{3}K, \\ N_4 &= \bar{N} + \sqrt{3}I + \sqrt{3}J - \sqrt{3}K, \\ N_5 &= \bar{N} - \sqrt{3}I - \sqrt{3}J + \sqrt{3}K, \\ N_6 &= \bar{N} + \sqrt{3}I - \sqrt{3}J + \sqrt{3}K, \\ N_7 &= \bar{N} - \sqrt{3}I + \sqrt{3}J + \sqrt{3}K, \\ N_8 &= \bar{N} + \sqrt{3}I + \sqrt{3}J + \sqrt{3}K. \end{aligned} \right\} \quad (3.65)$$

Тогда сумма первых членов уравнения (3.63) с множителями $w_m \mu_m$ приводит к разности токов I во времени. Так как каждое $\mu^2 = 1/3$, то сумма членов, включающих μ , дает пространственную производную от среднего потока, а члены, содержащие η и ξ , исчезают, что можно видеть из соотношения (3.65). Результирующее уравнение для тока принимает вид

$$(I_{s+1} - I_s) V/v\Delta t + (A_{i+1} \bar{N}_{i+1} - A_i \bar{N}_i)/3 + \sum_{m=1}^8 \mu_m (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) + \Sigma IV = S_I V, \quad (3.66)$$

где $S_I = \Sigma w_m \mu_m S_m$. Из соотношений (3.65) и определения α [формула (3.13)] следует, что α будут отличны от нуля только для $m = 1, 3, 5$ и 7 . Для всех этих m , μ_m одинаковы, т. е. все α , отличные от нуля, равны. Тогда

$$\sum_{m=1}^8 \mu_m (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) = \frac{A_i - A_{i+1}}{3} \sum_{1, 3, 5, 7} 2w_m N_{m+1/2}. \quad (3.67)$$

В предположении линейной зависимости N_m от направляющих косинусов и выполнения уравнения (3.62) $N_{m+1/2} = (N_{m+3/2} + N_{m-1/2})/2$ или, что то же самое, $2N_{m+1/2} = (N_{m-1/2} + N_{m+1/2})/2 + (N_{m+1/2} + N_{m+3/2})/2$, т. е.

$$\sum_{1, 3, 5, 7} w_m 2N_{m+1/2} = \sum_{m=1}^8 w_m (N_{m-1/2} + N_{m+1/2})/2. \quad (3.68)$$

Если коэффициенты при членах правой части уравнения (3.62) непрерывны, среднее значение углового потока равно среднему от пространственного потока, т. е. $(N_{i+1} + N_i)/2 = (N_{m-1/2} + N_{m+1/2})/2$. В этом предположении выражение (3.68) принимает вид $1/2 (\bar{N}_{i+1} + \bar{N}_i)$. Будучи умножено на $(A_i - A_{i+1})/3$, оно может быть объединено с подобным членом уравнения (3.66), в результате чего получится уравнение для тока

$$(I_{s+1} - I_s) V/v\Delta t + A (\bar{N}_{i+1} - \bar{N}_i)/6 + \Sigma IV = S_I V, \quad (3.69)$$

где $A = A_{i+1} + A_i$. Если кривизна отсутствует, уравнение (3.66) не содержит члена с α , $A_i = A_{i+1}$, так что уравнения (3.66) и (3.69) согласованы. Два дополнительных уравнения для токов, которые получаются умножением уравнения (3.63) на $w_m \eta_m$ или $w_m \xi_m$ и суммированием результата по m , имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} (J_{s+1} - J_s) V/v\Delta t + B (\bar{N}_{j+1} - \bar{N}_j)/6 + \Sigma JV = S_J V, \\ (K_{s+1} - K_s) V/v\Delta t + C (\bar{N}_{k+1} - \bar{N}_k)/6 + \Sigma KV = S_K V. \end{aligned} \right\} \quad (3.70)$$

Здесь $B = B_{j+1} + B_j$ и $C = C_{k+1} + C_k$, чем учитывается возможность кривизны в этих направлениях.

Уравнения (3.64), (3.69) и (3.70) являются дискретным аналогом P_1 -приближения. В пределах малых интервалов они принимают аналитическую форму. Заметим, что в общем случае решение S_2 -уравнений не удовлетворяет уравнению (3.62) и, следовательно, оно не эквивалентно решению диффузионных уравнений. Однако S_2 -уравнения можно так модифицировать, что указанные решения совпадут. Эта модификация состоит во введении анизотропно-го источника [28].

В приведенном выше примере для получения диффузионных уравнений понадобились только четыре линейные комбинации восьми S_2 -уравнений. Можно образовать совместную систему восьми линейных комбинаций S_2 -уравнений, которые включают восемь угловых моментов потока и содержат больше информации, чем диффузионные уравнения. В общем случае геометрической размерности d диффузионная аппроксимация превращает 2^d S_2 -уравнений в $d + 1$ уравнение. Таким образом, для $d > 1$ можно ожидать, что точность диффузионного приближения будет хуже точности S_2 -уравнений. Аналитические результаты [28] для $d = 2$ и численные расчеты указывают на справедливость этой гипотезы; различие между результатами обоих приближений весьма близко к погрешности самого диффузионного приближения и уменьшается по мере того, как поток становится все более и более изотропным. Существуют ситуации, когда потоки диффузионной теории более гладкие, чем потоки в S_2 -приближении. Это характерно для сильно поглощающей среды. Но ни диффузионная теория, ни S_2 -приближение в этом случае не точны.

Хотя при решении диффузионных уравнений точность ниже, но итерационные схемы оказываются более простыми. Например, отсутствует итерационный цикл, связанный с рассеянием внутри группы.

3.4.2. Уменьшение размерности. Уравнение (3.9) можно свести к стационарному уравнению, если предположить, что ϕ является непрерывной функцией времени и что $N_{s+1/2} = (N_{s+1} + N_s)/2$. Используя последнее соотношение для исключения N_{s+1} из уравнения (3.9) и приравнявая $N_{s+1/2}$ к N_s , получаем

$$\mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) \dots (\Sigma + 2/v\Delta t) NV = SV + 2N_s V/v\Delta t. \quad (3.71)$$

Источник нейтронов, попадающих во временной интервал после предыдущего шага по времени, равен $2N_s/v\Delta t$. Если величина N_s известна или из начальных условий или из расчета на предыдущем временном интервале, уравнение (3.71) может быть решено для $N_{s+1/2}$. Тогда величина $N_{s+1} = 2N_{s+1/2} - N_s$ будет исходной для следующего временного интервала.

Если временная зависимость всех потоков и источников такова, что их можно аппроксимировать выражениями $N = \tilde{N}f(t)$ и $S = \tilde{S}f(t)$, где \tilde{N} и \tilde{S} не зависят от времени, то временная зависимость может быть исключена. В пределе малых интервалов

$$(N_{s+1} - N_s)/v\Delta t \rightarrow \frac{\tilde{N}}{v} \cdot \frac{df}{dt} = \frac{\tilde{N}f}{v} \cdot \frac{d(\ln f)}{dt}. \quad (3.72)$$

Если $f = e^{\lambda t}$, уравнение (3.9) принимает вид (после деления всех членов на f)

$$\mu (A_{i+1} \tilde{N}_{i+1} - A_i \tilde{N}_i) \dots \left(\Sigma + \frac{\lambda}{v} \right) \tilde{N}V = \tilde{S}V. \quad (3.73)$$

Величина λ/v — «временное» поглощение — появляется как поправка к Σ и часто рассматривается как неявное собственное значение.

Возможно также и исключение пространственных переменных. Пусть, например, в прямоугольной геометрии зависимость потока от y такова, что диффузионное решение является точным. Если \tilde{N} не зависит от времени и поток удовлетворяет нулевому граничному условию при $y = \pm b$, то решение имеет вид $\tilde{N} = \hat{N} \cos(\pi y/2b)$. Рассматривая для удобства стационарную зада-

чу с изотропным источником, можно использовать уравнение (3.70), чтобы определить J :

$$J = -B(\bar{N}_{j+1} - \bar{N}_j)/6V\Sigma = -(\bar{N}_{j+1} - \bar{N}_j)/3\Sigma\Delta y = \\ = -\hat{N} \{ \cos[\pi(y + \Delta y)/2b] - \cos(\pi y/2b) \} / 3\Sigma\Delta y.$$

В пределе малых Δy

$$J = \hat{N} \pi \sin(\pi y/2b)/6\Sigma b. \quad (3.74)$$

Это соотношение можно использовать, чтобы исключить J из уравнения баланса (3.64), так как

$$\lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{B_{j+1} J_{j+1} - B_j J_j}{V} = \hat{N} \Sigma (\pi/2b\Sigma)^2 \cos(\pi y/2b)/3. \quad (3.75)$$

Наконец, если \bar{S} в уравнении (3.64) равно $\hat{S} \cos(\pi y/2b)$ и I и K аппроксимируются аналогичным образом, уравнение (3.64) принимает вид

$$A_{i+1} \hat{I}_{i+1} - A_i \hat{I}_i \dots \Sigma \left[1 + \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{2b\Sigma} \right)^2 \right] \hat{N} V = \hat{S} V. \quad (3.76)$$

В этом случае уравнение (3.76) является двухмерным уравнением с поправкой полного сечения на утечку по оси y . Такая же коррекция может быть осуществлена и для x - и z -направлений в уравнении (3.9). Если толщина по оси x равна $2a$, эффективное полное сечение имеет вид

$$\Sigma [1 + (\pi/2b\Sigma)^2/3 + (\pi/2a\Sigma)^2/3]. \quad (3.77)$$

Эта коррекция может быть выполнена в предположении, что b равно действительному размеру, или с учетом длины экстраполяции в предположении, что $b = t + \delta$, $\delta = 2/3\Sigma$ [в уравнении (3.9) можно использовать $\delta = 0,71045/\Sigma$].

Исключение зависимости от y из всех членов уравнения было случайным.

Если бы была использована зависимость $\bar{N} = \hat{N} [1 - (y/b)^2]$, то производные в уравнениях (3.74) и (3.75) были бы равны $2\hat{N}/3\Sigma b^2$, т. е. не содержали бы \bar{N} . В этом случае можно выполнить усреднение по y . Для квадратичной зависимости $\bar{N} = \hat{N} [1 - (y/b)^2]$ эта операция дает

$$\int_{-b}^b (2\hat{N}/3\Sigma b^2) dy \left| \int_{-b}^b \hat{N} [1 - (y/b)^2] dy = 1/\Sigma b^2. \quad (3.78)$$

Тогда поправленное сечение будет иметь вид $\Sigma [1 + 1/(\Sigma b)^2]$.

3.4.3. Упрощения выражения для источника. Практически все упрощения в члене источника включают дополнительные приближения. С вычислительной точки зрения наиболее полезны те упрощения, которые уменьшают сложность учета анизотропного рассеяния. Часто выражение (3.30) просто обрывается после члена с $l = 0$. Некоторые эффекты анизотропного рассеяния могут быть включены в качестве поправки к изотропному рассеянию, например путем перехода к транспортному приближению. Для внутригруппового рассеяния в этом приближении $\Sigma_{s,igg}$ вычитается из $\Sigma_{s,g}$ и $\Sigma_{s,0gg}$ а для описания рассеяния из группы в группу возможны различные подходы [29]. С включением всех эффектов рассеяния в сечение изотропного рассеяния исчезают все суммы в выражении (3.30) и отпадает необходимость расчета временного изменения моментов потока.

Чтобы увеличить устойчивость итерационного процесса или ускорить сходимость, иногда полезно переносить отдельные члены в правую часть уравнения, где расположен источник нейтронов. При введении лапласианной поправки на утечку в полное сечение в зависимости от знака этой поправки результирующее «сечение» может оказаться отрицательным, а в сложной задаче эта поправка действительно может оказаться отрицательной. В этом случае отри-

цательная поправка, скажем, Σ^*NV может быть перенесена к члену источника, затем угловое распределение аппроксимировано выражением $N \sim \bar{N} + 3\mu I + 3\eta J + 3\xi K$. Если требуется, учитывают поправки более высокого порядка на анизотропию. Этот прием можно использовать для получения модифицированной транспортной теории, вычитая $V\Sigma_{s,0gg}N$ из левой части уравнения (т. е. заменяя член $V\Sigma N$ на $V\Sigma_a N$) и $V\Sigma_{s,0gg}(\bar{N} + 3\mu I + 3\eta J + 3\xi K)$ из правой части. Как станет понятно позже, эта аппроксимация имеет определенные преимущества при численном решении, так как исключается из члена источника в уравнении (3.12) изотропная компонента $V\Sigma_{s,0gg}\bar{N}_g$ внутригруппового рассеяния [см. уравнение (3.35)]. Возможны также и обратные переносы.

Наконец, если средняя потеря энергии при одном соударении мала по сравнению с шириной группы, можно использовать приближение типа возрастного, учитывая в члене источника вклад от соударений только из соседних групп.

§ 3.5. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ

Уравнение (3.9), записанное в криволинейной геометрии, является общей формой уравнения переноса нейтронов. Одни методы решения этого уравнения, описанные ниже, базируются на физических и математических принципах, другие выбираются из соображений простоты в ущерб некоторой точности. Если читателю покажется, что такая точка зрения не соответствует уровню сегодняшнего дня, то следует вспомнить, что до середины 1967 г. не было попыток решать трехмерное уравнение переноса и что двухмерные стационарные задачи требуют обычно около часа машинного времени на самых быстродействующих ЭВМ*.

Уравнение (3.9) в криволинейной геометрии содержит 11 величин потоков

$$(N_{s+1} - N_s) V/v\Delta t + \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \eta (B_{j+1} N_{j+1} - B_j N_j) + \xi (C_{k+1} N_{k+1} - C_k N_k) + (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2})/\omega_m + \Sigma NV = SV, \quad (3.63)$$

только пять из которых можно предположить известными из расчетов соседних ячеек, уже обчисленных направлений или предыдущих временных шагов. Дополнительные уравнения для потоков, необходимые для решения уравнения (3.63), даются разностными соотношениями.

В разд. 3.5.1 рассмотрены две простые разностные схемы. Эти элементарные разностные схемы соответствуют предположению, что если интервалы достаточно малы, то соответствующая функция распределения с хорошей точностью описывается ступенчатой функцией или функцией, линейной по всем переменным. В разд. 3.5.2 описываются общие методы вывода разностных соотношений для потоков из интегральной формы уравнения переноса и оценки получаемых решений. Упрощения, которые можно реализовать для одномерных геометрий при использовании процесса обращения матриц для оценки решения, рассматриваются в разд. 3.5.3. Здесь же выводится устойчивый безытерационный рекуррентный метод решения диффузионных уравнений. Рассматриваются ограничения, связанные с процессом обращения матриц и с безытерационными методами.

В разд. 3.5.4 описан метод решения уравнения переноса, в котором для ускорения итерационного процесса используется решение диффузионного приближения. Достоинство метода состоит в том, что он может быть использован в схеме решения, изложенной в разд. 3.5.1. Кроме того, он открывает путь к более простому и быстрому процессу итераций общих уравнений дискретных ординат.

* Заметим, что даже очень сложные одномерные задачи требуют только несколько минут машинного времени.

3.5.1. Элементарные разностные методы. Разностные схемы анализа обес­печивают особенно простые соотношения между потоками. В предположении одной лишь непрерывности $N_g(\mathbf{r}, \Omega)$ эти соотношения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} N_{s+1} + N_s &= N_{i+1} + N_i = N_{j+1} + N_j = N_{k+1} + N_k = \\ &= N_{m+1/2} + N_{m-1/2} = 2N. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Такая запись означает просто, что арифметическое среднее от средних на поверхности ячейки есть среднее от N_g по всей ячейке. Эти соотношения приводят к простому рекуррентному соотношению для N и в целом обеспечивают хорошую точность при умеренных расчетных затратах.

Если предполагается, что N_i, N_j, N_k, N_s и $N_{m-1/2}$ известны, и если вычисление проводится в направлении положительных косинусов, возрастания времени и в порядке возрастания индекса пространственных точек, то уравнение (3.79) используется для исключения $N_{i+1}, N_{j+1}, N_{k+1}, N_{s+1}$ и $N_{m+1/2}$ из уравнения (3.63), которое и решается относительно N . Простая подстановка дает

$$N = \frac{\mu AN_i + \eta BN_j + \xi CN_k + \alpha N_{m-1/2}/\omega + \tilde{\Sigma}VN_s + SV}{2\mu A_{i+1} + 2\eta B_{j+1} + 2\xi C_{k+1} + 2\alpha_{m+1/2}/\omega + \tilde{\Sigma}V + \Sigma V}, \quad (3.80)$$

где $A = A_{i+1} + A_i, B = B_{j+1} + B_j, C = C_{k+1} + C_k, \alpha = \alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2}$ и $\tilde{\Sigma} = 2/v\Delta t$. Если кривизна в j - и k -направлениях отсутствует, то $2B_{j+1} = B$ и $2C_{k+1} = C$. Используя уравнение (3.13), можно записать

$$2\alpha_{m+1/2}/\omega = (\alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2})/\omega - \mu(A_{i+1} - A_i), \quad (3.81)$$

что позволяет привести уравнение (3.80) к виду

$$N = \frac{\mu AN_i + \eta BN_j + \xi CN_k + \alpha N_{m-1/2}/\omega + \tilde{\Sigma}VN_s + SV}{\mu A + \eta B + \xi C + \alpha/\omega + \tilde{\Sigma}V + \Sigma V}. \quad (3.82)$$

Уравнение (3.82) имеет достаточно общий характер, за исключением дополнительных членов, связанных с кривизной, которые при необходимости можно добавить. С вычислительной точки зрения уравнение (3.82) является удобным, так как многие коэффициенты фигурируют в нем дважды. Разделив каждый член числителя и знаменателя на V и учтя, что α пропорционально элементу площади в i -м направлении, получим еще более простое уравнение.

Из уравнения (3.82) определяют N , а остальные неизвестные находят из уравнения (3.79). Полученные потоки затем используют как входные данные при об­счете на основе рекуррентных соотношений следующей пространственно-временной ячейки. А так как S зависит от N , требуется итерационный процесс. Для сохранения точности расчета нужно, чтобы по мере перехода от одной ячейки к другой знаменатель в (3.82) не становился близким или равным нулю. Способ, исключающий возникновение этой ситуации, описан в § 3.6.

Если выполняется расчет потоков в отрицательном ξ -направлении, соответствующее рекуррентное уравнение для N получается заменой ξ на $-\xi$ и N_k на N_{k+1} . Аналогичная замена делается для отрицательного η -направления, а если оба направления отрицательны, то делаются обе замены и т. д. для всех комбинаций направляющих косинусов. Эти замены являются просто результатом использования уравнения (3.79) в уравнении (3.63) при нахождении N . Заметим, что в криволинейных геометриях помимо знания граничных и начальных условий для расчета требуется знание еще некоторых начальных величин $N_{m-1/2}$. Их находят на основе анализа уравнения (3.63) для тех направлений, для которых нет углового перераспределения. Например, в одномерной сферической геометрии в направлении с $\mu = -1$ угловая производная равна нулю [см. (3.38)]. Поэтому оно очень удобно для начала расчета с внешней поверхности сферы. В других криволинейных геометриях (см. табл. 3.1) нужны некоторые начальные направления. При расположении углов, показанном на рис. 3.2, эти направления соответствуют $\eta = 0, \tilde{\mu}_i =$

$= (1 - \xi_i^2)^{1/2}$, $i = 1, 2, \dots, n/2$. Чтобы эти специальные направления не влияли на свойства симметрии квадратурных наборов, им приписывается нулевой вес. Для этих направлений $N_{m+1/2} = N_{m-1/2}$. Из разностных соотношений «схемы алмаза» следует $N_{m+1/2} = (N_i + N_{i+1})/2$. Для этих направлений также $\alpha_{m-1/2} = 0$. Уравнение (3.13) дает

$$\alpha_{m+1/2}/\omega_m = -\mu_m (A_{i+1} - A_i). \quad (3.83)$$

Таким образом, для этих специальных направлений член кривизны имеет вид

$$\begin{aligned} & (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2})/\omega_m = \\ & = \mu_m (A_i - A_{i+1}) (N_{i+1} + N_i)/2, \end{aligned} \quad (3.84)$$

который, будучи объединен с подобным членом уравнения (3.63), дает

$$\begin{aligned} & (N_{s+1} - N_s) V/\nu \Delta t + \mu A (N_{i+1} - N_i)/2 + \eta (B_{j+1} N_{j+1} - B_j N_j) + \\ & + \xi (C_{k+1} N_{k+1} - C_k N_k) + \Sigma NV = SV. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Рекуррентное соотношение для N , полученное из этого уравнения, отличается от соотношения (3.82) только отсутствием членов с α . Следовательно, на практике уравнение (3.82) используется во всех случаях с нулевыми α для специальных направлений.

Специальное начальное рекуррентное соотношение может быть заменено менее точными разностными соотношениями. Относительно грубое* описание ступенчатыми функциями предполагает, что N — константа в пределах ячейки. Иными словами, неизвестные граничные значения N предполагаются равными среднему потоку по ячейке. Для положительных μ , η и ξ эти соотношения следующие:

$$N = N_{i+1} = N_{j+1} = N_{k+1} = N_{s+1} = N_{m+1/2}. \quad (3.86)$$

Подставляя их в уравнение (3.63), получаем

$$N_{i+1} = \frac{\mu A_i N_i + \eta B_j N_j + \xi C_k N_k + \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} / \omega_m + V N_s / \nu \Delta t + V S}{\mu A_{i+1} + \eta B_{j+1} + \xi C_{k+1} + \alpha_{m+1/2} / \omega_m + V / \nu \Delta t + V \Sigma}. \quad (3.87)$$

Так как для начальных направлений в криволинейных геометриях $\alpha_{m-1/2} = 0$, это рекуррентное соотношение справедливо для всех геометрий. Так же как в случае разностной схемы алмаза, хорошая точность решения уравнений (3.87) обеспечивает то, что члены числителя и знаменателя остаются положительными и, следовательно, нежелательная компенсация не будет иметь места**.

Уравнения (3.82) и (3.87) характеризуются тем, что их члены соответствуют величинам, которые по своему физическому смыслу положительны. Если разностная схема алмаза используется для расчета N_{i+1} , как было первоначально сделано, это ценное свойство теряется. В числителе появились отрицательные члены, что привело к осцилляциям потока и к некорректной оценке эффективности разностного метода схемы алмаза (см. работу [12], стр. 20 и 36). Однако было найдено, что уравнение (3.82) и надежно и точно. В общем, эта точность и простота оправдали его использование в предпочтении ступенчатому рекуррентному соотношению.

3.5.2. Более общие разностные соотношения. Можно использовать различные комбинации ступенчатых схем и разностных схем алмаза или использовать взвешенные соотношения схемы алмаза, например $a N_{i+1} + (1 - a) N_i =$

* Для некоторых относительно простых задач можно показать, что погрешность, связанная с использованием «ступенчатого» соотношения, пропорциональна $\Sigma \Delta$, в то время как погрешность «алмазного» соотношения пропорциональна $(\Sigma \Delta)^2$, где Δ — ширина пространственного интервала.

** Специальных направлений и соответствующих им оценок можно избежать, определив $N_{m+1/2}$, $i+1/2$ с помощью N_m , $i+1/2$ и $\bar{N}_{i+1/2}$ путем линейной интерполяции.

$= N$. Другая возможность состоит в использовании функциональных соотношений для потока $\psi(\mathbf{r}, \Omega, t)$ и получении разностных соотношений с помощью средних по ячейке, определенных в разд. 3.1.2. Более плодотворное направление — использование интегральной формы уравнения Больцмана (см. разд. 3.9.1). Мы проиллюстрируем метод в простом случае одномерной плоской геометрии без временной зависимости, когда уравнение (3.63) имеет вид

$$\mu(N_{i+1} - N_i) + \Sigma N \Delta x = S \Delta x. \quad (3.88)$$

В предположении, что $\mu > 0$, используем интегральное уравнение, чтобы связать N_{i+1} и N_i :

$$N_{i+1} = N_i e^{-\Sigma \Delta x / \mu} + \int_0^{\Delta x / \mu} e^{-\Sigma s} S ds. \quad (3.89)$$

Здесь $\Sigma \Delta x / \mu$ — расстояние (в длинах свободного пробега), которое частица, движущаяся в направлении μ , пролетит, пересекая ячейку. Если предположить, что величина S постоянна по ячейке, уравнение (3.89) можно преобразовать к виду

$$N_{i+1} = N_i e^{-t} + S(1 - e^{-t}) / \Sigma, \quad t = \Sigma \Delta x / \mu, \quad (3.90)$$

которое можно использовать, чтобы исключить N_{i+1} из (3.88). Тогда

$$N = [u N_i + S(t - u) / \Sigma] / t, \quad u = 1 - e^{-t}, \quad (3.91)$$

что аналогично уравнению (3.82). Комбинация (3.90) и (3.91) показывает, что приближение уравнения (3.90) эквивалентно весовому соотношению

$$N = a N_{i+1} + (1 - a) N_i, \quad a = \frac{1}{u} - \frac{1}{t}. \quad (3.92)$$

Предполагается, что значение весовой функции a изменяется в зависимости от t в диапазоне $1/2 \leq a \leq 1$. Действительно, если экспоненту аппроксимировать выражением

$$e^{-t} \approx (1 - t/2) / (1 + t/2), \quad (3.93)$$

то вес $a = 1/2$ и уравнение (3.92) является разностным уравнением схемы алмаза. С другой стороны, для $e^{-t} \approx 1/(1 + t)$ (менее точная аппроксимация при малых t) получается ступенчатое соотношение.

Хотя зависимость (3.93) является хорошей аппроксимацией e^{-t} для малых t , она не годится для $t > 2$, так как получаются отрицательные значения. Возникновение отрицательных потоков в численных расчетах часто есть следствие этого недостатка. Один конкретный путь преодоления этого, который оказался успешным в тестовых задачах, — использование соотношения (3.93) при $t < 2$ и замена экспоненты нулем при $t > 0$. Проблема коррекций отрицательных потоков подробно обсуждается в разд. 3.6.2.

Использование интегрального уравнения было проиллюстрировано для элементарной геометрии. Но метод может быть распространен на более сложные геометрии. Например, для двухмерной (x, y) -геометрии подобная схема дала превосходные результаты.

3.5.3. Упрощения в одномерной пространственной геометрии. Как уже упоминалось выше, поскольку S зависит от N , требуется итерационное решение рекуррентного уравнения (3.82). В одномерных задачах уравнение (3.12) имеет вид

$$\mu(A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + (\alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}) / \omega + \Sigma N V = S V, \quad (3.94)$$

где осталось только два индекса i и m . Можно преобразовать уравнение (3.94) к системе уравнений, которая в каждой пространственной точке может быть решена сразу путем обращения матриц [30, 31]. Чтобы быть уверенным

в устойчивости численного счета, необходимо сделать преобразование, похожее на то, которое описано ниже для решения диффузионных уравнений. Содержит ли эта специальная форма решения меньше вычислительных операций? Этот вопрос еще не исследован.

В приближении диффузионной теории внутригрупповые члены источника могут быть вычтены из подобных членов исчезновения нейтронов, так что внутригрупповых итераций не нужно. В одномерном случае результирующие уравнения с учетом (3.64) и (3.69) имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + (\Sigma - \Sigma_{s,0gg}) \bar{N} V &= (\bar{S} - \Sigma_{s,0gg} \bar{N}) V, \\ A (\bar{N}_{i+1} - \bar{N}_i) / 6 + (\Sigma - \Sigma_{s,1gg}) IV &= (S_I - \Sigma_{s,1gg} I) V, \end{aligned} \right\} \quad (3.95)$$

где члены источника больше не содержат \bar{N} или I для группы (исключая член изотропного деления $v \Sigma_f \bar{N}$, с которым приходится манипулировать отдельно в цикле внешних итераций). Используя разностные соотношения схемы алмаза $2\bar{N} = \bar{N}_{i+1} + \bar{N}_i$ и $2I = I_{i+1} + I_i$, можно написать рекуррентные соотношения для \bar{N} и I . К несчастью, эти уравнения численно неустойчивы по отношению к ошибке округления. Однако запись этих уравнений через две неизвестные величины p и q , определенные как

$$I_l = p_l \bar{N}_l - q_l, \quad l = i \text{ или } i + 1, \quad (3.96)$$

приводит к устойчивым рекуррентным соотношениям для p и q . Эти соотношения получаются подстановкой (3.96) при $l = i + 1$ в (3.95), в котором I и \bar{N} заменены их разностными выражениями схемы алмаза. Тогда исключение \bar{N}_{i+1} из двух получившихся уравнений дает уравнение $I_i = f \bar{N}_i - g$. Приравнявая f и g соответственно к p и q в выражении (3.96), получаем

$$\left. \begin{aligned} p_i &= [p_{i+1} (AA_{i+1} + \Sigma_0 \Sigma_1) + 2A\Sigma_0] / (p_{i+1} A\Sigma_1 + AA_i + \Sigma_1 \Sigma_0), \\ q_i &= [q_{i+1} (AA_{i+1} - \Sigma_0 \Sigma_1) + S_0 (A + \Sigma_1 p_{i+1}) - \\ &\quad - S_1 (A_{i+1} p_{i+1} + \Sigma_0)] / [p_{i+1} A\Sigma_1 + AA_i + \Sigma_1 \Sigma_0], \end{aligned} \right\} \quad (3.97)$$

где введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_0 &= (\Sigma - \Sigma_{s,0gg}) V / 2, & \Sigma_1 &= 3 (\Sigma - \Sigma_{s,1gg}) V, \\ S_0 &= (\bar{S} - \Sigma_{s,0gg} \bar{N}) V, & S_1 &= 6 (S_I - \Sigma_{s,1gg} I) V. \end{aligned} \right\} \quad (3.98)$$

Численно устойчивые рекуррентные соотношения (3.97) применяются для счета от наружной границы, где q_{i+1} и p_{i+1} известны из граничных условий. Вычисления проводят до внутренней границы. На внутренней границе \bar{N}_i определяется граничными условиями. Затем вычисляется \bar{N}_i в порядке возрастания индекса i из соотношения

$$\bar{N}_{i+1} = [(A_i p_i - \Sigma_0) \bar{N}_i + A_{i+1} q_{i+1} - A_i q_i + S_0] / (A_{i+1} p_{i+1} + \Sigma_0), \quad (3.99)$$

которое получается из первого уравнения (3.95) с использованием (3.96) для исключения I_i и I_{i+1} . Одновременно из (3.96) вычисляется I .

В терминах альbedo r ($0 \leq r \leq 1$) и отношения $\beta = (1 - r) / (1 + r) \sqrt{3}$ внутреннее граничное условие имеет вид $I = -\beta N$, а наружное $I = \beta N$, где значения I , N , β берутся на соответствующей границе. С учетом (3.96) граничные условия принимают вид:

$$\left. \begin{aligned} p &= \beta, \quad q = 0 \text{ на наружной границе,} \\ \bar{N} &= q / (p + \beta) \text{ на внутренней границе.} \end{aligned} \right\} \quad (3.100)$$

Решение диффузионных уравнений сводится к двум прогонкам: прогонке снаружи для определения p и q и прогонке изнутри наружу для определения I и \bar{N} . Если принцип применяется непосредственно к дискретно-ординатной

форме транспортного уравнения [8], соотношение (3.96) становится векторно-матричным, и, как упоминалось выше, встает вопрос о затратах времени на обращение матрицы. К сожалению, пока еще этот принцип не удается применить к многомерным задачам. Но в двухмерном случае три диффузионных уравнения (одно для потока и два для токов нейтронов) можно рассматривать как две пары одномерных уравнений. Сначала можно задать ток J и решать уравнения для потока и тока I . Затем, используя найденные значения \bar{N} и I , уравнения для потока и тока J можно решать отдельно и т. д. Этот процесс, будучи в действительности итерированием по лапласиану, был исследован для нескольких простых двухмерных задач. Оказалось, что по сравнению с процессом решения диффузионных уравнений второго порядка он значительно быстрее и сравним по скорости итераций с методом S_2 , который дает больше информации и, вообще говоря, более точен (см. разд. 3.4.1).

3.5.4. Использование диффузионного приближения в рамках транспортной теории. Диффузионная теория дает довольно точные результаты в пределах энергетических групп, где процесс решения транспортных уравнений сходится медленно. Диффузионная теория применима, если: а) сечение поглощения мало по сравнению с полным сечением, т. е. когда $\Sigma_{s,0gg}$ и Σ_g сравнимы по величине, и б) рассматриваемая область свободна и удалена от быстро меняющихся источников. В этих условиях итерационные процедуры, используемые для решения уравнения переноса (см. разд. 3.7.1), требуют больших затрат времени, так как внутригрупповой источник рассеяния, по которому необходимо итерировать, велик по сравнению с другими источниками [см. обсуждение после уравнения (3.107)]. Использование диффузионного приближения полностью исключает эти итерации*. Чтобы улучшить сходимость, диффузионные решения часто используются выборочно для отдельных энергетических групп или на начальном этапе расчета. Метод отыскания диффузионного решения, который применяется к задачам любой геометрической размерности и который используется в схеме получения решения уравнения переноса, следующий. Для простоты изложения уравнения дискретных ординат (3.63) запишем для одномерной сферической геометрии в предположении одного входящего и одного выходящего потока. Если $\mu = 1/\sqrt{3}$ и N^- — входящий нейтронный поток, то уравнение для него имеет вид

$$-\mu A_{i+1} N_{i+1}^- + \mu A_i N_i^- + \mu (A_{i+1} - A_i) N + \\ + \Sigma_r N^- - V = V(Q^- + F + 3\mu \bar{\Sigma} I). \quad (3.101)$$

Средний поток N и ток I определяются через N^- и выходящий поток N^+ следующим образом:

$$N = (N^+ + N^-)/2, \quad I = \mu (N^+ - N^-)/2 \quad (3.102)$$

и, следовательно,

$$N = N^- + 3\mu I. \quad (3.103)$$

Входящая компонента внешнего источника Q^- включает внегрупповые источники. Использование соотношения (3.103) и разностного соотношения схемы алмаза $2N^- = N_i^- + N_{i+1}^-$ в уравнении (3.101) дает рекуррентную формулу для вычисления входящего потока

$$N^- = \frac{\mu A N_{i+1}^- - (A_{i+1} - A_i) I^p + V(Q^- + F + 3\mu \bar{\Sigma} I^p)}{\mu A + \Sigma_r V}. \quad (3.104)$$

* Ситуация усложняется тем, что источник внутригруппового рассеяния велик в области тепловой энергии, где важно рассеяние вверх. Следовательно, может потребоваться много циклов внутренних итераций (см. разд. 3.7.1) из-за медленной сходимости внешних итераций (см. разд. 3.7.2).

Здесь у тока I вверху указан индекс, чтобы отметить тот факт, что необходимы итерации для его вычисления. Для выходящего потока

$$\begin{aligned} \mu A_{i+1} N_{i+1}^+ - \mu A_i N_i^+ - \mu (A_{i+1} - A_i) N + \\ + \Sigma_r V N^+ = V (Q^+ + F - 3\mu \bar{\Sigma} I). \end{aligned} \quad (3.105)$$

Такая же подстановка, как и для N^- , дает

$$N^+ = \frac{\mu A N_i^+ + (A_{i+1} - A_i) (\mu N^- + I^p) + V (Q^+ + F - 3\mu \bar{\Sigma} I^p)}{2\mu A_{i+1} + \Sigma_r V}. \quad (3.106)$$

Итерационное решение уравнений (3.104) и (3.106) начинается с задания величины I^p . После вычисления путем прогонки внутрь N^- и вычисления N^+ путем прогонки наружу значение тока уточняется и вычисления повторяются и т. д.

Рекуррентные соотношения, полученные выше, очень похожи на уравнение (3.82) и могут быть легко получены внутри той же формулы теории переноса. Сумма уравнений (3.105) и (3.101), взятых с соответствующими весами, дает уравнение баланса нейтронов. Поскольку для получения каждого рекуррентного соотношения была использована формула (3.103), решения также удовлетворяют нейтронному балансу*.

Эта схема может быть без труда применена и к общему уравнению переноса, когда включаются в рассмотрение все M направлений. Такая модифицированная теория имеет две привлекательные с вычислительной точки зрения особенности, но в полной мере метод еще не был исследован. Во-первых, как уже упоминалось, внутригрупповая итерация по источнику рассеяния заменяется итерацией по току нейтронов, сохраняющей баланс нейтронов. Во-вторых, рекуррентные соотношения могут быть выведены из точных соотношений, что позволяет в рамках одного алгоритма переходить к более точным схемам по мере сходимости итерационного процесса.

§ 3.6. ПРИНЦИПЫ ОЦЕНКИ РЕШЕНИЯ

Если выбраны некоторые рекуррентные соотношения для расчета, то используются все пути, чтобы быть уверенным, что эти соотношения достаточно точны. Желательность получения соотношений с положительным числителем и знаменателем уже была продемонстрирована. Двумя другими приемами уточнения вычислений являются коррекция отрицательных потоков и применение принципа оценки направления.

3.6.1. Оценка направления. Если зависимость между потоками с различными m относительно слабая, то точность расчета повышается. Дело в том, что нейтронный поток наиболее сильно ослабляется в тех направлениях, которые наиболее близко примыкают к направлениям кратчайшего пути внутрь области и наружу. Поэтому целесообразно начинать расчет вдоль этого направления снаружи внутрь области, переходя постепенно к соседним направлениям, а затем с учетом внутреннего граничного условия перейти к расчету в направлениях изнутри наружу. В многомерных задачах процедура оказывается более сложной, но принцип остается тем же.

Важен также и порядок расчета потоков с различными индексами m . В одномерной плоской геометрии каждое направление не зависит от другого и порядок расчета потока различных направлений, казалось бы, несуществен. В действительности, однако, поток при $\mu = -1$ может очень сильно отличаться от потока, например, при $\mu = 0$. Поэтому при расчете в порядке $\mu = -1; 0; -0,9 \dots$ скорее могут возникнуть осцилляции потока, чем при расчете в порядке $\mu = -1; -0,9 \dots; 0 \dots$. При рассмотрении процесса замедления расчет

* Если использовалось выражение $N = N^+ - 3\mu I$ при получении рекуррентного соотношения для N^+ , то были бы получены симметричные формулы, но баланс нейтронов был бы нарушен.

обычно начинают с самых высоких энергий с тем, чтобы максимальное количество свежей информации участвовало в расчете каждой следующей группы, а эффект ослабления вследствие поглощения увеличивал точность.

3.6.2. Коррекция потоков и источников. Даже если все члены уравнения (3.82) положительны, использование разностных соотношений (3.79) при переходе от ячейки к ячейке может породить отрицательные потоки. А это, в свою очередь, приведет к катастрофическим осцилляциям потока в соседних ячейках. На практике такие ситуации возникают обычно, когда сечения велики или при неудачном пространственном разбиении (когда слишком много длин свободного пробега укладывается на ширине ячейки), но иногда могут возникнуть и на начальном этапе расчета, если поток сильно отличается от истинного. Чтобы предотвратить распространение этих отрицательных величин, используется коррекция потока. По своему физическому смыслу потоки всегда неотрицательны, а отрицательные значения N_{i+1} , N_{j+1} , N_{k+1} , N_{s+1} , $N_{m+1/2}$ являются просто результатом слишком смелой экстраполяции. Если значение потока получается отрицательным, то при вычислении на следующих шагах этот поток приравнивается нулю. Выполняется также анализ на положительность и, если необходимо, производится коррекция. Если более чем один поток оказался отрицательным, то только один из них полагают равным нулю, в надежде, что пересчет улучшит остальные потоки. Эта процедура повторяется до тех пор, пока все потоки не станут положительными или равными нулю. Этот метод требует нескольких различных рекуррентных соотношений, но он был успешно использован при решении задач, в которых другие способы оказались неудачными. Например, при расчете плоского слоя на критичность обычный расчет дает неотрицательные потоки и известный результат. Когда же порядок перехода от одного направления к другому был изменен, стали возникать отрицательные потоки. Но после подключения коррекции получился прежний результат с положительными потоками. Описанная здесь коррекция была успешно использована в программе DTF-IV [20, 32] одномерного многогруппового решения уравнения переноса.

Обычно все члены в соотношении (3.82) положительны. Неприятности возникают, если источник и (или) полное сечение становятся отрицательными. Сечения могут стать отрицательными из-за «временного» поглощения, из-за лапласианной поправки на утечку в других направлениях или из-за реакции (n , $2n$), рассматриваемой как отрицательное поглощение. Источники могут быть отрицательными, если их анизотропность учитывается линейным приближением $S = S_0 + 3\mu S_1$; при достаточно больших значениях S_1 и при некоторых μ величина S может стать отрицательной. Если отрицательный источник иногда не представляет опасности, так как может компенсироваться другими положительными членами в числителе выражения (3.82), то отрицательные сечения являются более опасными, так как они находятся в знаменателе. Даже если знаменатель не становится отрицательным, он может быть очень малым, что приведет к большим величинам N . Обе эти неприятные возможности устраняют, переходя к более высоким приближениям и применяя преобразования, описанные в разд. 3.4.3.

§ 3.7. ИТЕРАЦИОННЫЕ ЦИКЛЫ И КРИТЕРИИ СХОДИМОСТИ

В предыдущих разделах были выведены уравнения дискретных ординат, показано, как они решаются с использованием разностных соотношений, и приведены принципы оценки этих решений. Остается только определить стратегию получения решения и установить критерий, по которому судят, что решение достигнуто.

Решение начинается с анализа уравнения переноса внутри группы. Если внутри группы все источники, зависящие от потоков других групп, и источники деления внутри группы предположить известными, тогда только источник рассеяния внутри группы (пропорциональный $\Sigma_{s,0gg}$) зависит от потока нейтронов

этой группы. Транспортное уравнение становится моноэнергетическим. Его решение получается путем итерирования по источнику рассеяния. Затем переходят к решению для следующей группы, и так до тех пор, пока не будут обчислены все группы. Таким образом получается первое приближение решения для всей системы. Далее надо пересчитать источники, которые предполагались известными. Эта процедура определяет другой цикл итераций, который называют внешними итерациями. Вообще говоря, могут иногда потребоваться и более общие циклы итераций. Например, после того как процесс внешних итераций сошелся, можно изменить размерность системы. Итерации внутри группы по всем группам и по всем изменениям системы обсуждаются в разд. 3.7.1 — 3.7.3. Иногда эти итерации усложняются присутствием неявных граничных условий (см. разд. 3.7.4).

В каждом цикле итераций необходимо установить, когда решение достигнуто, т. е. установить критерий сходимости. Критерий сходимости, описанный ниже, не дает информации о величине наибольших собственных чисел матрицы, участвующих в итерациях. Он является просто рецептом, так как в общем случае не было доказано аналитически ни факта сходимости, ни ее скорости. Итерационные процедуры, описанные ниже, сходятся; утверждение, что они сходятся к истинному решению, основывается на согласии с аналитическими решениями (там, где они известны), с экспериментальной информацией, с решениями, полученными другими численными методами. Пример такого сравнения, демонстрирующего, между прочим, прекрасное согласие, дан в работе [33].

Критерий сходимости, описанный ниже, основывается на физических принципах. Например, различие между источниками внутригруппового рассеяния в двух соседних итерациях является мерой фиктивного источника, дополнительно вводимого в группу. Этот источник в процессе итераций необходимо сделать равным нулю. На основе принципа сохранения нейтронного баланса развиты схемы, ускоряющие сходимость. Например, для внутригрупповой итерации требование сохранения нейтронного баланса приводит к методу перенормировки потоков, который ускоряет итерационный процесс. Подобные же приемы используют и для ускорения процесса итераций по источнику рассеяния вверх по энергии.

Если в примерах, приведенных ниже, потребовать, чтобы относительное изменение в любом потоке, в любом месте во всех группах в двух соседних итерациях стало малым [см. критерий (3.113)], то численные величины изменятся довольно слабо или вообще не изменятся. Требование точности, как правило, вступает в конфликт с требованием быстроты сходимости. Поэтому было найдено компромиссное решение, где разумно объединены точность с хорошей скоростью счета. По-видимому, пользователям программ нужно предоставлять на выбор различные критерии и тогда они сами смогут установить необходимую точность для каждого отдельного расчета.

3.7.1. Внутренние итерации. Цикл вычислений внутри группы, когда пересчитывается источник рассеяния внутри группы, называют внутренней итерацией. Основываясь на всей имеющейся информации, рассчитывается источник рассеяния внутри группы и потом выполняется расчет углового и пространственного распределения нейтронов, чтобы затем вычислить новое значение источника внутригруппового рассеяния. Этот процесс составляет одну внутреннюю итерацию.

Итерационный процесс заканчивается, когда два последовательных значения внутригруппового источника отличаются друг от друга по принятому критерию меньше чем на заранее заданную величину. Сходимость ускоряется и при этом сохраняется баланс нейтронов с помощью перенормировки потоков. Уравнение баланса, полученное умножением уравнения (3.63) на ω_m и суммированием результатов по всем m , выглядит следующим образом:

$$A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + B_{j+1} J_{j+1} - B_j J_j + C_{k+1} K_{k+1} - C_k K_k + (\Sigma_r + \Sigma_{s, 0gg}) \bar{N} V = (S' + \Sigma_{s, 0gg} \bar{N}^p) V. \quad (3.107)$$

Здесь $\Sigma_r + \Sigma_{s,ogg} = \Sigma$ и $S = S' + \Sigma_{s,ogg} \bar{N}^p$. Величина \bar{N}^p берется из предыдущей итерации [в противном случае уравнение (3.107) было бы точным соотношением баланса]. Разница между полученным в предыдущей итерации источником рассеяния и следующим присутствует как ошибка в форме фиктивного источника. Если ввести нормирующий коэффициент f как параметр, уровень потока во всей системе может быть скорректирован так, чтобы по всей системе фиктивный источник был равен нулю. Умножая (3.107) на f и перепиравывая члены источника, получаем

$$f [A_{i+1} I_{i+1} - A_i I_i + B_{j+1} J_{j+1} - B_j J_j + C_{k+1} K_{k+1} - C_k K_k + (\Sigma_r + \Sigma_{s,ogg}) \bar{N}V] = f \Sigma_{s,ogg} \bar{N}V + VS' + f \Sigma_{s,ogg} (\bar{N}^p - \bar{N}) V + (f - 1) S' V. \quad (3.108)$$

Если бы в правой части каждого из этих уравнений были только члены $f \Sigma_{s,ogg} \times \bar{N}V + S'V$, соответствующее уравнение было бы точным соотношением баланса для потока fN и правильного внешнего источника VS' . Таким образом, если величина f выбрана так, что остальные члены уничтожаются, то будет иметь место баланс нейтронов. Однако наилучшее, что можно сделать с помощью одной постоянной f , это удовлетворить лишь одному условию, скажем, сделать равным нулю среднее по системе значение дополнительного источника, т. е. положить

$$\sum_R [f \Sigma_{s,ogg} (\bar{N}^p - \bar{N}) + (f - 1) S'] V = 0 \quad (3.109)$$

или, что то же самое, выбрать f таким, чтобы выполнялось равенство

$$f = \sum_R S' V / \sum_R [\Sigma_{s,ogg} (\bar{N}^p - \bar{N}) + S'] V, \quad (3.110)$$

где индекс R обозначает суммирование по всем пространственным ячейкам. Нормировочный коэффициент f из (3.110) используется для того, чтобы согласовать все потоки перед началом следующей внутренней итерации. Как только сумма $\Sigma \Sigma_{s,ogg} \bar{N}^p V$ станет равной $\sum_R \Sigma_{s,ogg} \bar{N}V$, f будет равен единице. Для более сложных случаев могут быть введены дополнительные нормировочные коэффициенты, чтобы гарантировать сохранение баланса нейтронов в отдельных областях системы. Заметим, что обобщения метода перенормировки еще широко не исследованы [34, 35].

Основываясь на этом методе перенормировки, в качестве критерия сходимости можно выбрать такой, чтобы итерации прекращались, когда фиктивный источник станет пренебрежимо малым, т. е. когда

$$\left| \sum_R \Sigma_{s,ogg} (\bar{N} - \bar{N}^p) V \right| < \varepsilon S_{avg}^p, \quad (3.111)$$

где S_{avg}^p — усредненный групповой источник нейтронов, возникающих не вследствие соударений в группе, который определяют делением полного источника на число групп, ε — необходимая точность расчета. Относительный критерий состоит в требовании, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{R=1}^H \Sigma_{s,ogg} |\bar{N} - \bar{N}^p| V < \varepsilon S_{avg}^p \sqrt{H}, \quad (3.112)$$

где более сильное условие слева уравновешивается статистическим ослаблением справа; H — полное количество пространственных ячеек. Оба критерия определяются усредненными по объему величинами отклонений и в большей степени характеризуют ошибки в крупных ячейках, нежели в мелких. Иногда представляет интерес детальный ход потоков. Тогда следует использовать очень сильный критерий следующего вида:

$$\max_R |1 - \bar{N}/\bar{N}^p| < \varepsilon. \quad (3.113)$$

Описанная процедура применима, когда внутригрупповой источник изотропен. Если этот источник зависит от тока или других анизотропных компонент углового потока, соответствующие составляющие источника также должны сходиться в процессе итераций. Например, для линейного анизотропного источника возможным критерием [в дополнение к (3.112)] является удовлетворение требованию

$$\sum_{R=1}^H A |I - I^p| < \varepsilon S_{avg}^p \sqrt{H}. \quad (3.114)$$

3.7.2. Внешние итерации. Как только процесс внутренних итераций в первой группе сойдется, переходят к расчету для второй группы. Вычислительный цикл, который содержит сходящиеся внутренние итерации для всех групп, начиная с первой и кончая группой G , называют внешней итерацией. В этих итерациях пересчитываются источники рассеяния и делений. Источники рассеяния вниз по энергии можно рассчитать для всех нижних групп, как только процесс внутренних итераций закончен, а источники рассеяния вверх и источники деления нельзя вычислить, пока не завершён процесс внешних итераций. Если нет рассеяния вверх и нет деления (предполагается существование внешнего источника хотя бы в одной группе), расчет заканчивается сразу после первого цикла внешних итераций. Если же источники присутствуют, то после одной внешней итерации надо их пересчитать и продолжать расчет до тех пор, пока источники не застабилизируются.

Источник рассеяния вверх по энергии — это неявный источник, аналогичный источнику внутригруппового рассеяния во внутренней итерации, и поэтому к нему можно применить тот же прием перенормировки потоков, чтобы ускорить сходимость и обеспечить сохранение баланса нейтронов. Условие нормировки, получаемое из уравнения баланса для всей системы, т. е. из уравнения (3.107), просуммированного по всем группам, имеет вид

$$\sum_g (L_{g,R} + \Sigma_g \bar{N}_g V) = \sum_g V S_g. \quad (3.115)$$

Для краткости все токовые члены обозначены через L . Из определения члена источника [см. уравнение (3.35)] имеем

$$\sum_{g=1}^G V S_g = \sum_{g=1}^G V \left(Q_g + \chi_g \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h} \bar{N}_h + \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,0gh} \bar{N}_h \right), \quad (3.116)$$

где члены анизотропного рассеяния исчезают в сумме по m , возникающей при получении уравнения (3.107); Q_g — изотропная компонента внешнего источника. Из определения дифференциальных сечений рассеяния вытекает соотношение

$$\begin{aligned} \Sigma_g &= \Sigma_{a,g} + \sum_{h=1}^G \Sigma_{s,0hg} = \Sigma_{a,g} + \sum_{h>g} \Sigma_{s,0hg} + \Sigma_{s,0gg} + \\ &+ \sum_{h<g} \Sigma_{s,0hg} \equiv \Sigma_{a,g} + \Sigma_g^d + \Sigma_{s,0gg} + \Sigma_g^u, \end{aligned} \quad (3.117)$$

где индексы d и u относятся к рассеянию вниз и вверх по энергии. С учетом этих соотношений уравнение (3.115) принимает вид

$$\begin{aligned} &\sum_{g=1}^G [L_{g,R} + (\Sigma_{a,g} + \Sigma_g^d + \Sigma_{s,0gg} + \Sigma_g^u) \bar{N}_g V] = \\ &= \sum_{g=1}^G V (Q_g + \chi_g F^p) + \sum_{h=1}^G V (\Sigma_h^d \bar{N}_h + \Sigma_{s,0hh} \bar{N}_h + \Sigma^u \bar{N}_h^p), \end{aligned} \quad (3.118)$$

где снова p указывает, что источники взяты из предыдущей итерации. Если уравнение (3.118) суммируется по всем ячейкам, члены внутригруппового рассеяния уничтожаются. Члены рассеяния вниз также уничтожаются потому, что

для вычисления каждого из них используется одно и то же значение \bar{N} . Поэтому, если не принимать во внимание небалансность вследствие рассеяния вверх, уравнение (3.118) должно отражать тот факт, что утечка из системы и поглощение в точности равны вкладу источника. Именно,

$$\sum_{g,R} [L_{g,R} + (\Sigma_{a,g} + \Sigma_g^u) \bar{N}_g V] = \sum_{g,R} (\Sigma_g^u \bar{N}_g^p + Q_g) V + \sum_R F^p V. \quad (3.119)$$

Выше была использована нормировка спектра деления, чтобы образовать g -сумму источника деления. Из уравнения (3.119) нормирующий множитель для рассеяния вверх определяется так же, как и для внутренней итерации:

$$f_{up} = \sum_R V (F^p + \sum_g Q_g) / \sum_R V \left\{ F^p + \sum_g [Q_g + \Sigma_g^u (\bar{N}_g^p - \bar{N}_g)] \right\}. \quad (3.120)$$

Используя такой же подход, можно получить и более сложные рецепты для сохранения баланса в каждой области системы.

Критерии сходимости для рассеяния вверх по энергии аналогичны (3.111) и (3.112):

$$\left| \sum_{g,R} V \Sigma_g^u (\bar{N}_g^p - \bar{N}_g) \right| < \varepsilon \sum_R V (F^p + \sum_g Q_g) = \varepsilon S_{tot} \quad (3.121)$$

и

$$\sum_{g,R} V \Sigma_g^u |\bar{N}_g^p - \bar{N}_g| < \varepsilon S_{tot} \sqrt{GH}. \quad (3.122)$$

Если внешний источник отсутствует, то полный источник делений нормируется на определенный уровень и все источники приводятся в соответствие с этой нормировкой. После внешней итерации источник делений пересчитывается и вычисляется коэффициент размножения

$$\lambda = \left(\sum_R VF \right) / \left(\sum_R VF^p \right). \quad (3.123)$$

Перед каждой внешней итерацией спектр деления умножается на $1/\lambda$. В этих обозначениях коэффициент размножения системы есть произведение последовательных значений λ . Обычно степень сходимости последовательности λ считают достаточной, если

$$|\lambda - \lambda^p| < \varepsilon \quad (3.124)$$

и если

$$\sum_R V |F - \lambda^p F^p| < \varepsilon S_{avg} \sqrt{H}, \quad (3.125)$$

где S_{avg} — среднее значение полного источника в группе [см. (3.111)]; в подкритической системе S_{avg} может содержать внешний источник и источник деления.

После того как сошлись итерации по рассеянию вверх и по делению, внешний итерационный цикл прекращается. Однако расчет может еще не быть законченным. Описанные здесь схемы пригодны для решения задач с внешним источником и для критических задач.

3.7.3. Параметрические исследования собственных чисел. Пусть процесс внешних итераций сошелся. Тогда изменением подходящих параметров системы можно обеспечить заданный уровень размножения, обычно состояние критичности. Как правило, при этом изменяют размеры (всей системы или отдельной зоны), «временное поглощение» или варьируют состав системы. Для каждого случая итерационного расчета, включающего последовательность сходящихся внешних итерационных циклов, необходимо найти ту величину изменяемого параметра, которая дает необходимый коэффициент размножения. На этом этапе итерационного процесса нужно приложить максимум усилий и интуиции, чтобы ускорить сходимость, так как каждый сходящийся внешний цикл может требовать много машинного времени. Заметим, что необходимое

для решения время существенно уменьшается, если ослабить критерий сходимости. Другими словами, если при расчетах критической толщины система еще далека от критической, то получение решения на каждом этапе с точностью до шести значащих цифр является большой роскошью. Метод, который был успешно применен для сокращения полного итерационного времени, использует искусственное прекращение внутренних итераций, как только точность собственного числа не станет, например, на порядок хуже окончательной. Это связано с тем, что для получения разумных величин интегральных характеристик не нужны очень точные решения на стадии внутренних итераций. Иногда в процессе итераций с изменением тех или иных параметров для достижения заданного уровня размножения строят линейную или параболическую зависимость собственного числа от изменяемого параметра и на ее основании предсказывают, как нужно изменить тот или иной параметр. На следующем итерационном шаге осуществляется проверка.

3.7.4. Неявные граничные условия. Если граничным условиям равенства нулю потока влетающих нейтронов легко удовлетворить, то более сложные граничные условия требуют итерационного решения. Например, условия отражения на правой плоскости пластины требуют, чтобы входящий и отраженный потоки, имеющие одинаковую величину направляющего косинуса, были равны. Так как расчетная схема построена на вычислении потоков справа налево для направлений внутрь и слева направо для направлений наружу, выходящий поток справа зависит от входящего потока на правой границе. Таким образом, при альбедном граничном условии внутренняя итерация должна продолжаться до тех пор, пока входящий и выходящий потоки не станут равными и пока не сойдется процесс итераций фиктивного источника внутригруппового рассеяния.

Даже при искусственном ускорении сходимости или использовании менее сильного критерия сходимости по граничному условию кажется, что для случая отражающей внешней границы процесс итераций более длителен. Один из методов улучшения сходимости основан на линейности уравнения Больцмана. Сначала прямая и обратная прогонки проводятся так, что входящий поток справа принимается в точности равным выходящему. С таким поверхностным источником и с остальными источниками, равными нулю, осуществляется вторая прогонка в прямую и обратную стороны. Далее к первому решению добавляется такая часть второго решения, чтобы полный правый ток равнялся нулю. На этих двух прогонках выполняется обычная внутренняя итерация с проверкой сходимости итерационного процесса.

Подобным образом можно решать задачи и с другими неявными граничными условиями. «Белое» граничное условие — это условие изотропного возвращения вылетающих нейтронов. В этом случае условием сходимости является равенство нулю результирующего тока на границе. Другое неявное граничное условие — условие периодичности. Оно требует, чтобы угловые потоки на левой границе были равны потокам на правой границе. Этому условию можно удовлетворить, если потребовать равенства нулю результирующего тока через всю систему (или в пределах погрешности ϵ).

В многомерных системах, если используется интегральный критерий сходимости, все внешние границы с одинаковым типом условия можно объединить и интерпретировать как одну поверхность.

§ 3.8. ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР

Приведем простой пример, где используются изложенные выше способы получения решения. Пусть нужно определить поток и коэффициент размножения в гомогенной сфере радиусом 2 см. Предположим, что две энергетические группы, четыре одинаковых пространственных интервала и четыре угловых диапазона обеспечивают достаточно точное решение задачи. Для простоты допустим, что рассеяние изотропно, что не существует рассеяния вверх по энергии и что большая часть нейтронов деления, которые возникают во второй

группе, попадает в первую. Геометрические и угловые коэффициенты, а также сечения и спектр деления, отражающие эти предположения, приведены в табл. 3.4. Для случая одномерной сферы рекуррентное соотношение (3.82) принимает вид

$$N_{i+1/2, m} = \frac{|\mu_m| AN_{i+1, m} + \alpha N_{i+1/2, m-1/2} / \omega_m + V_{i+1/2} S_{i+1/2}}{|\mu_m| A + \alpha / \omega_m + V_{i+1/2} \Sigma}, \quad (3.126)$$

где для $m = 1$ члены с α отсутствуют, для $m = 4$ и 5 вместо $N_{i+1, m}$ используется $N_{i, m}$. Величины $|\mu_m| A$ и α / ω_m , которые остаются неизменными в процессе расчета, приведены в табл. 3.5. Для начального направления $\alpha_{1/2}$ равно нулю. В начале расчета принимают все потоки равными нулю и предполагают, что имеется равномерно распределенный источник, обусловленный одним нейтроном деления. Для первой группы, например, источник нейтронов $V_{i+1/2} S_{i+1/2}$ равен $0,9 V_{i+1/2} / (\sum_{i=0}^3 V_{i+1/2})$. Именно,

источник деления F в (3.26)

одинаков во всех ячейках и нормирован на единицу, будучи проинтегрирован по всей системе, $0,9$ или доля χ_1 этого источника попадает в первую группу. Расчет начинается с направления внутрь с $m = 1$ на внешней поверхности сферы. Предполагаются вакуумные граничные условия, т. е. нейтронный поток извне равен нулю. Пространственно-угловая сетка и последовательность вычисления потока показаны на рис. 3.5. При $N_{4,1} = 0$ уравнение (3.126) (с $\alpha = 0$) дает $N_{7/2,1} = 0,0063134$. Так как не существует углового перераспределения для этого направления, то $N_{7/2,1/2} = N_{7/2,3/2}$, при использовании разностных соотношений «схемы алмаза» они оба оказываются равны $N_{7/2,1}$. Из этих соотношений также следует, что $N_{3,1} = N_{4,1} = 2N_{7/2,1}$, так что $N_{3,1} = 0,0126268$. Таким образом, для $m = 1$ потоки вычисляются в последовательных точках в направлении от периферии к центру сферы. Для вычисления $N_{5/2,1}$ используется $N_{3,1}$, так что $N_{2,1}$ и $N_{5/2,3/2}$ можно найти путем экстраполяции и т. д. Величины $N_{i+1/2,3/2}$, найденные при движении к центру, служат исходными для последующего направления. После того как обчислены первые три направления, переходят к расчету в направлении из центра. Так как геометрия сферическая, то в нашей задаче $N_{0,4} = N_{0,3}$ и $N_{0,5} = N_{0,2}$. Средние величины потоков по ячейке $N_{i+1/2, m}$ получают после полного обхода сетки, т. е. после окончания одного цикла внутренней итерации, как показано на рис. 3.6 (там же приведены величины

Таблица 3.4
Исходные данные для численного примера

| Геометрические характеристики | | | | | | | |
|---|-------------------------------|--|---|-------------------|---------------|-------------------|----------|
| i | Радиус r_i , см | Элементы площади поверхности A_i , см ² | Элементы объема $V_{i+1/2}$, см ³ | | | | |
| 0 | 0 | 0 | 0,523598 | | | | |
| 1 | 0,5 | 3,14159 | 3,665188 | | | | |
| 2 | 1,0 | 12,56636 | 9,948368 | | | | |
| 3 | 1,5 | 28,27431 | 19,373140 | | | | |
| 4 | 2,0 | 50,26544 | | | | | |
| Квадратурные коэффициенты ^а | | | | | | | |
| m | Направляющие косинусы μ_m | Весовые функции ω_m | Произведение $\omega_m \mu_m$ | | | | |
| 1 | -1,0 | 0 | 0 | | | | |
| 2 | -0,8819171 | 0,1666667 | -0,1469862 | | | | |
| 3 | -0,3333333 | 0,3333333 | -0,1111111 | | | | |
| 4 | +0,3333333 | 0,3333333 | +0,1111111 | | | | |
| 5 | +0,8819171 | 0,1666667 | +0,1469862 | | | | |
| Макроскопические сечения (см ⁻¹) и спектр деления | | | | | | | |
| Группа g | Σ_a | $\nu \Sigma_f$ | Σ | $\Sigma_{g, g+1}$ | Σ_{gg} | $\Sigma_{g, g-1}$ | χ_g |
| 1 | 0,02 | 0 | 0,2 | 0 | 0,06 | — | 0,9 |
| 2 | 0,08 | 0,24 | 0,22 | — | 0,14 | 0,12 | 0,1 |

^а Использовано уравнение (3.60) с $\mu_1 = 1/3$ и одинаковыми точечными весами.

Исходные данные для численного примера

Значения $\alpha_{m+1/2} \cdot |\mu_m| A$ и α/ω_m

| i | m | $\alpha_{m+1/2}$ | $ \mu_m A$ | α/ω_m | i | m | $\alpha_{m+1/2}$ | $ \mu_m A$ | α/ω_m |
|-----|-----|------------------|-------------|-------------------|-----|-----|------------------|-------------|-------------------|
| 0 | 1 | 0 | 3,1416 | | 2 | 1 | 0 | 40,8407 | |
| | 2 | 0,4618 | 2,7706 | 2,7706 | | 2 | 2,3088 | 36,0181 | 13,8531 |
| | 3 | 0,8108 | 1,0472 | 3,8178 | | 3 | 4,0542 | 13,6136 | 19,0891 |
| | 4 | 0,4618 | 1,0472 | 3,8178 | | 4 | 2,3088 | 13,6136 | 19,0891 |
| | 5 | 0 | 2,7706 | 2,7706 | | 5 | 0 | 36,0181 | 13,8531 |
| 1 | 1 | 0 | 15,7079 | | 3 | 1 | 0 | 78,5397 | |
| | 2 | 1,3853 | 13,8531 | 8,3119 | | 2 | 3,2324 | 69,2655 | 19,3944 |
| | 3 | 2,4325 | 5,2360 | 11,4534 | | 3 | 5,6758 | 26,1799 | 26,7247 |
| | 4 | 1,3853 | 5,2360 | 11,4534 | | 4 | 3,2324 | 26,1799 | 26,7247 |
| | 5 | 0 | 13,8531 | 8,3119 | | 5 | 0 | 69,2655 | 19,3944 |

средних потоков $\bar{N}_{i+1/2} = \sum_1^5 \omega_m N_{i+1/2, m}$). Перед началом второго цикла итерации проверяется условие сходимости. Левая часть соотношения (3.111) имеет вид

$$\left| \sum_{i=0}^3 \sum_{s, \text{ogg}} (\bar{N}_{i+1/2} - \bar{N}_{i+1/2}^p) V_{i+1/2} \right| = 0,0675174. \quad (3.127)$$

Это больше, чем ϵS_{avg}^p при $\epsilon = 0,0001$ и $S_{avg}^p = 0,5$. Условие (3.112) также не удовлетворяется. Коэффициент нормировки f найти легко, так как сум-

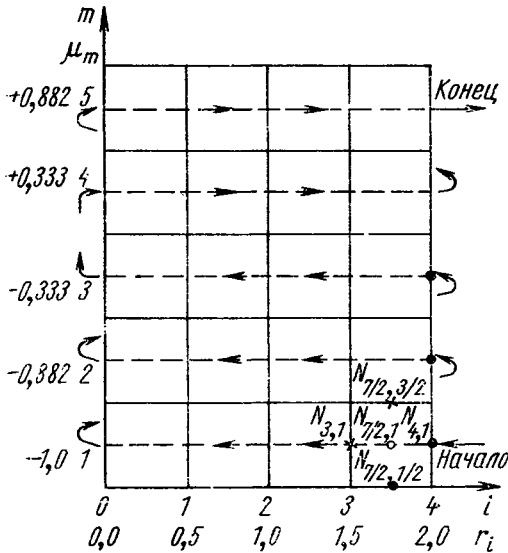


Рис. 3.5. Пространственно-угловая сетка: ● — граничные значения; ○ — вычисленные значения; × — экстраполированные значения.

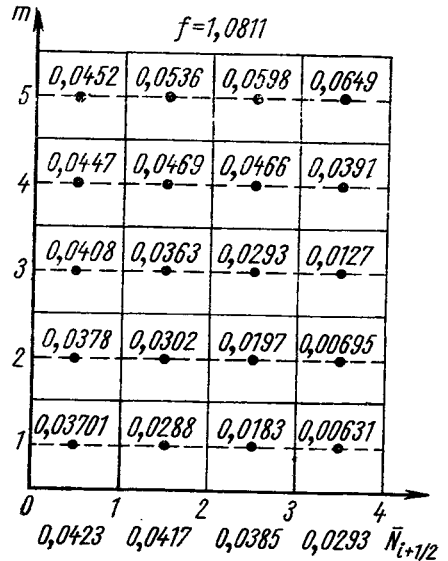


Рис. 3.6. Потоки первой группы после первой внутренней итерации.

марный (по объему) источник в группе составляет 0,9, т. е. $f = 0,9 / (0,9 - 0,0675174) = 1,081104$. Этот коэффициент затем используют, чтобы согласовать уровень потока $\bar{N}_{i+1/2}$ перед следующей внутренней итерацией. После получения в результате первой итерации величины $\bar{N}_{i+1/2}$ групповой источник корректируется путем добавления $\sum_{s, \text{ogg}} \bar{N}_{i+1/2} V_{i+1/2}$ к прежнему источнику деления. По мере проведения внутренней итерации эта часть источника непрерывно изменяется, в то время как источник деления остается

фиксированным. После второй внутренней итерации получаются потоки, приведенные на рис. 3.7.

Заметим, что введение коэффициента нормировки не только обеспечивает баланс нейтронов во всей системе, но и ускоряет сходимость, так как потоки после второй итерации действительно больше, чем после первой итерации. Заметим также, что новый коэффициент нормировки много ближе к единице, но все еще больше нее. Потоки после второй итерации все еще не удовлетворяют критерию сходимости и требуется третья итерация, результаты которой приведены в скобках на рис. 3.7.

Далее переходят к расчету второй группы. Источник деления в этой группе составляет 0,1 от общего источника деления и дополняется источником вследствие рассеяния нейтронов из первой группы во вторую, который вычисляется с использованием полученных потоков первой группы:

$$\begin{aligned} & V_{i+1/2} S_{i+1/2, g=2} = \\ & = \Sigma_{21} V_{i+1/2} \bar{N}_{i+1/2, g=1} + \\ & + 0,1 V_{i+1/2} / \left(\sum_{i=0}^3 V_{i+1/2} \right). \end{aligned} \quad (3.128)$$

Этот источник является фиксированным при расчете потоков второй группы и корректируется добавлением источника внутригруппового рассеяния. Он вычисляется как только определены потоки второй группы и корректируется после каждой внутренней итерации. Результаты трех итераций, которые необходимы для выполнения условия сходимости во второй группе, приведены в табл. 3.6. После того как процесс внутренних итераций в обеих группах сойдется, проверяется критерий сходимости по внешней итерации. После пересчета источника деления уравнение (3.115) дает

$$\lambda = \left(\sum_{i=0}^3 V_{i+1/2} F_{i+1/2} \right) / \left(\sum_{i=0}^3 V_{i+1/2} F_{i+1/2}^p \right) = 0,0901929. \quad (3.129)$$

Таблица 3.6

Результат внутренней итерации (вторая группа)

| Номер итерации | Средний поток $\bar{N}_{i+1/2}$ | | | | Нормировочный коэффициент |
|----------------|---------------------------------|-----------|-----------|-----------|---------------------------|
| | $i=0$ | $i=1$ | $i=2$ | $i=3$ | |
| 1 | 0,0123561 | 0,0120812 | 0,0107605 | 0,0077786 | 1,21253 |
| 2 | 0,0152062 | 0,0148435 | 0,0131309 | 0,0094156 | 1,000767 |
| 3 | 0,0152358 | 0,0148695 | 0,0134622 | 0,0094215 | 1,000050 |

В этом выражении знаменатель фиксирован вследствие нормировки источника деления, и перед началом следующей внешней итерации новый источник делений перенормируется на тот же уровень. Для сохранения соответствия все потоки также перенормируются (в этой, как и любой другой задаче на соб-

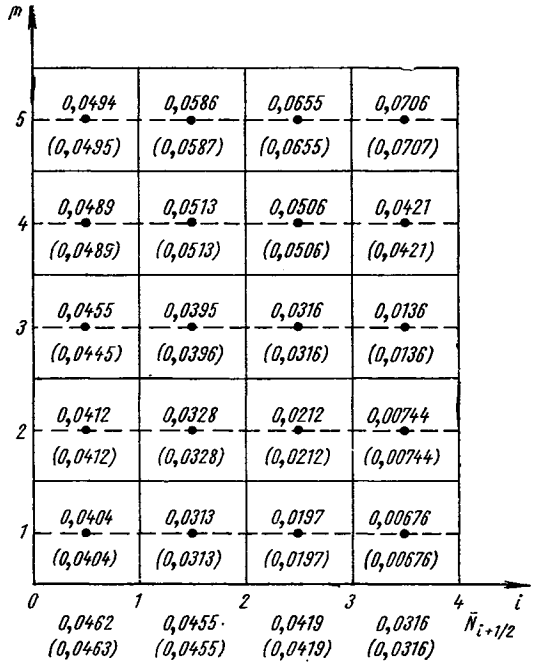


Рис. 3.7. Потоки первой группы (вторая и третья внутренние итерации).

ственные значения, амплитуда потока произвольна, а единичный источник деления выбирается просто из соображений удобства). Спектр деления также делится на λ перед началом итерации. В нашем случае λ меньше единицы, т. е. система подкритична. Цель деления спектра деления на λ состоит в увеличении нейтронного источника, чтобы обеспечить дополнительные нейтроны, необходимые для критичности.

Таблица 3.7

Результаты внешней итерации

| Номер итерации | Средний поток $\bar{N}_{i+1/2}$ | | | | | | | | Собственные значения |
|----------------|---------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|----------------------|
| | группа 1 | | | | группа 2 | | | | |
| | $i=0$ | $i=1$ | $i=2$ | $i=3$ | $i=0$ | $i=1$ | $i=2$ | $i=3$ | |
| 1 | 0,046255 | 0,045544 | 0,041882 | 0,031603 | 0,015236 | 0,014870 | 0,013147 | 0,009422 | 0,090193 |
| 2 | 0,054482 | 0,052780 | 0,045139 | 0,031148 | 0,017253 | 0,016646 | 0,014091 | 0,009606 | 0,095117 |
| 3 | 0,056497 | 0,054400 | 0,045713 | 0,031023 | 0,017719 | 0,017031 | 0,014269 | 0,009634 | 0,096074 |
| 4 | 0,056963 | 0,054761 | 0,045830 | 0,030994 | 0,017826 | 0,017118 | 0,014307 | 0,009640 | 0,096279 |
| 5 | 0,057071 | 0,054843 | 0,045856 | 0,030988 | 0,017850 | 0,017137 | 0,014315 | 0,009641 | 0,096324 |
| 6 | 0,057094 | 0,054860 | 0,045861 | 0,030986 | 0,017856 | 0,017142 | 0,014317 | 0,0096415 | 0,096334 |
| 7 | 0,057100 | 0,054865 | 0,045863 | 0,030986 | 0,017858 | 0,017143 | 0,014317 | 0,0096416 | 0,096338 |

После таких преобразований расчет проводится, как и в первой внешней итерации, за исключением того, что теперь потоки предыдущей итерации можно использовать для вычисления источника внутригруппового рассеяния. Для достижения сходимости задача потребовала 6 внешних и 27 внутренних итераций, после чего расчет был прекращен. В табл. 3.7 приведены значения потоков и собственного числа. Размеры рассчитанной системы были настолько малы, что большая часть нейтронов (94,12%) покидала сферу; следовательно, рассмотренная система является глубоко подкритической.

Почти все методы, описанные в этой главе, в настоящее время используются в программах одно- и двухмерного многогруппового решения уравнения переноса для ортогональных геометрий. Кроме того, с помощью таких программ можно решать и сопряженное уравнение переноса, что достигается транспонированием источников и сечений, входящих в обычный расчет.

§ 3.9. ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ — ИНТЕГРАЛЬНАЯ ТРАНСПОРТНАЯ ТЕОРИЯ

Если источники в системе изотропны и если представляет интерес только изотропная компонента углового потока, нецелесообразно сначала выполнять детальный расчет углового потока, а затем интегрировать его, чтобы получить изотропную компоненту. В этой ситуации оказывается возможным переформулировать уравнение переноса Больцмана в интегральное уравнение, которое можно решить сразу для изотропной компоненты углового потока. В более общем случае, когда источники не изотропны или когда необходимо знать другие компоненты углового потока, также можно воспользоваться интегральной формой уравнения переноса. Задача состоит в том, чтобы найти множество функций $K(\mathbf{r}', \mathbf{r})$, не зависящих от Ω , которые определяют вероятность нейтрону из точки \mathbf{r}' попасть в точку \mathbf{r} внутри системы. Эти функции затем используются как ядра интегральных уравнений, которые решаются относительно искомой величины. В некоторых элементарных задачах эти ядра можно задать аналитически, но в более общих ситуациях это неосуществимо. Однако можно, применяя метод дискретных ординат, рассчитать ядра $K(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ приближенно для достаточно общих случаев. В разд. 3.9.3 мы описываем схемы вычисления и использования таких ядер. Сначала рассматривается аналитическая форма инте-

грального уравнения переноса, чтобы сделать метод более наглядным и подчеркнуть его ограничения.

В разд. 3.9.1 выводится и обсуждается общее интегральное уравнение. В разд. 3.9.2 даются конкретные формы аналитического уравнения переноса и описываются свойства решений. И, наконец, в разд. 3.9.4 методы, описанные в разд. 3.9.3, применяются к численному решению задачи § 3.8.

3.9.1. Интегральная форма транспортного уравнения Больцмана. Используя равенство $\nabla \cdot \Omega \psi = \Omega \cdot \nabla \psi$, уравнение (3.1) можно переписать в следующем виде:

$$\Omega \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \Omega) + \Sigma_{tot, g} \psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = S_g(\mathbf{r}, \Omega), \quad (3.130)$$

где ψ_g — среднее по группе от $\psi(\mathbf{r}, v\Omega)$ и S_g — среднее от всех членов правой части уравнения (3.1). Именно, S_g содержит члены, которые как зависят от ψ , так и не зависят от него. Оператор $\Omega \cdot \nabla$ есть, по определению, производная по направлению Ω . Следовательно, уравнение (3.130) может быть записано

$$-\frac{d\psi_g(\mathbf{r}', \Omega)}{ds} + \Sigma_{tot, g}(\mathbf{r}') \psi_g(\mathbf{r}', \Omega) = S_g(\mathbf{r}', \Omega), \quad (3.131)$$

где $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s\Omega$ и $-d/ds$ — производная по направлению Ω . Уравнение (3.131) — линейное неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка, которое утверждает, что пространственный градиент функции ψ в направлении Ω есть разность между источниками S_g и потерями при столкновениях $\Sigma_{tot, g} \psi_g$. Уравнение может быть непосредственно проинтегрировано, в результате чего получится

$$\begin{aligned} \psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = & \psi_g(\mathbf{r} - s_0\Omega, \Omega) e^{-\int_0^{s_0} \Sigma_{tot, g}(\mathbf{r} - s'\Omega) ds'} + \\ & + \int_0^{s_0} S_g(\mathbf{r} - s'\Omega, \Omega) e^{-\int_0^{s'} \Sigma_{tot, g}(\mathbf{r} - s''\Omega) ds''} ds', \end{aligned} \quad (3.132)$$

где s_0 — расстояние от точки \mathbf{r} вдоль направления $-\Omega$ до границы системы. Функция $\psi_g(\mathbf{r} - s_0\Omega, \Omega)$ — поток на границе системы, который дает вклад в $\psi_g(\mathbf{r}, \Omega)$ после ослабления, пропорционального среднему безразмерному расстоянию от точки \mathbf{r} до границы вдоль направления Ω . Остающийся член в правой части уравнения (3.132) представляет сумму вкладов в $\psi_g(\mathbf{r}, \Omega)$ от источника, находящегося вдоль направления $-\Omega$ от точки \mathbf{r} до границы. Каждый из них экспоненциально ослабляется, причем фактор ослабления пропорционален среднему безразмерному расстоянию от точки расположения источника до точки s . Среднее безразмерное расстояние между двумя точками $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s'\Omega$ и $\mathbf{r}'' = \mathbf{r} - s''\Omega$ по определению равно

$$\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') = \left| \int_{s'}^{s''} \Sigma_{tot, g}(\mathbf{r} - s\Omega) ds \right|. \quad (3.133)$$

Его называют оптической длиной пути между \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' . Когда Σ_{tot} — константа, $\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') = \Sigma_{tot, g} |s'' - s'|$.

Если физическая система имеет выпуклую границу, т. е. каждая хорда, соединяющая все точки системы \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' , полностью лежит внутри системы, условие отсутствия потока извне внутрь имеет вид $\psi_g(\mathbf{r} - s_0\Omega, \Omega) = 0$. Если система не выпукла, то ее можно заключить в выпуклую границу и граничное условие отсутствия падающего извне потока можно применить к расширенной системе.

Используя отсутствие потока снаружи на выпуклой границе и полагая $S_g(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) = 0$ для $s' > s_0$, можно переписать уравнение (3.133) в следующем виде:

$$\psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_0^{\infty} S_g(\mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}) e^{-\int_0^{s'} \Sigma_{tot, g}(\mathbf{r} - s''\mathbf{\Omega}) ds''} ds'. \quad (3.134)$$

Уравнение (3.134) является основной интегральной формой уравнения переноса Больцмана. Оно определяет ψ_g с помощью линейного оператора, действующего на S_g , и ψ_g можно выразить через линейную комбинацию вкладов от отдельных членов или компонент S_g . Хотя сечение $\Sigma_{tot, g}$ предполагается постоянным для всех направлений, исключая, возможно, одно направление, не имеющее геометрической кривизны, не удастся значительно упростить уравнение (3.134).

3.9.2. Специфические формы интегрального уравнения переноса. В плоской геометрии $\mathbf{r} \rightarrow x$ и $\mathbf{\Omega} \rightarrow \mu$, так что $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - s'\mathbf{\Omega} \rightarrow x' = x - s'\mu$. После подстановки в уравнение (3.134) делается замена переменной интегрирования $s' \rightarrow x'$. Однако существуют только две комбинации, которые делают s' положительным: или $x > x'$, когда $\mu > 0$, или $x < x'$, когда $\mu < 0$. Изменяя переменные интегрирования в уравнении (3.134) с учетом этих ограничений, получим

$$\psi_g(x, \mu) = \begin{cases} \int_{-\infty}^x \frac{S_g(x', \mu) \exp\left[-\int_{x'}^x \Sigma_{tot, g}(x'') dx''/\mu\right]}{\mu} dx', & \mu > 0, \\ \int_x^{\infty} \frac{S_g(x', \mu) \exp\left[-\int_x^{x'} \Sigma_{tot, g}(x'') dx''/|\mu|\right]}{|\mu|} dx', & \mu < 0. \end{cases} \quad (3.135)$$

Эти уравнения отражают тот факт, что поток в точке x при $\mu > 0$ возникает от источника в точке $x' < x$, испускающего нейтроны в положительном μ -направлении, и что поток в точке x для $\mu < 0$ порождается источниками при $x' > x$, испускающими нейтроны в отрицательном μ -направлении.

Если источники $S_g(x', \mu)$ предполагаются не зависящими от μ , можно существенно упростить уравнения (3.135). Положив $S_g(x', \mu) = S_g(x')$, уравнение можно проинтегрировать по μ :

$$\begin{aligned} \bar{N}_g(x) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi_g(x, \mu) d\mu = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^x S_g(x') \int_0^1 \frac{e^{-\tau_g(x, x')/\mu}}{\mu} d\mu dx' + \\ &+ \frac{1}{2} \int_x^{\infty} S_g(x') \int_{-1}^0 \frac{e^{-\tau_g(x', x)/|\mu|}}{|\mu|} d\mu dx', \end{aligned} \quad (3.136)$$

где $\tau_g(x, x')$ — оптическая длина пути между x и x' , т. е.

$$\tau_g(x, x') = \left| \int_{x'}^x \Sigma_{tot, g}(x'') dx'' \right|. \quad (3.137)$$

После замены переменной интегрирования в интегралах по μ в правой части уравнения (3.136) последнее принимает вид

$$\bar{N}_g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} S_g(x') K_g(x, x') dx', \quad (3.138)$$

где

$$K_g(x, x') = \frac{1}{2} E_1[\tau_g(x, x')] \quad (3.139)$$

и $E_1(z)$ — интегральная показательная функция из семейства функций $E_n(z)$ [36], определенных следующим образом:

$$E_n(z) = \int_0^{\infty} t^{n-2} e^{-z/t} dt = \int_1^{\infty} t^{-n} e^{-zt} dt, \quad n=0, 1, 2 \dots \quad (3.140)$$

В уравнениях (3.138) и (3.139) групповая зависимость ядра K выражена значком g .

Уравнение (3.138) характеризуется важным и полезным свойством: решение для $\bar{N}_g(x)$ для плоского источника, расположенного при $x = b$, определяет ядро $K_g(x, b)$. Именно, если $S_g(x') = \delta(x' - b)$, то

$$\bar{N}_g(x) = K_g(x, b), \quad (3.141)$$

где K_g задается выражением (3.139). Это свойство является ключом к процессу численного расчета ядер интегральных уравнений (см. разд. 3.9.3).

Если источники не зависят от μ , многие практически интересные задачи могут быть записаны в форме интегрального уравнения с изотропной компонентой углового распределения в качестве неизвестной функции. Например, если $S_g(x)$ определяется изотропным делением и изотропным рассеянием, т. е.

$$S_g(x) = \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0gh}(x) \bar{N}_h(x) + \chi_g \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f, h}(x) \bar{N}_h(x), \quad (3.142)$$

уравнение переходит в систему связанных однородных интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \bar{N}_g(x) = \sum_{h=1}^G \int_{-\infty}^{\infty} [\Sigma_{s, 0gh}(x') + \chi_g \nu \Sigma_{f, h}(x')] \times \\ \times \bar{N}_h(x') K_g(x, x') dx', \quad g = 1, 2, \dots, G. \end{aligned} \quad (3.143)$$

Они могут быть решены без вычисления углового распределения. Даже если рассеяние не изотропно, можно использовать транспортное приближение (см. разд. 3.4.3).

Когда необходимо найти токовую, или линейно анизотропную компоненту,

$$I_g(x) = 1/2 \int_{-1}^1 \mu \psi_g(x, \mu) d\mu \quad (3.144)$$

интегральное уравнение для $I_g(x)$ можно получить, умножив уравнение (3.135) на μ и проинтегрировав результат по μ . Если S_g не зависит от μ , то

$$I_g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} S_g(x') K_g^I(x, x') dx', \quad (3.145)$$

где ядро имеет вид

$$K_g^I(x, x') = \begin{cases} \frac{1}{2} E_2[\tau_g(x, x')], & x > x' \\ -\frac{1}{2} E_2[\tau_g(x', x)], & x < x'. \end{cases} \quad (3.146)$$

Интересно заметить, что вклад $\bar{N}_g^I(x)$ в $\bar{N}_g(x)$ от линейной анизотропной компоненты источника $S_g(x, \mu) = \mu S_g^I(x)$ дается выражением

$$\bar{N}^I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} S_g^I(x') K_g^I(x, x') dx', \quad (3.147)$$

что получается из уравнения (3.135).

Следует заметить, что природа ядра, рассмотренного выше, зависит от трех факторов: 1) от номера группы, так как присутствует $\Sigma_{tot g}$; 2) от характера угловой зависимости источника и 3) от компоненты углового потока, которую нужно найти. Например, для решения уравнения (3.143) требуется G ядер, задаваемых соотношением (3.139). Для вычисления тока $I_g(x)$ необходимо знать G дополнительных ядер, данных уравнением (3.146), а если присутствует линейно анизотропный источник, нужно рассчитать еще G ядер, чтобы оценить вклад источника в величину тока I_g . Вообще говоря, в G -групповой задаче с источником, состоящим из T членов [источник вида $S = f(\mathbf{r}) g(\Omega)$], когда надо рассчитать C компонент углового потока, необходимо знать $G \times T \times C$ ядер.

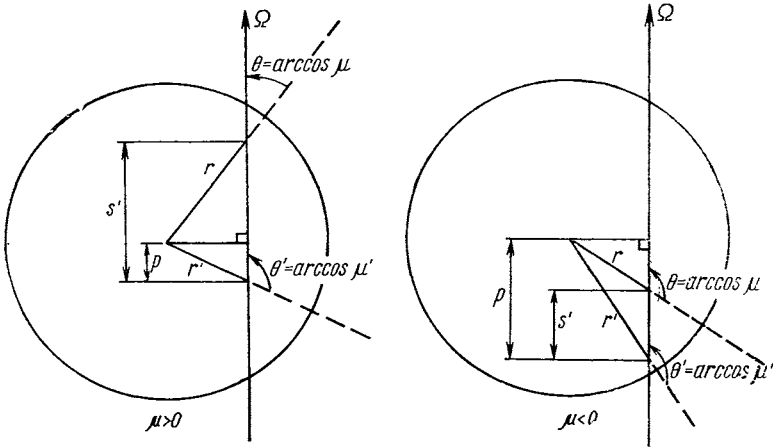


Рис. 3.8. Координаты в сферической геометрии.

Перед тем как перейти к численным оценкам ядер, исследуем интегральное уравнение переноса в сферической геометрии (рис. 3.8):

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} \text{ и } \Omega \rightarrow \mu; \quad \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' = (r')^2 = (\mathbf{r} - s' \Omega) \cdot (\mathbf{r} - s' \Omega) = r^2 + (s')^2 - 2s' \mu r, \text{ где } \Omega \mathbf{r} = r \mu.$$

Уравнение (3.134) в этом случае принимает вид

$$\Psi_g(r, \mu) = \int_0^\infty S_g(r', \mu') e^{-\int_0^{s'} \Sigma_{tot}(s'') ds''} ds', \quad (3.148)$$

где μ' — косинус угла между \mathbf{r}' и Ω . Так же как в схеме для плоской геометрии, переменная интегрирования в уравнении (3.148) изменяется от s' до r' . Как и в плоской геометрии, рассматриваются два случая: один для $\mu > 0$ и другой для $\mu < 0$. После замены переменной уравнение (3.148) примет вид

$$\left. \begin{aligned} \Psi_g(r, \mu) &= \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^r r' S_g(r', \mu') e^{-\tau(r, r')} dr' / p + \\ &+ \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^r r' S_g(r' - \mu') e^{-\tau[r, r(1-\mu^2)^{1/2}] - \tau[r', r(1-\mu^2)^{1/2}]} dr' / p + \\ &+ \int_r^\infty r' S_g(r', -\mu') e^{-2\tau[r, r(1-\mu^2)^{1/2}] - \tau(r', r)} dr' / p, \quad \mu > 0; \\ \Psi_g(r, \mu) &= \int_r^\infty r' S_g(r', -\mu') e^{-\tau(r', r)} dr' / p, \quad \mu < 0, \end{aligned} \right\} (3.149)$$

где

$$\tau(a, b) = \int_a^b u \Sigma_{tot, g}(u) du [u^2 - r^2(1 - \mu^2)]^{-1/2},$$

$$\rho = [r'^2 - r^2(1 - \mu^2)]^{1/2}.$$

В уравнении (3.149) ρ — расстояние, указанное на рис. 3.8, и $\mu' = \rho/r'$. Уравнение (3.149) значительно сложнее уравнения (3.135). Во-первых, угловая зависимость источника определяется косинусом μ' , который отличается от μ . Во-вторых, интегральные экспоненты включают зависящие от координат сечения и являются сложными функциями μ ; поэтому даже если источник не зависит от μ' , невозможно найти простое аналитическое выражение для ядра уравнения (3.149). Чтобы упростить уравнение (3.149), предполагают, что сечение $\Sigma_{tot, g}$ постоянно в пределах каждой группы. Тогда уравнение (3.149) можно записать следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \psi_g(r, \mu) = & \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^r r' S_g(r', \mu') e^{-(r\mu-p)\Sigma_{tot, g}} dr'/p + \\ & + \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^r r' S_g(r', -\mu') e^{-(r\mu+p)\Sigma_{tot, g}} dr'/p + \\ & + \int_r^\infty r' S_g(r', -\mu') e^{-(r\mu+p)\Sigma_{tot, g}} dr'/p, \quad \mu > 0, \\ \psi_g(r, \mu) = & \int_r^\infty r' S_g(r', -\mu') e^{-(r\mu+p)\Sigma_{tot, g}} dr'/p, \quad \mu < 0. \end{aligned} \right\} \quad (3.150)$$

Теперь, если задана угловая зависимость источника, интегральное уравнение для изотропной компоненты потока можно получить путем интегрирования уравнения (3.150) по μ . Для изотропного источника результат имеет вид

$$r \bar{N}_g(r) = \int_0^\infty r' S_g(r') K_g(r, r') dr', \quad (3.151)$$

где

$$K_g(r, r') = \begin{cases} \frac{1}{2} \{E_1[(r-r')\Sigma_{tot, g}] - E_1[(r+r')\Sigma_{tot, g}]\}, & r' < r, \\ \frac{1}{2} \{E_1[(r'-r)\Sigma_{tot, g}] - E_1[(r+r')\Sigma_{tot, g}]\}, & r' > r. \end{cases} \quad (3.152)$$

Можно также в случае изотропного источника написать интегральное уравнение для тока $I_g(r)$ с ядром, выраженным в достаточно простой форме. Однако ядро уравнения для расчета вклада линейно анизотропного источника, скажем $\mu' S_g^l(r')$, в изотропный поток не имеет такой же формы.

Некоторые полезные аналитические формы ядер для одномерных геометрий приведены в табл. 3.8. Заметим, что ядра для изотропного потока симметричны, т. е. $K(r, r') = K(r', r)$. Эта симметрия является выражением принципа взаимности: вероятность попасть из точки r' в точку r равна вероятности попасть из точки r в точку r' . Решения элементарных интегральных уравнений переноса приведены в табл. 3.9.

3.9.3. Численное решение интегрального уравнения переноса. Так как ядро интегрального уравнения определяется единичным точечным источником, численно ядра могут быть рассчитаны непосредственно на основе метода ди-

Ядра интегральных уравнений^а

| Геометрия | Область | $f(x)$ | Ядро | $g(x') dV(x')^6$ | Ограничение |
|-----------------------------|--------------------|--------------|---|-----------------------|------------------|
| Прямоугольная | $-a \leq x \leq a$ | $\bar{N}(x)$ | $\frac{1}{2} E_1(x-x')$ | $S(x') dx'$ | $S(x') = S(-x')$ |
| | $0 \leq x \leq a$ | $\bar{N}(x)$ | $\frac{1}{2} [E_1(x-x') + E_1(x+x')]$ | $S(x') dx'$ | |
| | $-a \leq x \leq a$ | $I(x)$ | $\frac{1}{2} E_2(x-x'), x' < x;$ $-\frac{1}{2} E_2(x'-x), x' > x$ | $S(x') dx'$ | |
| Сферическая | $0 \leq r \leq a$ | $\bar{N}(r)$ | $\frac{1}{8\pi r r'} [E_1(r-r') - E_1(r+r')]$ | $S(r') 4\pi r'^2 dr'$ | $S(r') = S(-r')$ |
| | $-a \leq r \leq a$ | $\bar{N}(r)$ | $\frac{1}{8\pi r r'} E_1(r-r')$ | $S(r') 4\pi r'^2 dr'$ | |
| | $0 \leq r \leq a$ | $\bar{N}(r)$ | $\frac{1}{4\pi r r'} \int_0^1 \exp(-r/\mu) \times$ $\times \text{sh}(r'/\mu) d\mu/\mu, r' < r;$ $\frac{1}{4\pi r r'} \int_0^1 \exp(-r'/\mu) \times$ $\times \text{sh}(r/\mu) d\mu/\mu, r' > r$ | $S(r') 4\pi r'^2 dr'$ | |
| Цилиндрическая ^в | $0 \leq r \leq a$ | $\bar{N}(r)$ | $\frac{1}{2\pi} \int_0^1 K_0(r/\mu) I_0(r'/\mu) d\mu/\mu^2,$ $r' < r;$ $\frac{1}{2\pi} \int_0^1 K_0(r'/\mu) I_0(r/\mu) d\mu/\mu^2,$ $r' > r$ | $S(r') 2\pi r' dr'$ | |

^а Данные для постоянных по объему сечений (расстояние измеряется в единицах длины свободного пробега).

^б Источники отнесены к Σ_{tot} , т. е. для источника деления $v\Sigma_f \bar{N} = v\Sigma_f \bar{N} / \Sigma_{tot}$.

^в K_0 и I_0 — модифицированные функции Бесселя.

скретных ординат. Например, как показано в предыдущем разделе, изотропная компонента потока от изотропного плоского источника при $x = b$ есть ядро задачи в плоской геометрии [см. уравнение (3.141)]. Если ту же самую задачу решать методами, изложенными в § 3.5, помещая точечный источник в пространственный интервал, соответствующий $x = b$ (и считая все другие источники равными нулю), результирующая изотропная компонента потока будет являться приближением для ядра задачи в плоской геометрии. Вычисленное ядро является приближенным потому, что источник не точно плоский вследствие дискретности пространственных и угловых квадратур, и потому, что разностные соотношения, используемые при решении уравнений дискретных ординат, являются приближенными.

Элементарные решения интегрального уравнения переноса^a

| Геометрия | Область | Источник | Решение \bar{N} | Вероятность соударений |
|--------------------|-------------------|--------------------------|---|---|
| Прямо- угольная | $0 \leq x \leq a$ | $1/a$ | $\frac{1}{a} - \frac{1}{2a} [E_2(a-x) + E_2(a+x)]$ | $1 - 1/4a + E_3(2a)/2a$ |
| | $0 \leq x \leq a$ | $\delta(x_0)$ | $\frac{1}{2} [E_1(x-x_0) + E_1(x+x_0)]$ | $1 - \frac{1}{2} [E_2(a-x_0) + E_2(a+x_0)]$ |
| Сферическая | $0 \leq r \leq a$ | $3/4\pi a^3$ | $\frac{3r}{4\pi} [2r - aE_2(a-r) + aE_2'(a+r) - E_3(a-r) + E_3(a+r)]/8\pi a^3$ | $1 - 3(2a^2 - 1)/8a^3 - 3(2a + 1) \exp(-2a)/8a^3$ |
| | $0 \leq r \leq a$ | $\delta(r_0)/4\pi r_0^2$ | $\frac{1}{8\pi r r_0} [E_1(r-r_0) - E_1(r+r_0)]$ | $1 - a [E_2(a-r_0) - E_2(a+r_0)]/2r_0 - [E_3(a-r_0) - E_3(a+r_0)]/2r_0$ |
| Цилиндрическая | $0 \leq r \leq a$ | $\delta(r_0)/2\pi r_0$ | $\frac{1}{2\pi} \int_0^1 K_0(r/\mu) I_0(r_0/\mu) d\mu/\mu^2,$ $r_0 < r;$ $\frac{1}{2\pi} \int_0^1 K_0(r_0/\mu) I_0(r/\mu) d\mu/\mu^2,$ $r_0 > r$ | [28] |

^a Расстояние измеряется в единицах длин свободного пробега $1/\Sigma_{tot}$.

В более специфических случаях схема численного расчета ядер выглядит следующим образом. Предположим, что одномерная система разделена на IM пространственных интервалов. Тогда IM отдельных задач решаются с изотропным источником уравнения (3.63):

$$V_{i-1/2} S_{i-1/2} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \quad j = 1, 2, \dots, IM. \end{cases} \quad (3.153)$$

Из угловых потоков, полученных в этих решениях, формируется изотропная компонента потока $\bar{N}_{i-1/2}^{j-1/2}$ (поток в i -м пространственном интервале от источника в j -м пространственном интервале). Эти потоки являются численной аппроксимацией ядра интегрального уравнения с изотропными источниками:

$$K_{ij} \equiv \bar{N}_{i-1/2}^{j-1/2} \approx K(r_{i-1/2}, r_{j-1/2}), \quad (3.154)$$

$$i = 1, 2, \dots, IM, \quad j = 1, 2, \dots, IM.$$

Одновременно с расчетом этого ядра могут быть вычислены и ядра для вклада изотропных источников в высшие угловые моменты потока. Например, ядро для вычисления тока есть $I_{i-1/2}^{j-1/2}$, где токи являются линейно анизотропными компонентами углового потока, получающегося из решения IM задач с источником уравнения (3.153).

Если рассматривается G -групповая задача, то нужно определить G ядер вида (3.154) путем решения $IM \times G$ задач с единичными источниками.

Как только эти ядра определены, их можно использовать для любого типа задач с изотропным источником. Например, с источником, аналогичным источнику уравнения (3.142),

$$V_{i-1/2} S_{g, i-1/2} = V_{i-1/2} \sum_{h=1}^G (\Sigma_{s, 0gh} + \chi_{g, h} \nu \Sigma_{f, h}) \bar{N}_{h, i-1/2} \quad (3.155)$$

следует решить задачу

$$\bar{N}_{g, i-1/2} = \sum_{j=1}^{IM} K_{ijg} V_{-1/2} S_{g, j-1/2}, \quad (3.156)$$

$$i = 1, 2, \dots, IM, \quad g = 1, 2, \dots, G,$$

аналогичную (3.143). Так как источник уравнения (3.155) зависит от \bar{N} , уравнение (3.156) должно быть решено итерациями или, если IM и G достаточно малы, обращением матрицы. Если требуется итерационное решение, можно использовать внешние итерации, описанные в разд. 3.7.2. В этом примере решение с использованием интегральной формы уравнения переноса имеет два важных преимущества по сравнению с прямым решением методами, описанными в § 3.5. Во-первых, в задачах для вычисления ядер используется единственный источник, который не зависит от потока, и в каждой группе нужна только одна внутренняя итерация (см. разд. 3.7.1) для получения K_{ijg} и, даже если требуется внешняя итерация, чтобы решить уравнение (3.156), то внутренняя итерация отсутствует. Наоборот, прямое решение может потребовать несколько внутренних итераций в каждой группе для каждой внешней итерации. Во-вторых, ядра K_{ijg} , однажды вычисленные, могут использоваться в любой задаче с изотропным источником, имеющей такую же геометрическую конфигурацию и те же самые граничные условия.

В более общих задачах, чем рассмотренная выше, для вычисления необходимых ядер требуется проведение $G \times T \times IM \times JM \times KM$ внутренних итераций.

Полезная разновидность метода, описанного выше, состоит в вычислении ядер, которые включают эффекты внутригруппового рассеяния. Именно, при вычислении ядер к единичному источнику добавляется источник внутригруппового рассеяния. Такие задачи требуют проведения внутренней итерации, но имеют то преимущество, что результирующие ядра сохраняют баланс нейтронов (во всей системе) вследствие нормировки, осуществляемой во внутренней итерации (см. разд. 3.7.1).

Если в системе присутствует малое число источников, то использование интегральной формы уравнения является мощным и эффективным методом решения задач переноса. В рамках интегральной формулировки метод дискретных ординат обеспечивает реальную возможность численного расчета ядер в очень сложных задачах. Даже в многомерных системах с сечениями, зависящими от координат, или неявными граничными условиями метод дискретных ординат может обеспечить вычисление необходимых ядер.

3.9.4. Пример численного решения интегрального уравнения переноса. В задаче, рассмотренной в § 3.8, источник первой группы в первой внутренней итерации равен

$$V_{i-1/2} S_{i-1/2} = 0,9V_{i-1/2} / \sum_{i=1}^4 V_{i-1/2}.$$

Изотропная компонента потока, обусловленная этим источником, имеет вид

$$\bar{N}_{i-1/2} = \sum_{j=1}^4 K_{ji} \left(0,9V_{j-1/2} / \sum_{i=1}^4 V_{i-1/2} \right), \quad (3.157)$$

где K_{ij} — матрица потоков, образованная решением четырех задач с единичными изотропными источниками:

$$K_{ij} = \begin{pmatrix} j=1 & j=2 & j=3 & j=4 \\ i=1 & 0,66923 & 0,13121 & 0,03821 & 0,01881 \\ i=2 & 0,18498 & 0,14948 & 0,05123 & 0,01885 \\ i=3 & 0,04978 & 0,06018 & 0,06292 & 0,02755 \\ i=4 & 0,02087 & 0,02272 & 0,03240 & 0,03426 \end{pmatrix} \quad (3.158)$$

Выполняя суммирование в уравнении (3.157), найдем, что изотропный поток есть

$$\bar{N}_{i-1/2} \begin{matrix} i=1 & i=2 & i=3 & i=4 \\ 0,0423 & 0,0408 & 0,0378 & 0,0290 \end{matrix} \quad (3.159)$$

Эти потоки должны быть сравнимы с изотропными потоками, приведенными на рис. 3.6. Однако пространственная сетка в рассмотренном примере была такой грубой, что в трех задачах с единичными источниками потребовалась коррекция отрицательных потоков (см. разд. 3.6.2), в то время как в примере § 3.8 с более равномерно распределенным источником такой коррекции не понадобилось. Ясно, что матрица уравнения (3.158) несимметрична, т. е. $K_{ij} \neq K_{ji}$. Наибольшее расхождение наблюдается для $i=2$ и $j=1$, когда единичный источник находится в первом пространственном интервале и когда поток уменьшается очень быстро при переходе от одного интервала к соседнему. Отсутствие симметрии обусловлено частично использованием коррекции отрицательных потоков в различных интервалах для различных положений единичного источника. В общем случае матрица несимметрична, так как она характеризует в среднем перенос (в криволинейной геометрии) из ячейки в ячейку в большей степени, чем от точки к точке. При измельчении квадратурных сеток численные ядра становятся более симметричными.

Если в задачу с единичным источником в первой группе входит источник внутрigrуппового рассеяния и если выполнена внутренняя итерация, то все еще требуется некоторая коррекция отрицательных потоков. При подстановке полученной матрицы в уравнение (3.157) оказывается, что величины

$$\bar{N}_{i-1/2} \begin{matrix} i=1 & i=2 & i=3 & i=4 \\ 0,0462 & 0,0446 & 0,0412 & 0,0315 \end{matrix} \quad (3.160)$$

находятся в разумном согласии с изотропными потоками, приведенными на рис. 3.7. Эти результаты показывают, что для вычисления потоков в задачах с единичными источниками может потребоваться более мелкое пространственное разбиение (например, для определения скорости изменения потока вблизи источника), чем при прямом решении. Приведенные выше примеры являются очень элементарными, но методы этого раздела могут быть легко распространены и на более сложные задачи.

§ 3.10. ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ — СОПРЯЖЕННОЕ УРАВНЕНИЕ ПЕРЕНОСА

В дополнение к решению прямого уравнения переноса часто оказывается полезным решить уравнение, сопряженное ему. Решение сопряженного уравнения находит применение в расчетах по теории возмущений, при усреднении сечений и т. д. [17].

В разд. 3.10.1 определяется сопряженное уравнение переноса и выявляются некоторые фундаментальные свойства этого уравнения. Эти свойства используются как основа для решения сопряженного уравнения такими же методами дискретных ординат, которые применялись ранее для решения прямого уравнения. В разд. 3.10.2 исследуется сопряженное уравнение переноса в форме

дискретных ординат, чтобы выяснить, сопряжено ли оно прямому уравнению дискретных ординат. В этой связи интересно выяснить, имеют ли прямое и сопряженное уравнения дискретных ординат одинаковые собственные числа, что является важным свойством аналитической формы уравнения переноса.

3.10.1. Численное решение сопряженного уравнения переноса. При дальнейшем изложении мы ограничимся рассмотрением стационарного уравнения переноса, для которого отыскивается критическое собственное значение. Уравнение (3.1) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \nu \Omega) + \Sigma_{tot} \psi(\mathbf{r}, \nu \Omega) = \int_{\nu'} \int_{\Omega'} \psi(\mathbf{r}, \nu' \Omega') \Sigma_s(\nu' \Omega' \rightarrow \nu \Omega) d\nu' d\Omega' + \\ + \frac{\chi(\nu)}{k} \int_{\nu'} \int_{\Omega'} \nu \Sigma_f(\nu') \psi(\mathbf{r}, \nu' \Omega') d\nu' d\Omega'. \end{aligned} \quad (3.161)$$

В это уравнение входят член источника рассеяния и член изотропного деления со спектром χ . Критическое собственное значение обозначено k . Уравнение, сопряженное этому уравнению, имеет вид

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \Omega \psi^*(\mathbf{r}, \nu \Omega) + \Sigma_{tot} \psi^*(\mathbf{r}, \nu \Omega) = \int_{\nu'} \int_{\Omega'} \psi^*(\mathbf{r}, \nu' \Omega') \Sigma_s(\nu \Omega \rightarrow \nu' \Omega') d\nu' d\Omega' + \\ + \frac{\nu \Sigma_f(\nu)}{k^*} \int_{\nu'} \int_{\Omega'} \chi(\nu') \psi^*(\mathbf{r}, \nu' \Omega') d\nu' d\Omega'. \end{aligned} \quad (3.162)$$

Формально это уравнение отличается от уравнения (3.161) знаком у оператора дивергенции и транспозицией переменных интегрирования в индикатрисе рассеяния. Прямое и сопряженное уравнения с учетом граничных условий определены таким образом, что собственные функции их ортогональны, а собственные значения одинаковы. Эти свойства уравнений (3.161) и (3.162) можно показать следующим простым способом (который также может быть применен к другим типам задач на собственные значения). Пусть ψ_i и k_i — i -е собственная функция и собственное значение прямого уравнения и пусть ψ_j^* и k_j^* — j -е собственная функция и собственное значение сопряженного уравнения. Если уравнение (3.162) умножить на ψ_i , затем вычесть из уравнения (3.161), умноженного на ψ_j^* , и результат проинтегрировать по всему фазовому объему, получится соотношение ортогональности, уничтожающее все члены, кроме тех, которые содержат k_i и k_j^* . Рассмотрим этот процесс подробнее. Член, который получится в правой части результирующего уравнения (включающий рассеяние), имеет вид

$$\begin{aligned} \int_{\nu} \int_{\Omega} \int_V \psi_j^*(\mathbf{r}, \nu \Omega) \left[\int_{\nu'} \int_{\Omega'} \psi_i(\mathbf{r}, \nu' \Omega') \Sigma_s(\nu' \Omega' \rightarrow \nu \Omega) d\nu' d\Omega' \right] d\nu d\Omega dV - \\ - \int_{\nu} \int_{\Omega} \int_V \psi_i(\mathbf{r}, \nu \Omega) \left[\int_{\nu'} \int_{\Omega'} \psi_j^*(\mathbf{r}, \nu' \Omega') \Sigma_s(\nu \Omega \rightarrow \nu' \Omega') d\nu' d\Omega' \right] d\nu d\Omega dV, \end{aligned} \quad (3.163)$$

и можно показать, что он обращается в нуль. Член с Σ_{tot} в левой части уравнения также исчезает. Члены, включающие операторы дивергенции, имеют следующий вид:

$$\int_{\nu} \int_{\Omega} \int_V [\psi_j^* \nabla \cdot (\Omega \psi_i) + \psi_i \nabla \cdot (\Omega \psi_j^*)] d\nu d\Omega dV. \quad (3.164)$$

Преобразуем их к виду

$$\int_A \int_{\nu} \int_{\Omega} (\psi_i \psi_j^*) (\Omega \cdot \mathbf{n}) dA d\nu d\Omega, \quad (3.165)$$

где dA — элемент поверхности рассматриваемого объема и \mathbf{n} — внешняя нормаль к этой поверхности.

Обычное граничное условие для потока нейтронов состоит в том, что $\psi_i(\mathbf{r}, v\Omega) = 0$ при $\Omega \cdot \mathbf{n} < 0$ (направления внутрь) для \mathbf{r} , лежащих на поверхности. Если положить $\psi_j^*(\mathbf{r}, v\Omega) = 0$ при $\Omega \cdot \mathbf{n} > 0$ (направления наружу), то интеграл (3.165) уничтожается*. С учетом этого результат объединения прямого и сопряженного уравнений будет следующий:

$$\begin{aligned} & \int_V \int_{v\Omega} \psi_j^*(\mathbf{r}, v\Omega) \frac{\chi(v)}{k_i} \left[\int_{v'\Omega'} v \Sigma_f(v') \psi_i(\mathbf{r}, v'\Omega') dv' d\Omega' \right] dv d\Omega dV - \\ & - \int_V \int_{v\Omega} \psi_i(\mathbf{r}, v\Omega) \frac{v \Sigma_f(v)}{k_j^*} \left[\int_{v'\Omega'} \chi(v') \psi_j^*(\mathbf{r}, v'\Omega') dv' d\Omega' \right] dv d\Omega dV = 0. \end{aligned} \quad (3.166)$$

Меняя порядок интегрирования, получаем

$$\left(\frac{1}{k_i} - \frac{1}{k_j^*} \right) \int_V \int_{v\Omega} \bar{\psi}_j^*(\mathbf{r}, v) \chi(v) \left[\int_{v'\Omega'} v \Sigma_f(v') \bar{\psi}_i(\mathbf{r}, v') dv' \right] dv dV = 0, \quad (3.167)$$

где $\bar{\psi}(\mathbf{r}, v)$ есть интеграл по Ω от функции $\psi(\mathbf{r}, v\Omega)$. Последнее упрощение оказалось возможным ввиду предположения об изотропности источника деления. Равенство (3.167) является соотношением ортогональности. Его существование зависит от граничных условий, выбранных так, чтобы уничтожить выражение (3.165). Далее, если ψ_j^* или ψ_i образуют полный набор (как это разумно ожидать, если система конечна), то собственные значения k_j^* принадлежат тому же набору, что и k_i [3]. Например, если ψ_i образует полный набор и если $k_j^* \neq k_i$, функция ψ_j^* ортогональна всем ψ_i и, следовательно, равна нулю. Это противоречит утверждению, что она является собственной функцией [3]. В разд. 3.10.2 делается попытка установить соотношение (3.167) для прямого и сопряженного уравнений, записанных в форме дискретных ординат.

При определении сопряженного уравнения (3.162) было введено предположение о характере источника деления. Если индикатриса рассеяния имеет вид $\Sigma_s(v'\Omega' \rightarrow v\Omega) = \Sigma_s(v' \rightarrow v, \Omega'\Omega)$, можно сделать существенные упрощения. Заменяя в прямом уравнении (3.162) Ω на $-\Omega$, получим

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, -v\Omega) + \Sigma_{tot} \psi(\mathbf{r}, -v\Omega) = \\ & = \int_{v'\Omega'} \psi(\mathbf{r}, -v'\Omega') \Sigma_s(v' \rightarrow v, \Omega'\Omega) dv' d\Omega' + \\ & + \frac{\chi(v)}{k} \int_{v'\Omega'} v \Sigma_f(v') \psi(\mathbf{r}, -v'\Omega') dv' d\Omega'. \end{aligned} \quad (3.168)$$

Тогда, если в этом уравнении $\Sigma_s(v' \rightarrow v, \Omega'\Omega)$ заменить на $\Sigma_s(v \rightarrow v', \Omega\Omega')$ и транспонировать переменные в члене источника делений, как в сопряженном уравнении, то $\psi(\mathbf{r}, -v\Omega)$ можно интерпретировать как $\psi^*(\mathbf{r}, v\Omega)$ (обе удовлетворяют одному и тому же уравнению). Наконец, потребовав, чтобы функция $\psi(\mathbf{r}, -v\Omega)$ обращалась в нуль для направлений $\Omega \mathbf{n} < 0$ на границах, получим то же требование, что и обращение в нуль на границе функции $\psi^*(\mathbf{r}, v\Omega)$ для $\Omega \mathbf{n} > 0$. Это показывает, что если источник деления изотропен и если индикатриса рассеяния удовлетворяет соотношению (3.29), можно, транспонировав

* Полезно оценить выражение (3.165) для одномерной сферической геометрии. Записывая $\nabla \cdot \Omega \psi = \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{(1-\mu^2)}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \mu}$, преобразуем выражение (3.164) к виду

$$8\pi^2 \iiint dv d\mu r^2 dr \left[\mu \frac{\partial (\psi_j^* \psi_i)}{\partial r} + \frac{(1-\mu^2)}{r} \frac{\partial (\psi_j^* \psi_i)}{\partial \mu} \right].$$

Интегрируя по частям первый член по r , а второй по μ , получаем

$$8\pi^2 \iint dv d\mu [\mu r^2 \psi_j^* \psi_i]_{r=0}^r + 8\pi^2 \iint dv dr [(1-\mu^2) \psi_j^* \psi_i]_{\mu=-1}^{\mu=+1}.$$

Второй член равен нулю на концах интервала μ , первый член тоже исчезает, так как $\psi_j^* = 0$ при $\mu > 0$ и $\psi_i = 0$ при $\mu < 0$, если $r = a$.

источник, решить прямое уравнение переноса для $\psi(\mathbf{r}, v\Omega)$ и тем самым рассчитать функцию $\psi^*(\mathbf{r}, -v\Omega)$. Таким образом, методы дискретных ординат примененные к решению прямого уравнения переноса, могут быть использованы для получения решений сопряженного уравнения.

Итак, схема включает три шага. На первом шаге матрица рассеяния $\Sigma_{s, lgh}$ в выражении (3.30) заменяется транспонированной. На втором шаге источник деления (3.26) заменяется источником нейтронов деления

$$(\text{Источник нейтронов деления})_g = v \sum_{f, g} \sum_{h=1}^G \chi_h \bar{N}_h. \quad (3.169)$$

На третьем шаге прямое уравнение переноса решается методом дискретных ординат и решение $N_{g, m}$ для Ω_m интерпретируется, как $N_{g, m}^*$ для $-\Omega_m$.

Практически эта схема сопровождается переменной порядка расчета по энергетическим группам. Другими словами, транспонирование матрицы рассеяния переводит задачу с рассеянием вниз в задачу с рассеянием вверх. Для сохранения обычной схемы изменяют и порядок счета.

3.10.2. Сопряженность уравнения переноса в форме дискретных ординат. Желательно, чтобы дискретная форма сопряженного и прямого уравнений переноса удовлетворяли тем же соотношениям ортогональности, что и аналитические формы. Этот вопрос исследуется путем выполнения таких же операций с дискретными формами уравнений, что и с аналитическими формами, рассмотренными в предыдущем разделе. Все существенные выкладки выполнены в одномерной криволинейной геометрии и, как мы увидим, возникающие трудности обуславливаются членом, связанным с кривизной. Одномерный дискретный аналог уравнения (3.161) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} + \Sigma \omega V N = \\ = \omega V \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0gh} \bar{N}_h + \frac{\omega V \chi_{g, g}}{k} \sum_{h=1}^G v \Sigma_{f, h} N_h, \end{aligned} \quad (3.170)$$

где для простоты рассеяние предполагается изотропным. Сопряженные дискретные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} -\omega \mu (A_{i+1} N_{i+1}^* - A_i N_i^*) - \alpha_{m+1/2} N_{m+1/2}^* + \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2}^* + \Sigma \omega V N^* = \\ = \omega V \sum_{h=1}^G \Sigma_{s, 0hg} \bar{N}_h^* + \frac{\omega V v \Sigma_{f, g}}{k^*} \sum_{h=1}^G \chi_h \bar{N}_h^*. \end{aligned} \quad (3.171)$$

Здесь наборы направлений (ω_m, μ_m) приняты такими же, как и в прямом уравнении (3.170). Если используется эта форма сопряженного уравнения, то все свойства коэффициентов кривизны прямого уравнения сохраняются и в сопряженном уравнении. Когда уравнение (3.171) суммируется по m , члены кривизны пропадают, так как первое и последнее значения α равны нулю. Таким образом, получается уравнение баланса для N^* . В пределе малых интервалов члены утечки в уравнении (3.171) переходят в аналитическую форму, так же как было в случае прямого уравнения. Наконец, когда член $\Sigma \omega V N^*$ равен источнику в правой части уравнения (3.171), получается соотношение (3.13).

Теперь, чтобы определить, выполняется ли соотношение ортогональности, уравнение (3.171) умножим на N и вычтем из уравнения (3.170), умноженного на N^* . Результат затем просуммируем по всем i, m и g . Так как веса скорости включены в определение N , это аналогично интегрированию по пространству, направлениям и скоростям. Члены рассеяния дают

$$\sum_i V_i \left[\sum_g \bar{N}_g^* \sum_h \Sigma_{s, 0gh} \bar{N}_h - \sum_g \bar{N}_g \sum_h \Sigma_{s, 0hg} \bar{N}_h^* \right] = 0 \quad (3.172)$$

в точной аналогии с (3.166), за исключением того, что предположение об изотропности рассеяния позволяет сумму по направлениям выразить через \bar{N} .

Члены, включающие макроскопическое сечение, также уничтожаются. Члены источника делений дают

$$\left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k^*}\right) \sum_i V_i \sum_g \chi_g \bar{N}_g^* \sum_h \nu \Sigma_{f,h} \bar{N}_h \quad (3.173)$$

по аналогии с (3.167). Таким образом, этот член равен результату объединения членов утечки прямого и сопряженного уравнений.

Первый из них имеет вид

$$\sum_g \sum_i \sum_m \omega \mu A_{i+1} (N^* N_{i+1} + N N_{i+1}^*) - \omega \mu A_i (N^* N_i + N N_i^*). \quad (3.174)$$

Используя разностные соотношения схемы алмаза $2N = N_{i+1} + N_i$ и $2N^* = N_{i+1}^* + N_i^*$ (которые применяются при решении дискретных уравнений и тождество

$$\begin{aligned} \frac{N_{i+1}^* + N_i^*}{2} (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) &= A_{i+1} N_{i+1} N_{i+1}^* - \\ &- A_i N_i N_i^* - (A_{i+1} N_{i+1} + A_i N_i) \frac{N_{i+1}^* - N_i^*}{2}, \end{aligned} \quad (3.175)$$

уравнение (3.174) запишем в виде

$$\begin{aligned} \sum_g \sum_i \sum_m \omega \mu \left[A_{i+1} N_{i+1} N_{i+1}^* - A_i N_i N_i^* + \right. \\ \left. + \frac{(A_{i+1} - A_i)}{2} (N_i N_{i+1}^* + N_{i+1} N_i^*) \right]. \end{aligned} \quad (3.176)$$

Если граничные условия таковы, что N исчезает для направлений внутрь и N^* исчезает для направлений наружу на границе, сумма по i первых двух членов выражения (3.176) равна нулю для каждой группы. Член утечки, содержащий α , выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_g \sum_i \sum_m \alpha_{m+1/2} (N^* N_{m+1/2} + N N_{m+1/2}^*) - \\ - \alpha_{m-1/2} (N^* N_{m-1/2} + N N_{m-1/2}^*). \end{aligned} \quad (3.177)$$

Снова, используя разностные соотношения $N_{m+1/2} + N_{m-1/2} = 2N$ и $N_{m+1/2}^* + N_{m-1/2}^* = 2N^*$ и тождество, подобное выражению (3.175), формулу (3.177) можно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} \sum_g \sum_i \sum_m \alpha_{m+1/2} N_{m+1/2} N_{m+1/2}^* - \alpha_{m-1/2} N_{m-1/2} N_{m-1/2}^* + \\ + \frac{\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}}{2} (N_{m-1/2} N_{m+1/2}^* + N_{m+1/2} N_{m-1/2}^*). \end{aligned} \quad (3.178)$$

Сумма по m первых двух членов этого выражения исчезает для всех i и g , поскольку первое и последнее значения α равны нулю. Тогда с учетом того, что $\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} = -\omega \mu (A_{i+1} - A_i)$, неуничтожающиеся члены этого уравнения могут быть объединены с членами, оставшимися в выражении (3.176). В результате получим

$$\begin{aligned} \sum_g \sum_i \sum_m \omega \mu \frac{A_{i+1} - A_i}{2} [N_i N_{i+1}^* + N_{i+1} N_i^* - N_{m-1/2} N_{m+1/2}^* - \\ - N_{m+1/2} N_{m-1/2}^*] = \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k^*}\right) \sum_i V_i \sum_g \chi_g \bar{N}_g^* \sum_h \nu \Sigma_{f,h} \bar{N}_h. \end{aligned} \quad (3.179)$$

Для выполнения условия ортогональности член в левой части должен уничтожиться. Действительно, в некриволинейной геометрии $A_{i+1} \equiv A_i$ и этот член исчезает (и поэтому собственные значения, скажем k_0^* и k_0 , равны). Однако не удастся показать, что в общем случае криволинейной геометрии выражение (3.179) равно нулю. В одногрупповых задачах, где N_m идентифицируется с N_m^* для $-\Omega_m$, левая часть соотношения (3.179) исчезает, если набор направлений симметричен*. В общем же случае соотношение ортогональности не выполняется. Тогда соотношение (3.179) служит мерой разницы между k и k^* , которая может стать меньше, чем любое заданное ε при дроблении пространственной и временной сетки. Количественно левая часть соотношений (3.179) должна быть мала даже в криволинейных геометриях, так как для больших значений i $A_{i+1} \approx A_i$, а для малых i потоки, вообще говоря, изотропны по углам. Некоторое представление о величине левой части уравнения (3.179) можно получить, если положить

$$N_{m \pm 1/2} = N \pm \frac{\Delta\mu}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mu}, \quad N_{i+1/2 \pm 1/2} = N \pm \frac{\Delta r}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial r} \quad (3.180)$$

и аналогично для сопряженных потоков. В этом приближении получим

$$\begin{aligned} N_{i+1} N_i^* + N_i N_{i+1}^* - N_{m+1/2} N_{m-1/2}^* - N_{m-1/2} N_{m+1/2}^* = \\ = \frac{(\Delta\mu)^2}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mu} \cdot \frac{\partial N^*}{\partial \mu} - \frac{(\Delta r)^2}{2} \cdot \frac{\partial N}{\partial r} \cdot \frac{\partial N^*}{\partial r}. \end{aligned} \quad (3.181)$$

Таким образом, если потоки на границе и в центре ячейки соотносятся как $O(\Delta)$, то левая часть соотношения (3.179) является величиной порядка $O(\Delta^2)$, если не учитывать разности $A_{i+1} - A_i$.

Численный пример показывает, что левая часть соотношения (3.179) обычно мала. Так, в шестигрупповой сферической задаче, описанной в § 3.3, расчет сопряженного потока был проведен с $n=16$ и 80 пространственными узлами. Было получено собственное значение сопряженного уравнения 0,99667424. Как видно из табл. 3.3, при тех же условиях собственное значение прямой задачи составляет 0,99667426. Следовательно, разница есть $2 \cdot 10^{-8}$. В этой же задаче, но с очень грубой квадратурой $n=2$ и пятью пространственными узлами разница между собственными значениями составляла всего $5 \cdot 10^{-7}$. Хотелось бы отметить, что при сравнении многогрупповых прямых и сопряженных расчетов нужно использовать критерий сходимости (3.113), так как свойства сходимости обоих решений могут сильно различаться. В приведенных примерах была использована точность $\varepsilon = 10^{-6}$.

§ 3.11. НЕРЕШЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МЕТОДА ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ

В этой главе был рассмотрен обширный круг вопросов, но все еще остается много нерешенных проблем, связанных с методом дискретных ординат. Некоторые из проблем имеют аналитическую природу, другие связаны с минимизацией расчетного времени, требуемого для решения уравнений дискретных ординат. В данном параграфе мы коснемся некоторых из указанных проблем (не в порядке их важности).

Главный вопрос — сходится ли итерационный процесс решения уравнения дискретных ординат к решению аналитического уравнения переноса? Эмпирический ответ на поставленный вопрос положителен, но можно ли этот ответ получить аналитически? И если это может быть доказано, можно ли оценить ошибку при использовании угловых и пространственных квадратур? Более частный вопрос — вопрос о сходимости итерационного процесса решения. Напрямую, можно показать, что внутренний итерационный процесс всегда схо-

* Это можно показать для плоского слоя и для сферы, положив $m = 1, 2, \dots, n$, n — четное число. Тогда при $w_m = w_{n+1-m}$ и $\mu_m = -\mu_{n+1-m}$, например, $N_{i,m}^+ = N_{i,n+1-m}$. Если сумма по m распадается на две части, одна от 1 до $n/2$ и другая от $n/2 + 1$ до n , вторая половина суммы уничтожает первую.

дится (без нормировки) в плоском однородном слое с равномерной пространственной сеткой Δx и «вакуумными» граничными условиями, если $\sum_{tot} \Delta x / 2 < |\mu_m|$ для всех m . Но это очень частный результат, полученный для элементарной задачи. Можно ли сделать более общие выводы для более общих случаев? Можно ли установить скорость сходимости для процессов внутренних и внешних итераций? Возможно, что исследования этих вопросов приведут к новым способам ускорения сходимости. Для ускорения внешних итераций были использованы некоторые приемы, но остается необходимость в теоретическом рассмотрении проблемы сходимости. Это может дать новые схемы решения. Заслуживает рассмотрения вопрос об оптимизации выбора квадратурных наборов, особенно при решении двух- и трехмерных задач.

Более узкий вопрос — вопрос об использовании разностных соотношений. Существует ли набор разностных соотношений, которые относительно просты при использовании, как разностные соотношения схемы алмаза, но являются более точными? Существует ли набор разностных соотношений, которые дают разностные сопряженные уравнения дискретных ординат в криволинейных геометриях?

Как было указано в разд. 3.5.4, перенормировку в процессе внутренних итераций можно исключить, если пользоваться разностными соотношениями, удовлетворяющими условию баланса нейтронов. В создаваемых программах решения уравнения переноса можно использовать эти или подобные принципы решения общих уравнений дискретных ординат, чтобы ускорить сходимость и исключить перенормировку. В двух- и трехмерных задачах существует много отдельных направлений с нулевыми весами. Вычисление потоков в этих направлениях, как и в других, требует больших затрат времени. Нельзя ли исключить из расчета эти направления без слишком сильного ухудшения точности? Предварительные численные эксперименты для сферы показывают, что такая возможность в принципе не исключена.

Если решаются уравнения для моментов, проблема отдельных направлений не возникает. Может быть, допускается решение уравнений для моментов вместо решения уравнений дискретных ординат. Предварительные оценки показывают, что решение уравнений для моментов (см. разд. 3.2.1) требует больше усилий, чем решение уравнений дискретных ординат, но численных экспериментов не проводилось. Некоторые апробированные схемы решения уравнений для моментов приведены в работе [14].

Все, о чем здесь говорилось, является перечнем вопросов без ответа, относящихся к методу дискретных ординат. При рассмотрении более трудных задач (таких, как проблема переноса фотонов в среде, температура которой зависит от распределения фотонов) возникнут дополнительные вопросы, и потребуются продолжительные как теоретические, так и численные исследования для их разрешения.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- $\psi(\mathbf{r}, v\Omega, t)$ — поток нейтронов, т. е. число нейтронов в единице объема около точки \mathbf{r} в момент времени t , имеющих скорость $v\Omega$ в единице телесного угла
- $\psi^*(\mathbf{r}, v\Omega, t)$ — функция, сопряженная $\psi(\mathbf{r}, v\Omega, t)$
- $V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}$ — объем пространственной ячейки в точке $i+1/2, j+1/2, k+1/2$
- $A_{i, j+1/2, k+1/2}$ — элемент площади i -поверхности пространственной ячейки. Подобные обозначения используются для j - и k -поверхностей
- $x_{i+1} - x_i = \Delta x$ — длина i -го ребра ячейки пространственной сетки. Подобное обозначение используется для длин j - и k -ребер, а также для временного интервала и для ширины интервала скорости
- A_i — сокращенное обозначение $A_{i, j+1/2, k+1/2}$
- \bar{A} — по определению $\bar{A} = A_{i+1} + A_i$. Подобное обозначение используется для j - и k -направлений

- Ω_m — вектор, связанный с поверхностью единичной сферы направлений с компонентами μ_m, η_m, ξ_m
 w_m — элемент площади поверхности единичной сферы направленный, связанный с Ω_m
 $\alpha_{m-1/2}$ — коэффициент кривизны для углового перераспределения в i -направлении. Подобное обозначение используется и для других направлений
 α — по определению $\alpha = \alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2}$
 $\psi_g(r, \Omega, t)$ — усредненная по скорости функция ψ в интервале скоростей $\Delta v_g = v_{g-1/2} - v_{g+1/2}$
 $N_g(r, \Omega, t)$ — усредненная по ячейке функция $N_g(r, \Omega, t_s)$ в соответствии с формулой
 $N_{g, s, m, i+1/2, j+1/2, k+1/2}$ — усредненная по ячейке функция $N_g(r, \Omega, t_s)$ в соответствии с формулой

$$\int V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \int w_m N_g(r, \Omega, t_s) dV d\Omega / V_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} w_m$$
[подобные обозначения и для других средних от функции $N_g(r, \Omega, t_s)$]
 N_s — сокращенное обозначение $N_{g, s, m, i+1/2, j+1/2, k+1/2}$
 N_s^* — аналогичное среднее для сопряженной функции
 N_g^- — групповой поток для направлений внутрь области
 N_g^+ — групповой поток для направления из области

$$\bar{N}_g = \sum_{m=1}^M w_m N_{gm}$$
 — изотропная компонента углового группового потока

$$\bar{N}_g^* = \sum_{m=1}^M w_m N_{gm}^*$$
 — изотропная компонента углового группового сопряженного потока

$$\bar{S}_g = \sum_{m=1}^M w_m S_{gm}$$
 — изотропная компонента источника, зависящего от номера группы и угла

$$I_g = \sum_{m=1}^M w_m \mu_m N_{gm}$$
 — ток в i -направлении, соответствующий линейной составляющей группового углового потока. J и K — токи в j - и k -направлениях

$$S_I = \sum_{m=1}^M w_m \mu_m S_{gm}$$
 — линейная компонента группового источника в i -направлении. Индексы J и K используются для j - и k -направлений
 Σ_g или $\Sigma_{tot, g}$ — полное групповое сечение (макроскопическое)
 $\Sigma_{a, g}$ — сечение поглощения (макроскопическое)
 $\Sigma_{s, lgh}$ — l -я компонента в разложении по полиномам Лежандра среднегрупповой макроскопической вероятности перехода из группы h в группу g
 $\Sigma_{s, 0gg}$ — изотропное (внутригрупповое) макроскопическое сечение рассеяния
 $\Sigma_{r, g} = \Sigma_g - \Sigma_{s, 0gg}$ — макроскопическое сечение увода из группы
 $\nu \Sigma_{f, g}$ — макроскопическое среднегрупповое сечение деления, умноженное на среднее число вторичных нейтронов на одно деление
 χ_g — групповой спектр деления
 Q_{gm} — угловое распределение внешнего источника в группе g

ЛИТЕРАТУРА

1. Bell G. I. On the Stochastic Theory of Neutron Transport. Nucl. Sci. Engng, **21**, 390 (1965).
2. Bell G. I., Goddard W. B. Polarization Effects on Neutron Transport. Nucl. Sci. Engng, **23**, 380 (1965).
3. Davison B. Neutron Transport Theory. Oxford University Press. London, 1957. (См. на русском языке: Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1961.)
4. Carlson B. G. Solution of the Transport Equation by S_n -Approximations. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1599 (October 1953).
5. Carlson B. G. Solution of the Transport Equation by S_n -Approximations. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1891 (May 1955).
6. Carlson B. G. The S_n -Method and the SNG Code. Los Alamos Scientific Laboratory Report LAMS-2201 (April 1959).
7. Carlson B. G., Bell G. I. Solution of the Transport Equation by the S_n -Method. Доклад P/2386 на Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958.

8. Carlson B. G. Numerical Solution of Transient and Steady-State Neutron Transport Problems. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-2260 (October 1959).
9. Carlson B. G. Numerical Solution of Neutron Transport Problems. In «Nuclear Reactor Theory», Vol. XI. Amer. Math. Soc., Proc. of Symp. in Appl. Math. (1961).
10. Carlson B., Lee C., Worlton J. The DSN and TDC Neutron Transport Codes. Los Alamos Scientific Laboratory Report LAMS-2346 (February 1960).
11. Lee C. E. The Discrete S_n Approximation to Transport Theory. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-2595 (March 1962).
12. Carlson B. G. The Numerical Theory of Neutron Transport. In «Methods of Computational Physics». New York, Academic Press, Inc., Vol. 1, Statistical Physics (1963).
13. Carlson B. G. Numerical Formulation and Solution of Neutron Transport Problems. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-2996 (April 1964).
14. Carlson B. G. A Method of Moments for Solving the Neutron Transport Equation. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3060 (February 1965).
15. Bell G. I., Carlson B. G., Lathrop K. D. Recent Progress in Transport Theory. Los Alamos Scientific Laboratory Report LAMS-3079 (July 1964).
16. Lathrop K. D., Carlson B. G. Discrete Ordinates Angular Quadrature of the Neutron Transport Equation. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3186 (February 1965).
17. Hansen G. E., Sandmeier H. A. Neutron Penetration Factors Obtained by Using Adjoint Transport Calculations. Nucl. Sci. Engng, 22, 315 (1965).
18. Lathrop K. D. Anisotropic Scattering Approximations in the Monoenergetic Boltzmann Equation. Nucl. Sci. Engng, 21, 498 (1965).
19. Alexander J. H., Hinman G. W. Anisotropic Scattering in DSN. Trans. Amer. Nucl. Soc., 5, No. 2, 408 (1962).
20. Lathrop K. D. DTF-IV, a FORTRAN-IV Program for Solving the Multigroup Transport Equation with Anisotropic Scattering. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3373 (November 1965).
21. Lathrop K. D. Use of Discrete-Ordinates Methods for Solution of Photon Transport Problems. Nucl. Sci. Engng, 24, 381 (1966).
22. Trubey D. K., Penny S. K., Lathrop K. D. A Comparison of Three Methods Used to Calculate Gamma-Ray Transport in Iron. Oak Ridge National Laboratory Report ORNL-RSIC-9 (October 1965).
23. Sandmeier H. A., Hansen G. E., Lazarus R. B., Howerton R. J. Computation of Fast Neutron Penetration in Air by the S_n -Method with Special Emphasis on the Use of Multitable-Multigroup Cross Section Sets. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3415 (November 1965).
24. Lathrop K. D. GAMLEG, a FORTRAN code to Produce Multigroup Cross Sections for Photon Transport Calculations. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3267 (April 1965).
25. Hansen G. E., Roach W. H. Six and Sixteen Group Cross Sections for Fast and Intermediate Critical Assemblies. Los Alamos Scientific Laboratory Report LAMS-2543 (December 1961).
26. Abramowitz M., Stegun I. A. (eds.) Handbook of Mathematical Functions. NBS, Appl. Math. Ser. 55, USGPO, Wash., 1964, p. 916.
27. Meghreblian R. V., Holmes D. K. Reactor Analysis. New York, McGraw-Hill Book Co., Inc., New York, 1960. (См. на русском языке: Мегреблиан Р., Холмс Д. Теория реакторов. М., Атомиздат, 1962.)
28. Lathrop K. D. On the Accuracy of the S_2 Equations in Two-Dimensional Geometry. Trans. Amer. Nucl. Soc., 9, No. 1 (1966).
29. Bell G. I., Hansen G. E., Sandmeier H. A. Multitable Treatments of Anisotropic Scattering in S_n -Multigroup Transport Calculations. Nucl. Sci. Engng, 28, 376 (1967).
30. Kaplan S., Gelbard E. H. Invariant Imbedding and the Integration Techniques of Reactor Theory. Trans. Amer. Nucl. Soc., 7, 258 (1964).
31. Schmidt E. A Stable and Non-Iterative Solution to the Discrete Ordinates Equations. Trans. Amer. Nucl. Soc., 6, 8 (1963).
32. Carlson B. G., Worlton W. J., Guber W., Shapiro M. DTF Users Manual. United Nuclear Corporation Report UNC Phys/Math-3321 (two Vols) (November 1963).
33. Lathrop K. D., Leonard A. Comparisons of Exact and S_n Solutions of the Monoenergetic Critical Equation with Anisotropic Scattering. Ltr. to Ed. Nucl. Sci. Engng, 22, 115 (1965).
34. Wachspress E. L. Some New Nonlinear Iteration Techniques for Solving Neutron-Diffusion Problems. International Conf. on the Applications of Computing Methods to Reactor Problems. Argonne National Laboratory Report ANL-7050 (1965).
35. Tobias M. L., Fowler T. B. The Application of the Equipose Iterative Method to Diffusion and Transport Theory. International Conf. on the Applications of Computing Methods to Reactor Problems. Argonne National Laboratory Report ANL-7050 (1965).
36. Case K. M., de Hoffmann F., Placzek G. Introduction to the Theory of Neutron Diffusion. Los Alamos Scientific Laboratory, USGPO, Wash. (1953).

МЕТОДЫ СФЕРИЧЕСКИХ ГАРМОНИК. P_L - И ДВОЙНОЕ P_L -ПРИБЛИЖЕНИЯ

Е. Гелбард

(Лаборатория атомной энергии им. Беттиса, Питтсбург, штат Пенсильвания)

§ 4.1. P_L И ДВОЙНОЕ P_L -ПРИБЛИЖЕНИЯ В ПЛОСКОЙ ГЕОМЕТРИИ

4.1.1. В различных разделах этой главы мы обсудим метод сферических гармоник и другие родственные ему методы такие, как, методы Чандрасекара [1]* и Ивона [2]. Метод сферических гармоник является наиболее ранним из этих методов; его возникновение относится к 1926 г. [3]. Разумеется, с тех пор было разработано много различных методов решения транспортного уравнения. Особенно широко использовался и оказался весьма мощным S_n -метод. Однако метод сферических гармоник и аналогичные ему методы до сих пор являются чрезвычайно ценным инструментом для проведения оценок и анализа. Поэтому специалист в области физики реакторов должен быть подготовлен к работе с ними.

4.1.2. Метод сферических гармоник может быть использован при любой геометрии, однако ради простоты мы ограничимся в этом разделе рассмотрением плоского слоя. Кроме того, чтобы еще более упростить нашу задачу, мы будем рассматривать в большей части этой главы только моноэнергетические задачи.

В плоской геометрии моноэнергетическое кинетическое уравнение имеет вид

$$\mu \frac{\partial F(\Omega, x)}{\partial x} + \Sigma_{tot}(x) F(\Omega, x) = \int \Sigma_s(\Omega \Omega', x) F(\Omega', x) d\Omega' + \frac{1}{4\pi} S(x).$$

Здесь x — положительная координата; Ω — единичный вектор в направлении скорости нейтрона; μ — косинус угла между Ω и осью x ; $S(x)$ — изотропная плотность источников; $F(\Omega, x)$ — поток, отнесенный к единице телесного угла, в направлении Ω ; $\Sigma_{tot}(x)$ — полное сечение; $\Sigma_s(\Omega \Omega', x)$ — дифференциальное сечение рассеяния в единичный телесный угол в направлении Ω .

Для дальнейшего удобно ввести переменную $\mu_0 \equiv \Omega \Omega'$. Легко заметить, что

$$\Sigma_s(\mu_0, x) = 2\pi \Sigma_s(\Omega \Omega', x)$$

и

$$F(\mu, x) = 2\pi F(\Omega, x) **.$$

В таких переменных можно записать

$$\mu \frac{\partial F(\mu, x)}{\partial x} + \Sigma_{tot}(x) F(\mu, x) = \frac{1}{2} \int \Sigma_s(\mu_0, x) F(\mu, x) d\Omega + \frac{1}{2} S(x). \quad (4.1)$$

* Этот метод также называют методом дискретных ординат или методом Чандрасекара—Вина.

** Множитель 2π возникает здесь вследствие того, что $F(\Omega, x)d\Omega$ является потоком в телесном угле $d\Omega$, в то время как $F(x, \mu)$ — поток, отнесенный к интервалу $d\mu$. Ясно, что $\int_0^{2\pi} F(\Omega, x) d\phi = 2\pi F(\Omega, x) = F(\mu, x)$. Аналогичные соображения приводят к соотношению $\Sigma_s(\mu_0, x) = 2\pi \Sigma_s(\Omega \Omega', x)$.

Предположим теперь, что дифференциальное сечение рассеяния и поток могут быть разложены в ряды по сферическим гармоникам*

$$\left. \begin{aligned} F(\mu, x) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2} \right) f_l(x) P_l(\mu), \\ \Sigma_s(\mu_0, x) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s,l}(x) P_l(\mu_0), \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

где $P_l(\mu)$ — полином Лежандра l -го порядка**. В разложении (4.2)

$$\left. \begin{aligned} f_l(x) &\equiv \int_{-1}^1 F(\mu, x) P_l(\mu) d\mu, \\ \Sigma_{s,l}(x) &\equiv \int_{-1}^1 \Sigma_s(\mu_0, x) P_l(\mu_0) d\mu_0. \end{aligned} \right\} \quad (4.3)$$

Подставив разложение (4.2) в уравнение (4.1), получим

$$\begin{aligned} &\mu \frac{\partial F(\mu, x)}{\partial x} + \Sigma_{tot}(x) F(\mu, x) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\Omega' \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{l''=0}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \left(\frac{2l''+1}{2} \right) f_{l'}(x) \Sigma_{s,l''}(x) \times \\ &\quad \times P_{l'}(\mu') P_{l''}(\mu_0) + \frac{1}{2} S(x). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Интеграл в уравнении (4.4) имеет довольно сложный вид, однако фактически он легко вычисляется с помощью теоремы суммирования полиномов Лежандра:

$$\begin{aligned} P_l(\mu_0) &\equiv P_l(\Omega \Omega') = \\ &= P_l(\mu) P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi'). \end{aligned} \quad (4.5)$$

С помощью равенства (4.5) и свойств ортогональности сферических гармоник можно показать, что

$$\mu \frac{\partial F(\mu, x)}{\partial x} + \Sigma_{tot}(x) F(\mu, x) = \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{(2l'+1)}{2} \Sigma_{s,l'}(x) f_{l'}(x) P_{l'}(\mu) + \frac{1}{2} S(x). \quad (4.6)$$

Умножим теперь уравнения (4.6) на полиномы $P_l(\mu)$ ($l = 0, 1; \dots; \infty$) и проинтегрируем результат в интервале $-1 \leq \mu \leq 1$. Используя обычные рекуррентные соотношения

$$(l+1) P_{l+1}(\mu) + l P_{l-1}(\mu) = (2l+1) \mu P_l(\mu), \quad (4.7)$$

* В этой главе мы не стремимся к математической строгости и поэтому не будем исследовать пределы допустимости разложений по сферическим гармоникам. Полезно отметить, однако, что функция $F(\mu, x)$ может быть разрывной по μ . В этом случае ее разложение будет сходиться медленнее (см. разд. 4.1.3).

** Функции $P_l(\mu)$ и $P_l^m(\mu)$ рассмотрены в работе [4]. К сожалению, не существует единого определения $P_l^m(\mu)$. В этой главе мы положим $P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu)$. Наше определение незначительно отличается от определения, данного в работе [4].

получим бесконечную систему связанных дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{df_1(x)}{dx} + \Sigma_a(x) f_0(x) &= S(x), \\ \frac{l+1}{2l+1} \frac{df_{l+1}(x)}{dx} + \frac{1}{(2l+1)} \frac{df_{l-1}(x)}{dx} + [\Sigma_{tot}(x) - \Sigma_{s,l}(x)] f_l(x) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

($l = 1; 2; \dots; \infty$).

Хотя эти уравнения являются строгими, они не очень полезны. Чтобы получить полезную, хотя и приближенную систему, мы несколько изменим первоначальное кинетическое уравнение. Вместо уравнений (4.6) напомним

$$\begin{aligned} & \mu \frac{dF'(\mu, x)}{dx} + \Sigma_{tot}(x) F'(\mu, x) = \\ & = \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{2l'+1}{2} \Sigma_{s,l'}(x) P_{l'}(\mu) + S'(\mu, x), \end{aligned} \quad (4.6')$$

где

$$\begin{aligned} F_l(x) &\equiv \int_{-1}^1 F'(\mu, x) P_l(\mu) d\mu, \\ S'(\mu, x) &= \frac{1}{2} S(x) + \frac{(L+1)}{2} \cdot \frac{dF_L(x)}{dx} P_{L+1}(\mu). \end{aligned}$$

Из сравнения уравнений (4.6) и (4.6') ясно, что

$$F(x, \mu) \approx F'(x, \mu),$$

если

$$\frac{2(L+1)}{2} \cdot \frac{dF_L(x)}{dx} \ll S(x).$$

Из уравнений (4.6') вытекает, что

$$\left. \begin{aligned} F_l(x) &= 0 \quad (l > L); \\ \frac{dF_1(x)}{dx} + \Sigma_a(x) F_0(x) &= S(x), \\ \frac{l+1}{2l+1} \cdot \frac{dF_{l+1}(x)}{dx} + \frac{l}{(2l+1)} \cdot \frac{dF_{l-1}(x)}{dx} + [\Sigma_{tot}(x) - \Sigma_{s,l}(x)] F_l(x) &= 0, \\ (l = 1; 2; \dots; L-1), \\ \frac{L}{2L+1} \cdot \frac{dF_{L-1}(x)}{dx} + [\Sigma_{tot}(x) - \Sigma_{s,L}(x)] F_L(x) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.9)$$

Уравнения (4.9) являются окончательными P_L -уравнениями для плоской геометрии. Они могут быть также получены, если обрезать разложение потока и записать

$$F(\mu, x) \approx \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) F_l(x) P_l(x). \quad (4.10)$$

В дальнейшем мы получим P_L -уравнения путем подстановки таких обрезанных разложений в кинетическое уравнение.

Если источники и все сечения являются непрерывными функциями x , то уравнения (4.9) вполне однозначны. Они справедливы во всех точках в пределах рассматриваемой области и вместе с граничными условиями (которые обсуждаются ниже) полностью определяют решение. С другой стороны, уравнения

(4.9) не определяют полностью решения в тех точках, где источники или сечения терпят разрыв. В этих точках P_L -уравнения должны быть дополнены соответствующими граничными условиями. В определенных случаях имеет смысл задавать граничные условия несколько искусственно, с тем чтобы повысить точность вычислений потока в данной точке или в некоторой области пространства. Однако, если L нечетно (как это обычно бывает), то существуют «естественные» для P_L -приближения граничные условия. Для вывода таких граничных условий мы применим способ, который обычно используется в электростатике.

Заменим временно поверхность разрыва очень тонким переходным слоем. В этом слое физические свойства среды изменяются быстро, но непрерывно. Будем считать, что промежуточный слой расположен между поверхностями $x_0 - \Delta/2$ и $x_0 + \Delta/2$. Проинтегрировав P_L -уравнения в указанных пределах, получим

$$\left. \begin{aligned} \delta_1 + \overline{\Sigma_a F_0} \Delta &= \overline{S} \Delta, \\ \left(\frac{l+1}{2l+1}\right) \delta_{l+1} + \left(\frac{l}{2l+1}\right) \delta_{l-1} + \overline{(\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, l}) F_l} \Delta &= 0, \\ \left(\frac{L}{2L+1}\right) \delta_{L-1} + \overline{(\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, L}) F_L} \Delta &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.11)$$

Здесь

$$\delta_l = F_L \left(x + \frac{\Delta}{2} \right) - F_l \left(x - \frac{\Delta}{2} \right), \quad (4.12)$$

а

$$\overline{\Sigma F_l} \Delta = \int_{x_0 - \Delta/2}^{x_0 + \Delta/2} \Sigma(x') F_l(x') dx'. \quad (4.13)$$

При $\Delta \rightarrow 0$ имеем

$$\begin{aligned} \delta_1 \rightarrow 0, \quad \left(\frac{l+1}{2l+1}\right) \delta_{l+1} + \left(\frac{l}{2l+1}\right) \delta_{l-1} &\rightarrow 0 \quad (l = 1; 2; \dots; L-1), \\ \left(\frac{L}{2L+1}\right) \delta_{L-1} &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Следовательно, $\delta_l \rightarrow 0$ для $l = 0; 1; \dots; L$. Иными словами, при обращении Δ в нуль все моменты потока на поверхности x_0 остаются непрерывными. Таким образом, если рассматривать границу раздела как бесконечно тонкий переходный слой, то следует потребовать (по возможности) непрерывности всех моментов.

Дэвисон в своей книге [5] весьма подробно обсуждает граничные P_L -условия. Представляется полезным изложить здесь результаты его работы, хотя его подход существенно отличается от нашего. Дэвисон приходит к следующим выводам. При нечетных приближениях (т. е. когда L нечетно) желательно и допустимо требовать непрерывности всех моментов. С другой стороны, если L четно, то такие граничные условия не могут быть использованы. В этом случае необходимо потребовать непрерывности линейных комбинаций между различными моментами, что не эквивалентно требованию непрерывности всех моментов. Легче всего это понять в P_2 -приближении.

В P_2 -приближении имеем

$$\left. \begin{aligned} \frac{dF_1}{dx} + \Sigma_{tot} F_0 &= S, \\ \frac{2}{3} \frac{dF_2}{dx} + \frac{1}{3} \frac{dF_0}{dx} + (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, 1}) F_1 &= 0, \\ \frac{2}{5} \frac{dF_1}{dx} + (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, 2}) F_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.15)$$

Отсюда следует, что

$$F_2 = - \frac{2}{5 (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, 2})} \cdot \frac{dF_1}{dx} = - \frac{2}{5 (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, 2})} (S - \Sigma_{tot} F_0). \quad (4.16)$$

Таким образом, в общем случае F_2 и F_0 не могут быть одновременно непрерывными, если источники или свойства среды разрывны. Ниже мы коротко обсудим граничные условия, предложенные Дэвисоном для четных приближений.

Во всех четных приближениях существуют линейные соотношения, аналогичные выведенному выше для P_2 -приближения. Следовательно, в P_{2n} -приближении имеется лишь столько линейно независимых моментов, сколько и в более низком P_{2n-1} -приближении. Поэтому нельзя ожидать от P_{2n} -приближения большей точности, чем от P_{2n-1} -приближения. И это действительно так. По этой причине четные приближения редко используются. Однако Минглом была выполнена интересная работа [6]* по четным приближениям, которую мы рекомендуем вниманию читателя.

Обсудив условия сшивки решения на границе раздела сред для P_L -приближения, мы должны кое-что сказать о внешних граничных условиях. Наиболее часто используются два типа внешних граничных условий. К более простому типу относятся граничные условия, соответствующие отражению нейтронов от плоскостей симметрии. Если в рассматриваемой задаче имеет место симметрия относительно плоскости x_0 , то

$$F(\mu, x_0) = F(-\mu, x_0). \quad (4.17)$$

Отсюда следует, что при $x = x_0$ все нечетные моменты потока должны исчезнуть, т. е. граничные условия, соответствующие отражению, заключаются в равенстве нулю нечетных моментов.

С другой стороны, нельзя однозначно сформулировать граничные условия второго типа, т. е. условия на границе с «вакуумом». Если вакуум находится справа от границы (при $x = x_1$), то

$$F(\mu, x_1) = 0 \quad (\mu < 0). \quad (4.18)$$

Однако никакая сумма полиномов Лежандра не может удовлетворить этому условию точно. Не существует такого ненулевого полинома, который бы обращался в нуль на конечном интервале. Поэтому приходится использовать некие искусственные условия на поверхности, смещенной относительно истинной границы с вакуумом. Ниже мы рассмотрим условия Марка и Маршака, которые наиболее широко применяются в качестве граничных условий на границе с вакуумом. Сначала остановимся на условии Марка. В P_L -приближении** можно записать

$$F(x_1, \mu) = \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) F_l(x_1) P_l(\mu). \quad (4.19)$$

Обозначим через μ_i корни $P_{L+1}(\mu)$ и потребуем для всех $\mu_i < 0$ выполнения соотношений

$$F(x_1, \mu_i) = \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) F_l(x_1) P_l(\mu_i) = 0. \quad (4.20)$$

Уравнения (4.20) являются граничными условиями Марка. Они содержат $(L+1)/2$ условий, наложенных на моменты потока. Аналогичные условия для $\mu_i > 0$ дадут еще $(L+1)/2$ соотношений. Таким образом, для однозначного выбора решения системы $L+1$ P_L -уравнений имеется $L+1$ линейных соотношений.

* Ссылки на другие работы Мингла можно найти в цитируемой статье. Дополнительные сведения по четным P_L -приближениям содержатся в работе [7].

** Рассматриваются нечетные значения L .

Вполне возможно, что некоторым читателям условия Марка — в том виде, как мы их представили, — покажутся несколько странными. Однако фактически можно показать, что они являются «естественными», как и условия сшивки, выведенные выше. Чтобы показать справедливость этих граничных условий, рассмотрим их с различных точек зрения.

Предположим, что область $x > x_L$ заполнена поглотителем и в ней отсутствуют источники. Заметим, что для поглотителя в любом P_L -приближении можно написать

$$F(x, \mu) = g_L [\Sigma_a(x - x_1), \mu]. \quad (4.21)$$

Здесь Σ_a — сечение поглощения, а g_L — универсальная функция, не зависящая от поглотителя. Для двух различных сечений поглощения Σ_{a1} и Σ_{a2} имеем:

$$\begin{aligned} F_1(x, \mu) &= g_L [\Sigma_{a,1}(x - x_1), \mu], \\ F_2(x, \mu) &= g_L [\Sigma_{a,2}(x - x_1), \mu]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Следовательно,

$$F_1(x_1, \mu) = g_L [0, \mu] = F_2(x_1, \mu), \quad (4.23)$$

т. е. при $x = x_1$ поток не зависит от сечения Σ_a . Для любого поглотителя на поток накладывается одно и то же граничное условие при x_1 . Ниже будет показано (см. разд. 4.1.4), что это граничное условие фактически точно совпадает с условием Марка*.

Но какое физическое действие оказывает наш бесконечный поглотитель? Независимо от величины сечения он препятствует возвращению любого нейтрона, попавшего в него. В этом отношении он действует подобно вакууму, так что мы приходим непосредственно к условию Марка как к естественному условию в плоской геометрии.

Не следует думать, что существует только естественное граничное условие или что только это условие необходимо использовать. Граничное условие имеет ценность только тогда, когда оно позволяет достаточно точно рассчитывать именно те величины, которые нас интересуют. Если мы имеем дело с границей между средой и вакуумом, то особый интерес для нас обычно представляет утечка нейтронов в вакуум. Практика показывает, что граничные условия Марка обычно мало пригодны для расчета скорости утечки, в то время как условия Маршака дают прекрасные результаты.

Для формулировки условий Маршака мы опять начнем с уравнения (4.20) для потока, представленного в виде суммы ограниченного ряда. Умножив уравнение (4.20) последовательно на $P_1(\mu)$, $P_3(\mu)$, ..., $P_L(\mu)$, проинтегрировав результаты по μ в пределах от -1 до 0 и приравняв каждый из интегралов нулю, получим

$$0 = \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) F_l(x_1) \int_{-1}^0 P_m(\mu') P_l(\mu') d\mu' \quad (m = 1; 3; \dots, L). \quad (4.24)$$

Уравнения (4.24), как и (4.20), содержат $(L+1)/2$ условий, наложенных на моменты потока. Вместе с условиями, полученными после интегрирования по μ в пределах от 0 до 1 , они полностью определяют поток. Вплоть до последнего времени было трудно понять причину успеха граничных условий Маршака. Рецепт Маршака представляется весьма произвольным, так как нет каких-либо ясных принципов, лежащих в основе такого рецепта. Однако в настоящее время показано [8], что P_L -уравнения, граничные условия сшивки и граничные условия Маршака могут быть получены из единого вариационного принципа**.

* Читатель должен помнить, что мы рассматриваем здесь плоскую геометрию. Много из того, о чем говорилось выше, несправедливо для других геометрий.

** Дж. Дэвисом в работе [8] получены обобщенные граничные условия — условия Маршака и граничные условия сшивки для произвольной геометрии. Граничные условия для пластины содержатся в этих обобщенных условиях.

Таким образом, в определенном смысле условия Маршака более естественны, чем условия Марка.

Поскольку существует много различных вариантов записи граничных условий на поверхности раздела среды и вакуума*, то было бы весьма полезно иметь простой способ их оценки. Разумеется, с помощью какого-то одного критерия мы не сможем с исчерпывающей полнотой судить о преимуществах того или иного граничного условия. Наиболее общий способ оценки точности граничного условия заключается в применении этого условия к задаче Милна.

В задаче Милна мы имеем дело с полубесконечной средой, заполняющей полупространство $x \leq 0$ (рис. 4.1). Предположим, что среда является чистым рассеивателем без поглощения**. Она граничит с вакуумом и содержит источники только при $x = -\infty$. Мы постулируем, что эти источники изотропны.

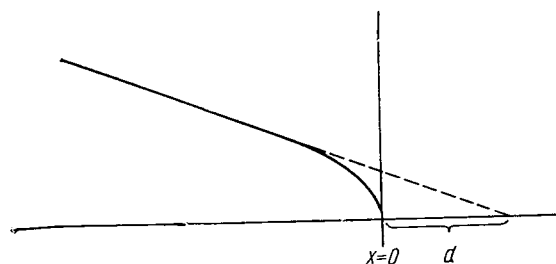


Рис. 4.1. Скалярный поток в полубесконечной непоглощающей среде (d — длина экстраполяции).

Можно показать, что при $x \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение потока является линейным. С другой стороны, при $x \rightarrow 0$ поток испытывает переходное отклонение, как это показано на рис. 4.1. Продолжим асимптотическую часть потока вправо до пересечения с осью x и обозначим через d длину отрезка от начала координат до точки пересечения. Величина d называется длиной экстраполяции. Обозначим далее через d_L длину экстраполяции, соответствующую решению, полученному в P_L -приближении при некотором граничном условии. Точность определения d_L является грубой мерой точности граничного условия при решении широкого круга задач. В табл. 4.1 выписаны значения d_L для граничных условий Марка и Маршака***. Точные значения d приведены для

Таблица 4.1

Зависимость длины экстраполяции от граничных условий

| n | Длина экстраполяции | | | n | Длина экстраполяции | | |
|-----|-------------------------|---------------------------|----------------------------|-----|-------------------------|---------------------------|----------------------------|
| | граничные условия Марка | граничные условия Маршака | двойное P_L -приближение | | граничные условия Марка | граничные условия Маршака | двойное P_L -приближение |
| 2 | 0,57735 | 0,66667 | 0,50000 | 12 | 0,70893 | 0,70989 | 0,71045 |
| 4 | 0,69402 | 0,70510 | 0,71132 | 14 | 0,70934 | 0,71003 | 0,71045 |
| 6 | 0,70390 | 0,70820 | 0,71057 | 16 | 0,70961 | 0,71013 | 0,71044 |
| 8 | 0,70692 | 0,70920 | 0,71047 | 18 | 0,70979 | 0,71019 | 0,71044 |
| 10 | 0,70824 | 0,70964 | 0,71045 | 20 | 0,70992 | 0,71024 | |
| | | | 0,71044609 | | | | |

Примечание. В таблице даны значения длины экстраполяции в зависимости от n , вычисленные Е. Шмидтом. Через n обозначено число независимых функций в разложении потока. Расхождение между длиной экстраполяции, вычисленной в двойном P_2 -приближении ($n=16$), и точным значением d вызвано погрешностями численного расчета в P_2 -приближении.

сравнения. Из таблицы видно, что при всех нечетных L в диапазоне $1 \leq L \leq 19$ значения d_L , соответствующие граничным условиям Маршака, точнее значений, соответствующих граничным условиям Марка. Согласно рассуждениям Дэвисона в работе [5], при очень больших L условия Марка лучше условий Маршака, однако данные табл. 4.1 [10] показывают, что это не так.

* См., например работу [9].

** Отметим, что существуют весьма важные варианты задачи Милна с $\Sigma_a \neq 0$. Однако мы ограничимся рассмотрением задачи Милна для непоглощенной среды.

*** Значения d , полученные с помощью двойного P_L -приближения, обсуждаются в следующем разделе.

При небольших значениях L длины экстраполяции Маршака существенно точнее, хотя при возрастании L последовательность значений δ_L начинает сходиться несколько медленнее. Медленная сходимость вообще является слабым местом для всех условий на границе с вакуумом. Поскольку в P_L -приближении невозможно добиться тождественного равенства нулю входящего потока, постольку не может быть вполне удовлетворительных вакуумных граничных условий. Если мы искажаем угловое распределение входящего потока, то мы должны ожидать, что угловое распределение выходящего потока будет также искажено. Подобно длине экстраполяции, распределение потока с возрастанием L очень медленно приближается к точному распределению [11]. Таким образом, можно сказать, что P_L -приближения не всегда пригодны для решения задач, связанных с определением потока в среде, граничащей с вакуумом. К счастью, как мы вскоре увидим, P_L -уравнения могут быть легко модифицированы так, что этот недостаток исчезает.

4.1.3. Выше, в разд. 4.1.2, были выведены P_L -уравнения для плоской геометрии и рассмотрены соответствующие им условия шивки и внешние граничные условия. Единственно, чего до сих пор не было сделано, это не было дано оценки метода в целом. Можно спросить, почему необходимо раскладывать поток по полиномам Лежандра? Почему, например, не использовать другие типы разложения? Фактически, как мы вскоре увидим, используются и другие типы разложений. Однако разложение по полиномам Лежандра является привлекательной процедурой по ряду причин.

Прежде всего, выбор полиномов Лежандра позволил использовать теорему сложения (4.5). Эта теорема весьма полезна тем, что позволяет исключить не имеющую отношения к делу переменную φ и разделить переменные Ω и Ω' . Во-вторых, разложение по полиномам Лежандра обладает свойствами, которые часто очень важны при численном анализе. Разложение функции $f(\mu)$ по полиномам Лежандра эквивалентно аппроксимации этой функции линейным относительно $P_l(\mu)$ выражением с помощью метода наименьших квадратов:

$$\frac{\partial}{\partial C_l} \int_{-1}^1 \left[f(\mu) - \sum_{i=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) C_i P_i(\mu) \right]^2 = 0, \quad (4.25)$$

если

$$C_l = \int_{-1}^1 P_l(\mu') f(\mu') d\mu'. \quad (4.26)$$

Разумеется, неверно было бы утверждать, что с помощью P_L -приближения мы получаем ту же самую аппроксимацию для потока, которая получается методом наименьших квадратов. Однако это свойство разложения по полиномам Лежандра дает обоснование для его использования при решении задач, связанных с переносом нейтронов, и позволяет надеяться на то, что в большинстве случаев можно получить разумные результаты. Следует тем не менее иметь в виду, что для некоторых типов задач P_L -приближения малоприменимы.

Очевидно, например, что с помощью полиномов трудно аппроксимировать разрывные функции. Если поток разрывен по μ , то P_L -приближения будут сходиться к разрывной функции $f(\mu)$ очень медленно. Наиболее существенным обстоятельством, вызывающим разрывный характер угловой зависимости потока, является наличие чисто поглощающего слоя или плоских источников.

Предположим, что чисто поглощающая пластина, в которой отсутствуют источники нейтронов, помещена в некоторую среду, содержащую источники (рис. 4.2). Пусть P — точка на левой границе пластины и

$$\bar{F}(\Omega, x) = \Omega F(\Omega, x).$$

Если Ω и Ω' направлены почти вертикально, то нейтроны, движущиеся вдоль Ω' , могут с большой вероятностью поглотиться, не достигнув точки P . Следовательно, $F(x, \Omega') \ll F(x, \Omega)$. При стремлении Ω' и Ω к вертикальному направ-

лению $F(x, \Omega') \rightarrow 0$, в то время как $F(x, \Omega)$, вообще говоря, не стремится к нулю. Мы видим, что $F(x, \mu)$ имеет разрыв при $\mu = 0$. Фактически, если толщина поглотителя бесконечно велика, то, как и в случае границы с вакуумом, $F(x, \mu) = 0$ при $\mu < 0$ и $F(x, \mu) \neq 0$ при $\mu > 0$.

При наличии плоских источников поток имеет особенность другого рода. В этом случае при $\mu = 0$ поток бесконечен. В принципе эта особенность может быть всегда устранена, если плоскость источников заменить слоем небольшой, но конечной толщины. Однако это приносит мало пользы. Вблизи тонкого слоя, содержащего источники, поток становится очень большим при $\mu = 0$ и при небольших значениях μ его трудно аппроксимировать полиномом.

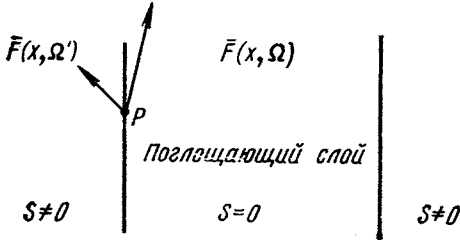


Рис. 4.2. Поток на границе поглощающей свободной от источников пластины.

Таким образом, при наличии поверхностных источников или чисто поглощающих пластин следует ожидать, что последовательность P_L -поток будет сходиться очень медленно. Чтобы рассчитать поток вблизи тонких плоских источников или чисто поглощающих слоев, следовало бы использовать P_L -приближение высокого порядка, однако Ивоном в 1954 г. [2] был предложен значительно более удобный подход. Согласно Ивону, в том случае, когда поток имеет разрыв при $\mu = 0$, может оказаться выгодным использовать два разложения по полиномам вместо одного. Для получения уравнений Ивона (двойных P_L -уравнений) введем полиномы

$$\left. \begin{aligned} p_l^+(\mu) &= P_l(2\mu - 1), \\ p_l^-(\mu) &= P_l(2\mu + 1). \end{aligned} \right\} \quad (4.27)$$

Ясно, что

$$\left. \begin{aligned} p_l^+(0) &= P_l(-1); & p_l^+(1) &= P_l(1), \\ p_l^-(-1) &= P_l(-1); & p_l^-(0) &= P_l(1). \end{aligned} \right\} \quad (4.28)$$

Кроме того,

$$\int_0^1 p_l^+(\mu) p_m^+(\mu) d\mu = \int_{-1}^0 p_l^-(\mu) p_m^-(\mu) d\mu = \delta_{l,m} / (2l + 1). \quad (4.29)$$

Соотношения (4.29) аналогичны условиям ортогональности для полиномов Лежандра. Можно также получить рекуррентные соотношения, аналогичные (4.7). С помощью соотношений (4.7) можно показать, что

$$\left. \begin{aligned} (l+1) p_{l+1}^+(\mu) + (2l+1) p_l^+(\mu) + l p_{l-1}^+(\mu) &= 2(2l+1) \mu p_l^+(\mu), \\ (l+1) p_{l+1}^-(\mu) - (2l+1) p_l^-(\mu) + l p_{l-1}^-(\mu) &= 2(2l+1) \mu p_l^-(\mu). \end{aligned} \right\} \quad (4.30)$$

Рекуррентные соотношения и условия ортогональности понадобятся нам для дальнейших рассуждений. Прежде всего представим поток в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} F(\mu, x) &= \sum_{i=0}^L (2l+1) \psi_i(x) p_i^+(\mu), & \mu > 0, \\ F(\mu, x) &= \sum_{i=0}^L (2l+1) \chi_i(x) p_i^-(\mu), & \mu < 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.31)$$

Подставив далее выражения (4.31) в (4.6) и принимая во внимание (4.30), получим после умножения на $p_l^+(\mu)$ и интегрирования по μ в пределах от 0 до 1

$$\begin{aligned} & \frac{l+1}{2(2l+1)} \psi'_{l+1}(x) + \frac{2l+1}{2(2l+1)} \psi'_l(x) + \frac{l}{2(2l+1)} \psi'_{l-1}(x) + \\ & + \Sigma_{tot}(x) \psi_l(x) = \sum_{l'=1}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) C_{ll'}^+ \Sigma_{s,l'}(x) F_{l'}(x). \end{aligned}$$

Подобным же образом

$$\begin{aligned} & \frac{l+1}{2(2l+1)} \chi'_{l+1}(x) - \frac{2l+1}{2(2l+1)} \chi'_l(x) + \frac{l}{2(2l+1)} \chi'_{l-1}(x) + \Sigma_{tot}(x) \chi_l(x) = \\ & = \sum_{l'=l}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) C_{ll'}^- \Sigma_{s,l'}(x) F_{l'}(x) \quad (l=0; 1; 2; \dots; L), \end{aligned} \quad (4.32)$$

где

$$C_{ll'}^+ = \int_0^1 p_l^+(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu, \quad C_{ll'}^- = \int_{-1}^0 p_l^-(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu^*. \quad (4.33)$$

Очевидно, что наша работа еще далека от завершения, так как в правых частях уравнений (4.32) стоят суммы с бесконечным числом слагаемых, причем эти суммы содержат только полнопериодные моменты F_l и не содержат полупериодных моментов ψ и χ . Имеется много способов ограничить число членов в сумме. Мы выберем следующий путь.

В двойном P_L -приближении поток выражен через $2L+2$ переменные. Представляется последовательным выразить сечение рассеяния также через $2L+2$ переменные. Поэтому надо положить равными нулю все $\Sigma_{s,l}$ для $l > 2L+1$. Теперь l' в уравнениях (4.32) пробегает значения от l до $2L+1$, т. е. остаются суммы с ограниченным числом слагаемых. Следует еще исключить полнопериодные моменты. С этой целью выразим полнопериодные моменты через полупериодные моменты. Запишем

$$\left. \begin{aligned} P_l(\mu) &= \sum_{l'=0}^l (2l'+1) C_{l'l}^+ p_{l'}^+(\mu), \quad \mu > 0, \\ P_l(\mu) &= \sum_{l'=0}^l (2l'+1) C_{l'l}^- p_{l'}^-(\mu), \quad \mu < 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.34)$$

В двойном P_L -приближении

$$\left. \begin{aligned} P_l(\mu) &\approx \sum_{l'=0}^{L,l} (2l'+1) C_{l'l}^+ p_{l'}^+(\mu), \quad \mu > 0, \\ P_l(\mu) &\approx \sum_{l'=0}^{L,l} (2l'+1) C_{l'l}^- p_{l'}^-(\mu), \quad \mu < 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.35)$$

Здесь суммирование производится до меньшей из величин L или l . Далее

$$F_l(x) = \int_{-1}^1 P_l(\mu) F(\mu, x) d\mu \approx \sum_{l'=0}^{L,l} (2l'+1) [C_{l'l}^+ \psi_{l'}(x) + C_{l'l}^- \chi_{l'}(x)]. \quad (4.36)$$

* Отметим, что $C_{ll'}^+ = C_{ll'}^- = 0$ для $l' < l$. Вследствие этого в уравнениях (4.32) суммирование производится с $l' = l$.

Окончательно после ограничения числа слагаемых в суммах уравнений (4.32) и подстановки в них выражений (4.36) получим:

$$\left. \begin{aligned} \frac{(l+1)}{2(2l+1)} \psi'_{l+1}(x) + \frac{(2l+1)}{2(2l+1)} \psi'_l(x) + \frac{l}{2(2l+1)} \psi'_{l-1}(x) + \sum_{tot}(x) \psi_l(x) &= \\ = \sum_{l'=l}^{2L+1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) C_{ll'}^+ \sum_{s, l'} \sum_{l''=0}^{L, l'} [C_{l''l'}^+ \psi_{l''}(x) + C_{l''l'}^- \chi_{l''}(x)], \\ \frac{l+1}{2(2l+1)} \chi'_{l+1}(x) - \frac{(2l+1)}{2(2l+1)} \chi'_l(x) + \frac{l}{2(2l+1)} \chi'_{l-1}(x) + \sum_{tot}(x) \chi_l(x) &= \\ = \sum_{l'=l}^{2L+1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) C_{ll'}^- \sum_{s, l'} \sum_{l''=0}^{L, l'} [C_{l''l'}^+ \psi_{l''}(x) + C_{l''l'}^- \chi_{l''}(x)] \end{aligned} \right\} (4.37)$$

$(l=0; 1; 2; \dots; L).$

Положив в (4.37) $\psi'_{L+1} = \chi'_{L+1} = 0$, мы приходим к двойным P_L -уравнениям*.

Несколько слов о граничных условиях, соответствующих двойным P_L -уравнениям. На промежуточных границах, как и в P_L -приближении, мы потребуем непрерывности всех функций ψ_l и χ_l . На плоскостях симметрии $\psi_l = \chi_l$. На границе с вакуумом условия вполне определенные: $\psi_l = 0$ на левой границе и $\chi_l = 0$ на правой границе. Очевидно, что в двойных P_L -приближениях истинные вакуумные граничные условия $[F(\mu, x) = 0$ для влетающих извне нейтронов] удовлетворяются точно.

При сравнении P_L - и двойных P_L -приближений мы видим, что двойные P_L -уравнения значительно сложнее P_L -уравнений. Более того, при выводе двойных P_L -уравнений делается больше предположений. Так, мы полностью пренебрегли некоторыми членами в интеграле рассеяния, т. е. в правой части уравнения (4.6). При выводе P_L -уравнений ничего подобного делать не приходится. С другой стороны, при двойном P_L -приближении имеется возможность точно описать поток, разрывный по μ при $\mu = 0$. Вследствие этого при данном числе независимых моментов экстраполированные длины вычисляются значительно точнее, чем в P_L -приближении.** Кроме того, при данном числе моментов угловая зависимость потока при $x = 0$ вычисляется значительно более точно, чем в P_L -приближении.

Кроме P_L - и двойного P_L -приближений было предложено много других сходных методов. Мы остановимся только на приближении Чебышева. Это приближение основано на разложении по полиномам Чебышева $T_n(x)$ [4].

Полиномы Чебышева

$$T_n(\mu) = \cos n \arccos \mu, \quad (4.38)$$

ортогональны с весовой функцией $1/\sqrt{1-\mu^2}$, т. е.

$$\int_{-1}^1 \frac{T_n(\mu) T_m(\mu)}{\sqrt{1-\mu^2}} d\mu = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \delta_{n,m}, & n \neq 0; \\ \pi \delta_{n,m}, & n = 0. \end{cases} \quad (4.39)$$

Они удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$2\mu T_n(\mu) = T_{n+1}(\mu) + T_{n-1}(\mu). \quad (4.40)$$

Приближение Чебышева можно получить, используя соотношения (4.39) и (4.40). Большая работа, связанная с приближением Чебышева, была выполнена Стюартом [13] и Конки [14].

Следует ожидать, что этот метод окажется полезным в тех случаях, когда вообще полезно разложение Чебышева. Преимущества метода вытекают из минимаксных свойств разложений Чебышева, рассматриваемых ниже.

* Мы вывели двойные P_L -уравнения способом Мартэна [2].

** См. табл. 4.1.

Разложения по полиномам Чебышева имеют следующий вид:

$$g(\mu) \approx \frac{1}{\pi} \left[g_0 T_0(\mu) + 2 \sum_{l=1}^L g_l T_l(\mu) \right] = \tau_L(\mu),$$

$$g_l = \int_{-1}^1 \frac{g(\mu) T_l(\mu)}{\sqrt{1-\mu^2}} d\mu. \quad (4.41)$$

Ясно, что $\tau_L(\mu)$ является полиномом L -го порядка по μ . Кроме того, можно показать [15], что максимальная ошибка

$$\varepsilon_{max} \equiv \max |g(\mu) - \tau_L(\mu)|, \quad -1 \leq \mu \leq 1$$

для $\tau_L(\mu)$ меньше, чем для любого другого полинома L -го порядка. Таким образом, аппроксимация с помощью полиномов Чебышева дает минимум максимальной ошибки, в то время как аппроксимация с помощью полиномов Лежандра дает минимум среднеквадратичного отклонения.

К сожалению, метод, основанный на разложении Чебышева, оказался менее полезным, чем можно было бы ожидать. До сих пор не возникло ни одного типа задач, для которых бы этот метод был более подходящим, чем другие. Мы остановились на нем лишь для того, чтобы продемонстрировать другие возможности, отличные от P_L - и двойного P_L -приближений, а также чтобы показать ограниченность аргументов, основанных на свойствах полиномов, используемых для аппроксимации.

4.1.4. В этом пункте нам осталось обсудить ряд важных вопросов, связанных с методом сферических гармоник, которых мы не касались до сих пор. Например, мы еще не рассматривали использование метода в неплоских геометриях. Многие вопросы будут обсуждаться в дальнейшем, однако сейчас представляется полезным исследовать метод сферических гармоник с существенно иной точки зрения, а именно, установить связь между этим методом и методом дискретных ординат, описанным ниже.

Будем исходить из уравнения (4.6). Запишем уравнение (4.6) для N различных значений μ_i :

$$\mu_i \frac{d}{dx} F(\mu_i, x) + \Sigma_{tot}(x) F(\mu_i, x) =$$

$$= \sum_{l'=0}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'}(x) F_{l'}(x) P_{l'}(\mu_i) + \frac{1}{2} S. \quad (4.42)$$

Вместо непрерывной переменной μ в уравнении (4.42) фигурирует дискретная переменная μ_i . Но непрерывная переменная μ содержится еще в определении моментов

$$F_l(x) = \int_{-1}^1 F(\mu, x) P_l(\mu) d\mu. \quad (4.43)$$

Чтобы исключить μ полностью, нужно ввести в (4.43) численную квадратурную формулу, т. е. написать

$$F_l(x) \approx \sum_{i=1}^N \omega_i F(\mu_i, x) P_l(\mu_i) \equiv \hat{f}_l(x), \quad (4.44)$$

где ω_i — весовые множители. Метод дискретных ординат сводится, таким образом, к совместному решению уравнений (4.42) и (4.44). Подставив далее (4.44) в (4.42), сведем транспортное уравнение к системе N дифференциальных уравнений (относительно переменной x), которые могут быть решены многими способами.

Ясно, что точность метода дискретных ординат в значительной степени зависит от точности квадратурной формулы (4.44). В связи с этим желательно использовать формулу Гаусса [16] как наиболее точную квадратурную формулу.

Чтобы вычислить $F_i(x)$ с помощью квадратурного приближения Гаусса, значения μ_i следует взять равными значениям корней полинома $P_N(\mu)$, а весовые множители определить условиями

$$\sum_{i=1}^N \omega_i \mu_i^n = \begin{cases} 2/(n+1), & n \text{ четное } (n \leq N-2), \\ 0, & n \text{ нечетное } (n \leq N-1), \\ \int_{-1}^1 \mu^n d\mu & (n=0, 1, \dots, N-1). \end{cases} \quad (4.45)$$

Если значения весовых множителей удовлетворяют уравнениям (4.45), то они удовлетворяют (хотя это и менее очевидно) следующим уравнениям:

$$\sum_{i=1}^N \omega_i \mu_i^n = \begin{cases} 2/(n+1), & n \text{ четное } (n \leq 2N-2), \\ 0, & n \text{ нечетное } (n \leq 2N-1), \\ \int_{-1}^1 \mu^n d\mu & (n=0, 1, \dots, 2N-1). \end{cases} \quad (4.46)$$

Иными словами, вычисление с помощью N -точечной квадратуры Гаусса приводит к точным значениям интегралов для всех полиномов, порядок которых меньше $2N$. Ни одна N -точечная формула не обладает таким свойством. В этом смысле квадратура Гаусса может быть названа «наилучшей».

Если в методе дискретных ординат [т. е. в уравнениях (4.42) и (4.44)] используется квадратура Гаусса, то этот метод называется методом Чандрасекара.

Мы остановимся здесь на методе Чандрасекара в связи с тем, что он полностью эквивалентен P_L -методу (при условии, что на дифференциальное сечение рассеяния наложены определенные ограничения)*. Этот замечательный факт впервые был установлен Рихтмайером [17]. Позднее доказательства эквивалентности P_L -уравнений и уравнений Чандрасекара были независимо предложены Герцелем [18] и Гестом [19]**.

Для установления связи между P_L -методом и методом дискретных ординат поступим следующим образом. Во-первых, подставим выражение (4.44) в уравнения (4.42) и напишем

$$\begin{aligned} & \mu_i \frac{dF_i}{dx} + \Sigma_{tot} F_i = \\ & = \sum_{l'=0}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{l'} P_{l'}(\mu_i) + \frac{1}{2} S \quad (i=1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Мы опустим здесь аргументы потока, сечений и источников. По определению $F_i = F(\mu_i, x)$. Предположим теперь, что для $l > N$ $\Sigma_{s, l} = 0$ ***. Из $P_N(\mu_i) = 0$ следует, что

$$\begin{aligned} & \mu_i \frac{dF_i}{dx} + \Sigma_{tot} F_i = \\ & = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{l'} P_{l'}(\mu_i) + \frac{1}{2} S. \end{aligned} \quad (4.48)$$

* Связь между P_L -методом и методом дискретных ординат уже обсуждалась в гл. 3, однако наш подход несколько отличается от подхода Карлсона и Латропа.

** Соотношения эквивалентности, полученные Рихтмайером, Герцелем и Гестом, имеют много общего, однако они отнюдь не идентичны. Весьма полезно ознакомиться с работами всех трех авторов по этому вопросу.

*** Если это условие не выполняется, то уравнения Чандрасекара и P_L -уравнения не эквивалентны.

Умножим далее уравнение (4.48) на $\omega_i P_l(\mu_i)$, где $0 < l \leq N - 1$. Используя соотношение (4.7), можно написать

$$\begin{aligned} \omega_i \left[\left(\frac{l+1}{2l+1} \right) P_{l+1}(\mu_i) + \left(\frac{l}{2l+1} \right) P_{l-1}(\mu_i) \right] \frac{dF_i}{dx} + \Sigma_{tot} \omega_i F_i = \\ = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} \hat{f}_{l'} \omega_i P_l(\mu_i) P_{l'}(\mu_i) + \frac{1}{2} \omega_i P_l(\mu_i) S \end{aligned} \quad (4.49)$$

$(l=1, \dots, N-1).$

Просуммировав эти уравнения по i , получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{l+1}{2l+1} \right) \frac{df_{l+1}}{dx} + \left(\frac{l}{2l+1} \right) \frac{df_{l-1}}{dx} + \Sigma_{tot} f_l = \\ = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} \hat{f}_{l'} \sum_{i=1}^N \omega_i P_l(\mu_i) P_{l'}(\mu_i) + \\ + \frac{1}{2} S \sum_{i=1}^N \omega_i P_l(\mu_i) \quad (l=1, 2, \dots, N-1). \end{aligned} \quad (4.50)$$

При $l+l' < 2N$ имеем

$$\sum_{i=1}^N \omega_i P_{l'}(\mu_i) P_l(\mu_i) = \int_{-1}^1 P_l(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (4.51)$$

где $\delta_{ll'}$ — символ Кронекера. Из условий (4.51) следует

$$\sum_{i=1}^N \omega_i P_l(\mu_i) = \int_{-1}^1 P_l(\mu) d\mu = 2\delta_{l0}, \quad (4.52)$$

откуда

$$\left(\frac{l+1}{2l+1} \right) \frac{df_{l+1}}{dx} + \left(\frac{l}{2l+1} \right) \frac{df_{l-1}}{dx} + (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, l}) f_l = 0 \quad (l=1, \dots, N-1). \quad (4.53)$$

Если $l=N-1$, то

$$P_{l+1}(\mu_i) = P_N(\mu_i) = 0.$$

Таким образом, из уравнения (4.49) вытекает, что

$$\left[\frac{N-1}{2(N-1)+1} \right] \frac{df_{(N-1)-1}}{dx} + [\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, (N-1)}] f_{N-1} = 0. \quad (4.54)$$

С другой стороны, при $l=0$

$$\frac{df_1}{dx} + (\Sigma_{tot} - \Sigma_{s, 0}) f_0 = S. \quad (4.55)$$

Уравнения (4.53), (4.54) и (4.55) в точности совпадают с P_L -уравнениями при $L = N - 1^*$.

Очевидно, что L нечетно при N четных. Любой четный полином Лежандра содержит постоянный член, так что $P_N(0) \neq 0$ при нечетных N . Поэтому для всех $\mu_i \neq 0$ $i = 1, 2, \dots, N$ и из кинетического уравнения следует, что F_i непрерывны по x на границах раздела сред. Следовательно, все моменты f_l должны быть непрерывны на границах, и мы видим, что метод Чандрасекара полностью эквивалентен P_L -методу, сформулированному в разд. 4.1.2.

* См. для сравнения уравнение (4.9).

При четных L один из корней уравнения $P_N(\mu) = 0$ равен нулю. Пусть, например, $\mu_i = 0$. Тогда

$$\Sigma_{tot} F_j = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{l'} P_{l'}(0) + \frac{1}{2} S, \quad (4.56)$$

так что F_j не обязательно непрерывны на границах раздела сред. Ни один из моментов не является непрерывным, однако разность

$$f_l - P_l(0) f_0 = \sum_{i=1}^N \omega_i F_i P_l(\mu_i) - P_l(0) \sum_{i=1}^N \omega_i F_i$$

не содержит F_i и, следовательно, непрерывна. Непрерывность этой разности в точности согласуется с условиями сшивки, полученными Дэвисом (несколько иным способом) для нечетных P_L -приближений.

Установив связь между P_L -уравнениями и методом дискретных ординат, мы сможем теперь интерпретировать граничные условия Марка. Эти условия заключаются просто в том, что поток обращается в нуль при всех «входящих» ординатах, т. е. при всех значениях μ , которые соответствуют направлениям из вакуума в рассеивающую среду. Можно также показать, что те же самые условия получаются, если рассеивающая среда граничит с полубесконечным пространством, заполненным чисто поглощающей средой без источников*. В поглощающей среде, простирающейся от $x = x_0$ до $x = \infty$, имеем

$$F_i(x) = C_i e^{-\Sigma x / \mu_i},$$

где Σ — сечение поглощения. При отрицательных μ_i и отсутствии источников на бесконечности значения $F_i(\infty)$ должны обратиться в нуль. Для этого необходимо положить $C_i = F_i(x \geq x_0)$ равными нулю.

Мы надеемся, что достаточно ясно показали почти полную эквивалентность P_L -уравнений и уравнений Чандрасекара. Тем не менее не следует считать, что какая-то из этих двух групп уравнений является излишней. Каждая из них помогает понять характерные черты P_L -приближения. Кроме того, в дальнейшем мы увидим, что такие различные формулировки P_L -приближения приводят к различным методам решения, каждый из которых обладает определенными преимуществами перед другими.

Нетрудно показать, что двойное P_L -приближение также имеет связь с методом дискретных ординат. Уравнения двойного P_L -приближения можно получить, если в методе дискретных ординат использовать квадратурные формулы Гаусса отдельно для интервалов $-1 \leq \mu \leq 0$ и $0 \leq \mu \leq 1$. Мы не будем выводить здесь этих уравнений, а отошлем читателя к работе Гаста [19].

§ 4.2. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ПЛАСТИН

4.2.1. Выше были получены системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка, которые определяют поток нейтронов в P_L - и двойном P_L -приближениях. Используя, например, метод дискретных ординат, мы нашли, что

$$D \frac{dF}{dx} + \Sigma F = \Sigma_s F + \frac{1}{2} S. \quad (4.57)$$

* Это утверждение было сделано без доказательства в разд. 4.1.2.

Здесь мы просто переписали уравнения (4.48) в матричной форме, обозначив $F \equiv \begin{pmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_n \end{pmatrix}$, а $S \equiv \begin{pmatrix} S \\ \vdots \\ S \end{pmatrix}$. Другие символы обозначают матрицы

$$D = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \mu_N \end{pmatrix} \text{ и т. п.}$$

Для определения потока к уравнениям (4.57) должны быть добавлены граничные условия при $x = 0$ и $x = x_R$.

Для получения формального решения введем матрицу M [20], удовлетворяющую уравнению

$$D \frac{dM}{dx} + \Sigma M = \Sigma_s M \quad \text{при } M(0) = I. \quad (4.58)$$

Определим также вектор V , удовлетворяющий уравнениям метода дискретных ординат и нулевому граничному условию при $x = 0$, т. е.

$$D \frac{dV}{dx} + \Sigma V = \Sigma_s V + \frac{1}{2} S, \quad V(0) = 0. \quad (4.58a)$$

Из линейности уравнений метода дискретных ординат следует, что любое решение $u(x)$ может быть записано в виде

$$u(x) = M(x)u(0) + V(x)$$

и, следовательно,

$$F(x) = M(x)F(0) + V(x). \quad (4.59)$$

Разумеется, нельзя записать $F(0)$ в общем виде. Однако граничные условия в нуле (например, условия отражения или вакуумные граничные условия) состоят обычно из $N/2$ линейных условий, накладываемых на $F(0)$. Аналогичным образом имеется $N/2$ условий на внешней границе для $F(x_R)$. С помощью этих N условий, которые должны быть добавлены к соотношению (4.49), поток может быть определен в начале координат, а следовательно, и в любой другой точке.

Чтобы практически использовать такое формальное решение, выберем некоторую сетку и преобразуем уравнения (4.58) и (4.58a) с помощью разностной схемы. Можно, например, написать*

$$D \left(\frac{M_{n+1} - M_n}{x_{n+1} - x_n} \right) + (\Sigma_n - \Sigma_{s,n}) M_n = 0, \quad M_0 = I; \quad (4.60a)$$

$$D \left(\frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \right) + (\Sigma_n - \Sigma_{s,n}) V_n = \frac{1}{2} S, \quad V_0 = 0. \quad (4.60b)$$

Уравнения (4.60) могут быть использованы для последовательного определения значений M_n и V_n . К сожалению, такой процесс оказывается неустойчивым по отношению к увеличению погрешности, возникающей при округлении. Мы сейчас увидим, что это означает.

Допустим, что при решении уравнения (4.60b) в точке m появилась погрешность, связанная с округлением. Будем также предполагать, что в других точках погрешностей округления не возникает. В любой точке $n > m$ мы получим вместо V_n другой вектор \tilde{V}_n , который уже не удовлетворяет уравнению (4.60b). Он удовлетворяет, однако, очень близкому уравнению

$$D \frac{\tilde{V}_{n+1} - \tilde{V}_n}{x_{n+1} - x_n} + (\Sigma_n - \Sigma_{s,n}) \tilde{V}_n = \frac{1}{2} S_n + D \frac{\varepsilon}{x_{n+1} - x_n} \delta_{nm}.$$

* Уравнения (4.60) не очень точны. Мы написали их с чисто иллюстративной целью.

Через ε обозначен малый вектор, величина которого зависит от величины погрешности округления. Если $\varepsilon_n = \tilde{V}_n - V_n$, то при $n \leq m$ $\varepsilon_n = 0$, $\varepsilon_{m+1} = \varepsilon$, а при $n > m$

$$D \frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{x_{n+1} - x_n} + (\Sigma_n - \Sigma_{s, n}) \varepsilon_n = 0. \quad (4.61)$$

Теперь определим векторную функцию $\varepsilon(x)$; такую, что при $x > x_m$

$$D \frac{d\varepsilon(x)}{dx} + [\Sigma(x) - \Sigma_s(x)] \varepsilon(x) = 0 \quad (4.62)$$

и $\varepsilon(x_m) = \varepsilon$. Легко видеть, что (4.61) — разностное уравнение, полученное из уравнения (4.62). Следовательно, можно ожидать, что ε_n будет приближенно равно $\varepsilon(x_n)^*$, и можно использовать уравнение (4.62) вместо (4.61) для изучения погрешности округления. Такая процедура полезна тем, что форма уравнения (4.62) не связана с использованием конкретной разностной схемы. Почти при любом приближенном способе решения уравнения (4.59) возрастание погрешности округления будет определяться уравнением (4.62).

Для дальнейшего удобно умножить (4.62) на D^{-1} и записать

$$\frac{d\varepsilon(x)}{dx} = -K(x) \varepsilon(x). \quad (4.63)$$

Здесь $K(x) = D^{-1} [\Sigma(x) - \Sigma_s(x)]$. Прежде чем продолжить рассуждения, остановимся на свойствах $K(x)$. Предположим для простоты, что материальные свойства рассеивающей среды пространственно независимы. В этом случае собственные значения ядра $K(x)$ имеют конкретный смысл. Для получения окончательных результатов положим в уравнении (4.57) $S = 0$ и исследуем экспоненциальные решения однородных уравнений. Пусть $F(x) = fe^{-kx}$. Здесь f — вектор, а k — скаляр. Мы получим, что

$$[kl - D^{-1}(\Sigma - \Sigma_s)]f \equiv (kl - K)f = 0.$$

Таким образом, собственные значения K_μ ядра $K(x)$ являются допустимыми значениями константы затухания k . В некоторых работах [22, 23] были получены весьма полезные результаты, касающиеся свойств этих собственных значений. Выяснено, что если дифференциальное сечение рассеяния положительно, то собственные значения ядра $K(x)$ действительны и образуют пары равных по абсолютной величине положительных и отрицательных значений. Более того, совокупность собственных векторов f_μ ядра $K(x)$ обладает свойством полноты. Разложив $\varepsilon(x)$ по собственным векторам

$$\varepsilon(x) = \sum_{\mu=1}^N c_\mu(x) f_\mu,$$

получим с учетом уравнения (4.63), что $dc_\mu/dx = -K_\mu c_\mu$. Отсюда

$$\varepsilon(x) = 0, \quad x < x_m;$$

$$\varepsilon(x) = \sum_{\mu=1}^N c_\mu(x_m) f_\mu e^{-K_\mu(x-x_m)}, \quad x \geq x_m.$$

Так как половина величин K_μ имеет отрицательные значения, то при стремлении x к бесконечности величина ε неограниченно возрастает [за исключением того случая, когда обращаются в нуль $c_\mu(x_m)$ для всех μ , соответствующих отрицательным значениям K_μ].

Какие выводы можно сделать из этого анализа? В любой практической задаче значения x лежат в определенных пределах. Ни x , ни $\varepsilon(x)$ не могут обратиться в бесконечность. Однако, если некоторая область пространства имеет

* Более строгое доказательство этого утверждения содержится в книге Хенрики по разностным уравнениям [21].

ширину, во много раз превышающую среднюю длину свободного пробега нейтрона, то погрешность, связанная с округлением, может оказаться весьма большой. Практически подобная проблема возникает даже в том случае, когда система хотя и не содержит оптически широких областей, но в целом является достаточно оптически широкой.

Нельзя сказать, чтобы описанный метод был бесполезен. Им можно пользоваться и он действительно был использован Дейчем [24]* для решения определенного типа задач. Однако в общем случае использование этого метода не может быть рекомендовано. Чтобы уменьшить влияние погрешностей округления при решении одномерных транспортных задач, приходится применять другие, более сложные методы.

4.2.2. Рассмотрим теперь наиболее старый итерационный метод, позволяющий контролировать погрешность, связанную с округлением**. Предположим для простоты, что рассеяние изотропно. В этом случае уравнения метода дискретных ординат имеют вид

$$\mu_i \frac{dF_i}{dx} + \Sigma_{tot} F_i = \frac{\Sigma_s}{2} \varphi + \frac{S}{2}, \quad \varphi = \sum_{i=1}^N \omega_i F_i. \quad (4.64)$$

Удобно перенумеровать ординаты следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_i > 0 & \text{ при } i = 1, 2, \dots, N/2, \\ \mu_i < 0 & \text{ при } i = 1 + N/2, 2 + N/2, \dots, N. \end{aligned}$$

В этом случае получим на левой границе условия

$$F_i(0) = \sum_{j=1+N/2}^N L_{ij} F_j(0), \quad i \leq N/2 \quad (4.65)$$

и аналогично на правой границе

$$F_i(x_R) = \sum_{j=1}^{N/2} R_{ij} F_j(x_R), \quad i > N/2. \quad (4.66)$$

Чтобы начать итерационный процесс, зададимся некоторым приближенным выражением для скалярного потока $\varphi(x) \approx \varphi^{[0]}(x)$, а также одностороннего тока нейтронов, влетающих через левую границу $F_i(0) \approx F_{iL}^{[1]}$, $i \leq N/2$. Поток нейтронов, движущихся направо, можно рассчитать теперь с помощью уравнений

$$\mu_i \frac{dF_i^{[1]}}{dx} + \Sigma_{tot} F_i^{[1]} = \frac{\Sigma_s}{2} \varphi^{[0]} + \frac{S}{2}, \quad i \leq N/2 \quad (4.67)$$

с граничными условиями

$$F_i^{[1]}(0) = F_{iL}^{[1]}, \quad i \leq N/2. \quad (4.68)$$

Уравнения (4.67) и условия (4.68) определяют поток нейтронов, движущихся направо, для всех точек, в том числе и на внешней границе. Для расчета потока нейтронов, движущихся налево, используем внешние граничные условия

$$F_i^{[1]}(x_R) = \sum_{j=1}^{N/2} R_{ij} F_j^{[1]}(x_R), \quad i > N/2 \quad (4.69)$$

и уравнения

$$\mu_i \frac{dF_i^{[1]}}{dx} + \Sigma_{tot} F_i^{[1]} = \frac{\Sigma_s}{2} \varphi^{[0]} + \frac{S}{2}, \quad i > N/2. \quad (4.70)$$

* Дейч разработал специальную методику, позволившую свести к минимуму погрешность округления.

** Мы обсудим этот метод применительно к P_L -приближениям, однако он в основном используется для других методов дискретных ординат.

На этом заканчивается первая итерация. Переход к следующей итерации начинается с вычисления величин

$$\varphi^{[1]}(x) = \sum_{i=1}^N \omega_i F_i^{[1]}(x);$$

$$F_{iL}^{[2]} = \sum_{j=1+N/2}^N L_{ij} F_j^{[1]}(0), \quad i \leq N/2.$$

Итерационный процесс может быть продолжен вплоть до выполнения какого-либо критерия сходимости.

При решении уравнения (4.67) расчет выполняется шаг за шагом по оси x слева направо. При решении уравнения (4.70) движение происходит справа налево. Таким образом, в обоих случаях направление движения совпадает с направлением движения нейтронов. Благодаря этому погрешность, связанная с округлением, не увеличивается. Предположим, что при решении уравнения (4.67) погрешность округления возникла в точке x_0 . Можно легко показать, что если разностная аппроксимация выбрана правильно и шаг достаточно мал, то

$$\varepsilon_i^{[1]}(x) \approx \varepsilon_i^{[1]}(x_0) e^{-\frac{\Sigma_{tot}}{\mu_i}(x-x_0)}, \quad x \geq x_0, \quad i \leq N/2, \quad (4.71)$$

причем $\varepsilon_i^{[1]}(x) = 0$ при $x < x_0$. Из положительности μ_i следует, что при движении вправо $\varepsilon_i^{[1]}(x)$ экспоненциально падает. Подобным же образом можно получить экспоненциальное уменьшение погрешности, связанной с округлением, при определении потока нейтронов, движущихся влево.

Покажем теперь, что описанный итерационный процесс сходится. Наши знания не позволяют получить доказательство сходимости, если в качестве граничных условий используются условия Маршака. Однако это можно сделать, если использовать граничные условия отражения или условия Марка. Как и прежде, мы избегаем необходимости выбирать какую-то определенную разностную схему, предполагая, что разностные уравнения полностью эквивалентны дифференциальным уравнениям (4.60) и (4.69).

Введем следующие обозначения

$$G_i^{[v]} = F_i^{[v+1]} - F_i^{[v]}, \quad \psi^{[v]} = \varphi^{[v+1]} - \varphi^{[v]}.$$

Далее находим

$$\mu_i \frac{dG_i^{[v]}}{dx} + \Sigma_{tot} G_i^{[v]} = \frac{\Sigma_s}{2} \psi^{[v-1]} \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (4.72)$$

$$G_i^{[v]}(0) = \sum_{j=1+N/2}^N L_{ij} G_j^{[v-1]}(0) \quad (i \leq N/2), \quad (4.73)$$

$$G_i^{[v]}(x_R) = \sum_{j=1}^{N/2} R_{ij} G_j^{[v]}(x_R) \quad (i > N/2). \quad (4.74)$$

Уравнения (4.73) и (4.74) записаны в совершенно общем виде, однако следует еще раз подчеркнуть, что наш метод доказательства непригоден для произвольных граничных условий. Мы можем пользоваться только либо условиями Марка, либо граничными условиями отражения. Для упрощения доказательства выберем на левой границе условия Марка, а на правой — граничные условия отражения. В этом случае $G_i^{[v]}(0) = 0$ при $i \leq N/2$. Если выбрана функция $\psi^{[0]}(x)$, то уравнения (4.72) и (4.74) определяют $G^{[v]}(x)$ и $\psi^{[v]}(x)$ для всех x и для $v > 0$. Разумеется, функция $\psi^{[0]}(x)$ не обязана быть всюду положительной, так что удобно ввести функцию $\psi_+^{[0]}(x) = |\psi^{[0]}(x)|$. Подобно тому, как $\psi^{[0]}(x)$ определяет

функции $G^{[v]}(x)$ и $\psi^{[v]}(x)$ при последующих итерациях, функция $\psi_+^{[0]}(x)$ определит $G_+^{[v]}(x)$ и $\psi_+^{[v]}(x)$. Можно показать, что все $\psi_+^{[v]}$ и $G_+^{[v]}$ являются положительными функциями и что при любых v

$$\begin{aligned}\psi_+^{[v]}(x) &\geq |\psi^{[v]}(x)|, \\ G_{+i}^{[v]}(x) &\geq |G_i^{[v]}(x)|.\end{aligned}\quad (4.75)$$

Из условия баланса нейтронов имеем

$$\int_0^{x_R} \Sigma_s(x) \psi_+^{[v-1]}(x) dx = \int_0^{x_R} \Sigma_{tot}(x) \psi_+^{[v]}(x) dx + J_+^{[v]}(0), \quad (4.76)$$

где

$$J_+^{[v]}(0) = \left| \sum_{i=1+N/2}^N \omega_i \mu_i G_{+i}^{[v]}(0) \right|.$$

Отсюда

$$\begin{aligned}\int_0^{x_R} \Sigma_s(x) \psi_+^{[v-1]}(x) dx &\equiv S^{[v-1]} = \int_0^{x_R} \Sigma_s(x) \psi_+^{[v]}(x) dx + \\ &+ \left[\int_0^{x_R} \Sigma_a(x) \psi_+^{[v]}(x) dx + J_+^{[v]}(0) \right]\end{aligned}$$

или

$$S^{[v-1]} = S^{[v]} + I_+^{[v]}.$$

Используя последнее соотношение, находим, что

$$S^{[v-1]} = S^{[v+1]} + I_+^{[v+1]} + I_+^{[v]} = S^{[v+2]} + I_+^{[v+2]} + I_+^{[v+1]} + I_+^{[v]},$$

и после многократных повторений получим для сколь угодно больших значений n

$$S^{[v-1]} = S^{[v+n]} + \sum_{m=1}^n I_+^{[v+m]}.$$

Ввиду того что все $I_+^{[v]}$ положительны и все $S^{[v-1]}$ ограничены,

$$\lim_{v \rightarrow \infty} I_+^{[v]} = 0.$$

Следовательно,

$$\lim_{v \rightarrow \infty} J_+^{[v]}(0) = 0,$$

так что

$$\lim_{v \rightarrow \infty} G_{+i}^{[v]}(0) = 0 \quad \text{для всех } i > N/2. \quad (4.77)$$

Читатель может самостоятельно убедиться в том, что условие (4.77) выполняется только в том случае, если

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \psi_+^{[v]}(x) = 0,$$

и, наоборот, последнее соотношение невозможно, если не выполняется условие

$$\lim_{v \rightarrow \infty} G_i^{[v]}(x) = 0 \quad (\text{для всех } i).$$

Отсюда следует, что при увеличении v $F_i^{[v]}(x)$ стремится к конечному пределу.

Ясно, что величина $l_+^{[v]}$ характеризует скорость исчезновения нейтронов. Интуитивно чувствуется, что вследствие исчезновения нейтронов (связанного с утечкой и поглощением) функция $G_i^{[v]}(x)$ уменьшается (по абсолютной величине) от итерации к итерации. Поэтому следует ожидать, что если размеры системы велики по сравнению со средней длиной свободного пробега и если поглощение мало по сравнению с рассеянием, то сходимость итерационного процесса будет очень слабой. Наше доказательство сходимости может быть легко модифицировано, с тем чтобы оно оказалось пригодным к задаче расчета ячейки*. При этом $l_+^{[v]}$ будет иметь смысл скорости поглощения нейтронов. Ввиду отсутствия утечки сходимость итерационного процесса будет тем меньше, чем меньше сечение поглощения (при фиксированном полном сечении).

Описанный итерационный процесс в принципе очень прост. По существу это метод последовательных столкновений. Поэтому доказательство сходимости может быть получено с помощью простых физических аргументов. Метод неудобен в одном отношении. Мы не можем так модифицировать скорость рассеяния, чтобы можно было непосредственно использовать окончательные величины, определяющие поток нейтронов, летящих только направо или только налево. Чтобы устранить этот дефект, необходимо изменить итерационные уравнения. Вместо уравнений (4.66) и (4.69) постулируем, что

$$\mu_i \frac{dF_i^{[1]}}{dx} + \left[\Sigma_{tot} - \frac{\Sigma_s}{2} \omega_i \right] F_i^{[1]} = \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \omega_j F_j^{[1]} + \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=i+1}^N \omega_j F_j^{[0]} + \frac{S}{2},$$

а для последующих итераций

$$\mu_i \frac{dF_i^{[v]}}{dx} + \left[\Sigma_{tot} - \frac{\Sigma_s}{2} \omega_i \right] F_i^{[v]} = \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \omega_j F_j^{[v]} + \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=i+1}^N \omega_j F_j^{[v-1]} + \frac{S}{2}. \quad (4.78)$$

Разумеется, мы по-прежнему будем двигаться направо, рассчитывая поток нейтронов, движущихся направо, и двигаться налево при расчете нейтронов, движущихся налево. Двигаясь, например, направо и достигнув некоторой точки x , мы прежде всего вычислим $F_1^{[v]}(x)$ с помощью уравнения

$$\mu_1 = \frac{dF_1^{[v]}}{dx} + \left[\Sigma_{tot} - \frac{\Sigma_s}{2} \omega_1 \right] F_1^{[v]} = \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=2}^N \omega_j F_j^{[v-1]} + \frac{S}{2}, \quad (4.79)$$

а затем $F_2^{[v]}$ с помощью уравнения

$$\mu_2 \frac{dF_2^{[v]}}{dx} + \left[\Sigma_{tot} - \frac{\Sigma_s}{2} \omega_2 \right] F_2^{[v]} = \frac{\Sigma_s}{2} \omega_1 F_1^{[v]} + \frac{\Sigma_s}{2} \sum_{j=3}^N \omega_j F_j^{[v-1]} + \frac{S}{2} \quad (4.80)$$

и т. д. [25].

Сходимость такого процесса (применительно к конечно-разностным уравнениям) доказана в работе [28]. В той же самой работе автором показано, что этот второй процесс сходится быстрее, чем первый. Непосредственное использование физических величин часто является более выгодным в расчетах, включающих матричные итерационные процессы**. Можно ожидать, что такой прием окажется полезным и в нашем случае.

* При расчете ячейки граничные условия отражения должны быть использованы на обеих границах.

** См., например, [26].

Преимущества, получаемые от использования физических величин, покупаются дорогой ценой. При решении уравнений (4.79) и (4.80) приходится запоминать векторный поток для всех значений угла и во всех точках пространственной сетки. При решении уравнений (4.66)—(4.70) необходимо запоминать в каждой точке лишь значения скалярного потока. Поэтому, если запоминающее устройство вычислительной машины недостаточно велико, то решать уравнения, записанные относительно физических величин, не представляется возможным.

До сих пор мы ничего не сказали о методах решения разностных уравнений, однако конечно-разностные приближения достаточно полно обсуждались другими авторами [16]. Здесь мы рассматриваем этот вопрос очень коротко. Обычно уравнения метода дискретных ординат записывают в центрально-разностном виде. Иными словами, уравнения [например, уравнения (4.64)] записываются в средних точках интервалов в предположении, что

$$\left[\frac{dF_i}{dx} \right]_{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{(F_i)_{n+1} - (F_i)_n}{x_{n+1} - x_n} \quad ; \quad (F_i)_{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{(F_i)_{n+1} + (F_i)_n}{2} \quad (4.81)$$

и т. д. Здесь индекс n относится к n -й точке сетки,

$$x_{n+\frac{1}{2}} \equiv (x_{n+1} + x_n)/2.$$

В этом приближении уравнения (4.64) имеют форму

$$\begin{aligned} \mu_i \left[\frac{(F_i)_{n+1} - (F_i)_n}{x_{n+1} - x_n} \right] + \frac{(\Sigma_{tot})_{n+\frac{1}{2}}}{2} \left[(F_i)_{n+2} + (F_i)_n \right] = \\ = \frac{(\Sigma_s)_{n+\frac{1}{2}}}{4} \left[\Phi_{n+1} + \Phi_n \right] + \frac{S_{n+1} + S_n}{4}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Большинство авторов выводит уравнения (4.82) с помощью интегрирования (4.64) по формуле трапеции от x_n до x_{n+1} ; разумеется, такой подход вполне оправдан.

К сожалению, использование уравнений (4.82) может привести к отрицательным значениям потока, если шаг сетки недостаточно мал. Легче всего это можно увидеть, рассматривая задачу о поглощающей пластине конечных размеров, в середине которой имеются плоские источники. Можно показать, что

$$(F_i)_n = \left(\frac{1 - \frac{\Sigma \Delta}{2\mu_i}}{1 + \frac{\Sigma \Delta}{2\mu_i}} \right)^n (F_i)_0,$$

где Δ — величина шага. Таким образом, при $\frac{\Sigma \Delta}{2\mu_i} > 1$ величина F_i будет испытывать затухающие колебания*. Такие колебания можно устранить, если использовать «нецентральное» приближение при вычислении $\mu_i \frac{dF_i}{dx}$; однако нецентральная разностная схема, вообще говоря, менее точна, чем центрально-разностная.

Более сложные конечно-разностные схемы редко используются при расчетах методом дискретных ординат**. Это обстоятельство вызвано несколькими

* Аналогичное явление имеет место в многогрупповых расчетах, когда уравнения возрастной теории решаются с помощью центрально-разностного метода (вдоль оси лентаргии).

** См. обсуждение метода Шмидта в § 4.3.

причинами, одна из которых заслуживает особого внимания. В разностных схемах более высокого порядка обычно исходят из формул Рунге—Кутты, основанных на разложении в ряд Тейлора. В любом случае необходимо иметь информацию о поведении источников между узлами сетки вблизи начала. Однако, поскольку в нашем случае член, эквивалентный источникам, зависит от скалярного потока, получить такую информацию оказывается нелегко.

4.2.3. Как уже было отмечено, быстрота сходимости метода, описанного в разд. 4.2.2, в значительной мере зависит от величин l , определяющих скорость исчезновения нейтронов. Если скорость исчезновения нейтронов мала по сравнению со скоростью рассеяния, то сходимость оказывается очень медленной. Таким образом, преодолев трудности, связанные с погрешностями округления, мы создали проблемы сходимости. Сходимость может быть ускорена различными способами*, однако ни один из них не является полностью удовлетворительным. Поэтому представляется целесообразным вернуться назад и пойти по совершенно иному пути.

Развитый ниже метод используется в программе FLIP** [29]. Чтобы познакомиться с этим методом, удобно рассмотреть его применение для решения P_3 -уравнений:

$$\begin{aligned} F_1' + \sum_a F_0 &= S, \\ \left(\frac{2}{3}\right) F_2' + \frac{1}{3} F_0' + \sum_1 F_1 &= 0, \\ \left(\frac{3}{5}\right) F_3' + \left(\frac{2}{5}\right) F_1' + \sum_2 F_2 &= 0, \\ \left(\frac{3}{7}\right) F_2' + \sum_3 F_3 &= 0. \end{aligned}$$

В переменных $\varphi_0 = F_0 + 2F_2$ и $\varphi_1 = F_2$ можно написать

$$\left. \begin{aligned} F_1' + \sum_a \varphi_0 &= S - 2 \sum_a \varphi_1, \\ \frac{1}{3} \varphi_0' + \sum_1 F_1 &= 0, \\ \frac{3}{5} F_3' + \frac{2}{5} F_1' + \sum_2 \varphi_1 &= 0, \\ \frac{3}{7} \varphi_1' + \sum_3 F_3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.83)$$

Исключив F_1 и F_3 , получим

$$\left. \begin{aligned} -D_1 \varphi_0'' + \sum_a \varphi_0 &= S - 2 \sum_a \varphi_1, \\ -D_2 \varphi_1'' + \alpha \varphi_1 &= -\frac{2}{3} S + \frac{2}{3} \sum_a \varphi_1, \end{aligned} \right\} \quad (4.84)$$

где $D_1 = \frac{1}{3\Sigma_1}$, $D_2 = \frac{3}{7\Sigma_3}$ и $\alpha = \frac{5}{3} \Sigma_2 + \frac{4}{3} \Sigma_a$. Отметим, что $-D_1 \varphi_0' = F_1$, $-D_2 \varphi_1' = F_3$. Уравнения (4.84) формально идентичны двухгрупповым уравнениям для размножающих систем, содержащих источники. Эти уравнения можно решать итерационным методом, сходным со степенным методом, т. е.

$$\left. \begin{aligned} -D_1 \varphi_0^{[v]''} + \sum_a \varphi_0^{[v]} &= S + 2 \sum_a \varphi_1^{[v-1]}, \\ -D_2 \varphi_1^{[v]''} + \alpha \varphi_1^{[v]} &= -\frac{2}{3} S + \frac{2}{3} \sum_a \varphi_0^{[v]}. \end{aligned} \right\} \quad (4.85)$$

* Некоторые способы ускорения сходимости описываются в гл. 3. См. также работы [28] и [41].

** Метод, который мы будем называть «FLIP-метод», полностью аналогичен методу последовательных приближений, описанному Г. И. Марчуком [12].

Так как в общем случае нельзя заранее сказать ничего определенного о поведении функции φ_1 , то разумно положить $\varphi_1^{[0]} = 0$. В этом случае $\varphi_1^{[1]}$ является решением обычного диффузионного уравнения. Это решение является хорошим приближением к истинному скалярному потоку.

Используя метод и обозначения гл. 1, перепишем уравнения (4.85) в конечно-разностном виде:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{D_{1n+}}{h_{n+}} [\varphi_{0(n+1)}^{[v]} - \varphi_{0n}^{[v]}] + \frac{D_{1n}}{h_{n-}} [\varphi_{0n}^{[v]} - \varphi_{0(n-1)}^{[v]}] + \\
 & + \frac{1}{2} [\sum_{an+} h_{n+} + \sum_{an-} h_{n-}] \varphi_{0n}^{[v]} = \frac{1}{2} [S_{n+} h_{n+} + S_{n-} h_{n-}] + \\
 & \quad + [\sum_{an+} h_{n+} + \sum_{an-} h_{n-}] \varphi_{1n}^{[v-1]}, \tag{4.86}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{D_{2n+}}{h_{n+}} [\varphi_{1(n+1)}^{[v]} - \varphi_{1n}^{[v]}] + \frac{D_{2n-}}{h_{n-}} [\varphi_{1n}^{[v]} - \varphi_{1(n-1)}^{[v]}] + \\
 & + \frac{1}{2} [\alpha_{n+} h_{n+} + \alpha_{n-} h_{n-}] \varphi_{1n}^{[v]} = -\frac{1}{3} [S_{n+} h_{n+} + S_{n-} h_{n-}] + \\
 & \quad + \frac{1}{3} [\sum_{an+} h_{n+} + \sum_{an-} h_{n-}] \varphi_{0n}^{[v]}. \tag{4.87}
 \end{aligned}$$

Предположим, что функция $\varphi_1^{[v-1]}$ известна. Тогда, как указывалось в гл. 1, уравнения (4.86) могут быть решены с помощью матричной факторизации без сколько-нибудь значительного накопления погрешности, связанной с округлением. Вычислив $\varphi_0^{[v]}$, можно решить уравнение (4.87). Здесь, как и прежде, матричная факторизация позволяет избежать погрешности, связанной с округлением.

Чтобы проанализировать итерационную процедуру метода FLIP, перепишем уравнения (4.86) и (4.87) в матричной форме

$$H\Phi^{[v]} = T + M\Phi^{[v-1]} \tag{4.88}$$

и рассмотрим сопряженную краевую задачу

$$H\psi = \frac{1}{\lambda} M\psi. \tag{4.89}$$

Символами H и M обозначены матрицы, символами Φ , T и ψ — векторы. Предположим, что

$$\Phi^{[v]} = \varepsilon^{[v]} + \Phi.$$

Здесь Φ — предел, к которому стремится решение уравнения (4.88), а $\varepsilon^{[v]}$ — погрешность (вектор). Тогда

$$H\varepsilon^{[v]} = M\varepsilon^{[v-1]}. \tag{4.90}$$

В дальнейшем будем предполагать, что собственные функции уравнения (4.89) образуют полную систему*. В таком случае можно разложить векторы $\varepsilon^{[v]}$ в ряды по собственным функциям, т. е. записать

$$\varepsilon^{[v-1]} = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{[v-1]} \psi_m, \quad \varepsilon^{[v]} = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{[v]} \psi_m. \tag{4.91}$$

Подставив выражения (4.91) в (4.90), получим

$$H [\lambda_m C_m^{[v-1]} - C_m^{[v]}] \psi_m = 0. \tag{4.92}$$

* Этого предположения можно не делать, если ввести в рассмотрение сопряженные векторы. В этом случае наше рассуждение в несколько измененном виде станет строгим.

Можно показать, что оператор H не вырожден. Отсюда

$$C_m^{[v]} = \lambda_m C_m^{[v-1]},$$

$$\varepsilon^{[v]} = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{[0]} \lambda_m^v \psi_m.$$

Если λ_{max} — максимальное собственное значение и ψ_{max} — соответствующая собственная функция, то при достаточно больших v

$$\varepsilon^{[v]} \approx C \lambda_{max}^v \psi_{max}. \quad (4.93)$$

Мы видим, что погрешность стремится к нулю и итерационный процесс сходится тогда и только тогда, когда $|\lambda_{max}| \leq 1$. В работе [29] показано, что $|\lambda_{max}| \leq \frac{4}{9}$ *. Следовательно, итерационный процесс имеет для всех задач довольно быструю сходимость. После выполнения достаточно большого числа итераций соотношение (4.93) становится справедливым, и, следовательно, при каждой итерации величина погрешности уменьшается вдвое.

В работах [29] и [30] показано, что любые P_L -уравнения (подобно P_3 -уравнениям) могут быть записаны в форме FLIP-метода, т. е.

$$-D_i \varphi_i'' + \gamma_i \varphi_i = c_i S + \sum_j \alpha_{ij} \varphi_j.$$

Как и прежде,

$$-D_1 \varphi_1' = F_1, \quad -D_2 \varphi_2' = F_2 \text{ и т. д.}$$

Двойные P_L -уравнения также могут быть записаны в этой форме. Двойное P_2 - и двойное P_3 -уравнения могут быть записаны в форме FLIP-метода при условии, что $\Sigma_{s,l} = 0$ при $l > 2$. Опыт показывает, что скорость сходимости итерационного процесса достаточно высока при любом из этих приближений.

При сравнении FLIP-метода с методами, описанными в разд. 4.2.2, отчетливо видны два преимущества этого метода. Во-первых, FLIP-уравнения можно решать с помощью программ, основанных на малогрупповой диффузионной теории. Большинство таких программ после незначительных изменений могут быть использованы для расчета потоков в P_L - и двойных P_L -приближениях. Во-вторых, в FLIP-методе отсутствуют неприятные проблемы сходимости. Однако этот метод имеет и некоторые недостатки. Мы уже отмечали, что уравнения двойного P_L -приближения не всегда могут быть записаны в форме FLIP-метода. Кроме того, пока не ясно, можно ли записать уравнения, соответствующие другим методам (например, приближению Чебышева), в форме уравнений FLIP-метода.

§ 4.3. УСТОЙЧИВЫЕ НЕИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ. ПЛАСТИНЫ

4.3.1. В разд. 4.2.1 был коротко описан неитерационный расчетный метод. Этот метод оказался неудовлетворительным. Его недостаток заключался в неустойчивости по отношению к возрастанию погрешности, связанной с округлением. Поэтому мы перешли к рассмотрению итерационных методов. Следует, однако, признать, что пренебрежение неитерационными методами не совсем оправдано. Существует целый ряд вполне приемлемых неитерационных методов, которые могут быть использованы для решения P_L -уравнений или уравнений Ивона. Один из них будет продемонстрирован ниже. При этом мы будем опираться на полученные ранее результаты исследования диффузионного уравнения.

* Доказательство, приведенное в работе [29], опирается на дифференциальные уравнения (4.85). Тот же самый метод доказательства можно применить к разностным уравнениям (4.86) и (4.87), если все интегралы, фигурирующие в доказательстве, вычислить с помощью формулы трапеций.

При решении диффузионного уравнения методом Штарка производится подстановка*

$$\varphi_n = [\varphi_{n+1} + \beta_n] / \alpha_{n+1}. \quad (4.94)$$

Здесь φ_n — значение потока в n -м узле сетки, α и β — вспомогательные переменные. Очевидно, что

$$\varphi_{n+1} - \varphi_n = \varphi_{n+1} \left[1 - \frac{1}{\alpha_{n+1}} \right] - \frac{\beta_n}{\alpha_{n+1}} = P_n \varphi_{n+1} + Q_n. \quad (4.95)$$

Уравнение (4.95) можно рассматривать как линейное соотношение между потоком и током, записанное в разностной форме. Ниже мы используем подход Штарка для более высоких приближений, введя линейные соотношения между четными и нечетными моментами потока.

Начнем рассмотрение с P_L -уравнений, записанных в обозначениях метода дискретных ординат,

$$\mu_i F_i + \sum_{tot} F_i = \frac{\sum_s}{2} \sum_{j=1}^N \omega_j F_j + \frac{S}{2} \quad i = 1, 2, \dots, N = L + 1. \quad (4.96)$$

К уравнению (4.96) должны быть добавлены соответствующие граничные условия. Ради простоты пренебрежем анизотропией рассеяния и источников. Предположим далее, что $\mu_j = -\mu_i$ и $\mu_i > 0$. Обозначим

$$\chi_i = F_i + F_j, \quad \psi_i = F_i - F_j.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \mu_i \psi_i' + \sum_{tot} \chi_i &= \sum_s \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j \chi_j + S, \\ \mu_i \chi_i' + \sum_{tot} \psi_i &= 0. \end{aligned} \quad (4.97)$$

В дальнейшем будем делать подстановки, аналогичные (4.95). Запишем

$$\psi \equiv M\chi + N, \quad (4.98)$$

где ψ и χ — векторы, т. е.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \dots \\ \chi_n \end{pmatrix},$$

M — матрица, а N — вектор.

Попытаемся теперь решить вопрос, каким уравнениям должны удовлетворять M и N , чтобы ψ и χ удовлетворяли уравнениям (4.97). Запишем уравнения (4.97) в матричной форме

$$\psi' + \sum_a \chi = S, \quad (4.99)$$

$$\chi' + \sum_{tot} \psi = 0. \quad (4.100)$$

Величины \sum_a и \sum_{tot} являются $N/2 \times N/2$ -матрицами, а χ , ψ и S — векторами.

Дифференцируя уравнение (4.98), найдем, что

$$\psi' = M' \chi + M \chi' + N' = M' \chi - M \sum_{tot} \psi + N' = M' \chi - M \sum_{tot} (M\chi + N) + N'$$

или

$$\psi' = (M' - M \sum_{tot} M) \chi - M \sum_{tot} N + N'. \quad (4.101)$$

* См. гл. 1.

Подставив (4.101) в (4.99), получим

$$(M' - M \sum_{tot} M + \sum_a) \chi - M \sum_{tot} N + N' = S. \quad (4.102)$$

Предположим, что

$$M' - M \sum_{tot} M = -\sum_a, \quad (4.103)$$

$$N' - M \sum_{tot} N = S, \quad (4.104)$$

$$\psi(0) = M(0) \chi(0) + N(0). \quad (4.105)$$

Ясно, что уравнение (4.102) будет тождественно удовлетворено. Проводя выкладки в обратном порядке, можно показать, что уравнения (4.97) будут также удовлетворены вместе с соответствующими граничными условиями.

Возможно, что для читателя не очевиден смысл уравнения (4.105). Это уравнение вместе с условиями на левой границе определяет значения $M(0)$ и $N(0)$. Если, например, мы требуем, чтобы на левой границе выполнялось условие

$$\psi(0) = A\chi(0) + B,$$

то $M(0) = A$, а $N(0) = B$. Таким образом, значения $M(0)$ и $N(0)$ определяют-ся при любых граничных условиях.

Функции $M(x)$ и $N(x)$ выполняют здесь практически ту же роль, что и P_n и Q_n в уравнениях (4.95). Следовательно, используя в качестве образца метод Штарка, мы должны:

- а) определить из граничных условий $M(0)$ и $N(0)$;
- б) решить уравнения (4.103) и (4.104), проводя расчет слева направо;
- в) использовать граничное условие

$$\psi(x_R) = C\chi(x_R) + D \quad (4.106)$$

совместно с уравнением

$$\psi(x_R) = M(x_R) \chi(x_R) + N(x_R) \quad (4.107)$$

для определения $\chi(x_R)$;

- д) следуя справа налево, решить уравнение

$$\chi' = -\sum_{tot} \psi = -\sum_{tot} [M\chi + N]. \quad (4.108)$$

Наконец, мы можем вычислить ψ с помощью уравнения (4.98).

Можно показать, что описанный только что метод свободен от неустойчивости по отношению к возрастанию погрешности, связанной с округлением. Чтобы упростить рассуждения, мы как и прежде (см. разд. 4.2.1), сделаем предположение о пространственной независимости сечения во всей рассматриваемой области. В этом случае решение уравнения (4.103) можно получить в простой замкнутой форме.

Умножив сначала уравнение (4.103) слева на матрицу \sum_{tot} , получим

$$\sum_{tot} M' - \sum_{tot} M \sum_{tot} M = -\sum_{tot} \sum_a. \quad (4.109)$$

Если обозначить $\sum_{tot} M$ через Z , то можно написать

$$Z' - Z^2 = -\sum_{tot} \sum_a. \quad (4.110)$$

Из дальнейшего будет видно, что решающую роль играют свойства матрицы $\sum_{tot} \sum_a$. В действительности эта матрица тесно связана с матрицей K , введенной в разд. 4.2.1. Для вывода соотношения между этими матрицами положим, что, как и прежде, $S = 0$, и рассмотрим экспоненциальные решения уравнений метода дискретных ординат. Комбинируя уравнения (4.99) и (4.100), найдем, что

$$\chi'' - \sum_{tot} \sum_a \chi = 0. \quad (4.111)$$

Возьмем $\chi = \Phi e^{-kx}$, где Φ — вектор, а k — скаляр. Ясно, что

$$[k^2 I - \sum_{tot} \sum_a] \Phi = 0.$$

Отсюда следует, что все величины K_{μ}^2 являются собственными значениями матрицы $\Sigma_{tot}\Sigma_a$. Более того, можно показать, что матрица $\Sigma_{tot}\Sigma_a$, подобно K , может быть диагонализирована, т. е.

$$\Sigma_{tot}\Sigma_a = \mathcal{K}^2 = U^{-1} \begin{pmatrix} K_1^2 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 0 & K_2^2 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 0 & \dots & K_{N/2}^2 \end{pmatrix} U. \quad (4.112)$$

Удобно перенумеровать K_{μ} таким образом, чтобы при $\mu < N/2$ $K_{\mu} > 0$, и определить

$$\mathcal{K} = U^{-1} \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 0 & K_2 & 0 & 0 \dots \\ 0 & \dots & & K_{N/2} \end{pmatrix} U. \quad (4.113)$$

Очевидно, что $\mathcal{K}\mathcal{K} = \mathcal{K}^2$. Отметим, что мы не предполагали — и в этом не было необходимости, — что величины K_{μ} различны.

Положим теперь $Z = -\mathcal{K} + \delta$. Из соотношения (4.110) получим

$$\delta' + \mathcal{K}\delta + \delta\mathcal{K} - \delta^2 = 0. \quad (4.114)$$

Если $\delta \equiv e^{-\mathcal{K}x} P(x) e^{-\mathcal{K}x}$, то $P' - P e^{-2\mathcal{K}x} P = 0$ и $P^{-1} P' P^{-1} = e^{-2\mathcal{K}x}$. Учитывая, что $-P^{-1} P' P^{-1} = (P^{-1})'$, получаем

$$(P^{-1})' = -e^{-2\mathcal{K}x}; \quad P^{-1}(x) - P^{-1}(x_0) = - (2\mathcal{K})^{-1} [e^{-2\mathcal{K}x_0} - e^{-2\mathcal{K}x}],$$

где x_0 — любая точка внутри области. Сдвигая начало координат так, чтобы $x_0 = 0$, находим

$$\begin{aligned} P(x) &= [P^{-1}(0) - (2\mathcal{K})^{-1} (1 - e^{-2\mathcal{K}x})]^{-1} = \\ &= [1 - P(0)(2\mathcal{K})^{-1} (1 - e^{-2\mathcal{K}x})]^{-1} P(0) = G^{-1}(x) P(0). \end{aligned} \quad (4.115)$$

Можно показать, что при отсутствии размножения нейтронов в системе функция $G(x)$ не может иметь особенностей ни при каких x — конечных или бесконечных. Следовательно, функция $P(x)$ ограничена для всех x , так что

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \delta(x) = 0,$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Z(x) = -\mathcal{K},$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} M(x) = \Sigma_{tot}^{-1} \mathcal{K}.$$

Округление внесет некоторую погрешность в матрицу $M(0)$. Соответственно изменится и $P(0)$. Однако, если погрешность достаточно мала, то $G(x)$, как и прежде, не будет иметь особенностей ни при каких x и

$$\lim_{x \rightarrow \infty} M(x) = -\Sigma_{tot}^{-1} \mathcal{K}.$$

Таким образом, достаточно малая погрешность округления не может неограниченно увеличиваться в процессе расчета вдоль оси x . Напротив, при движении от начала координат погрешность округления имеет тенденцию к уменьшению. В этом смысле уравнение (4.103) устойчиво по отношению к увеличению погрешности округления. Мы предлагаем читателю самому показать, что таким же свойством обладают уравнения (4.104) и (4.108).

4.3.2. Анализ погрешностей, связанных с округлением, был проведен относительно к какой-либо конкретной разностной схеме. Наши рассуждения

полностью справедливы при использовании любой разностной схемы, если только величина шага выбрана достаточно малой. Существует большое количество разностных схем, которые могут быть использованы для решения уравнений (4.103), (4.104) и (4.108). При этом разностная аппроксимация может быть применена непосредственно к решению этих уравнений. Иными словами, уравнения метода дискретных ординат можно преобразовать с помощью (4.98) и уже затем перейти к конечно-разностному представлению. На практике такой подход используется редко*. Обычно сначала уравнения метода дискретных ординат (или P_L -уравнения) записываются в конечно-разностном виде, а уже затем производятся остальные преобразования. Такой подход использован в книге Г. И. Марчука [12]. Приступая к обсуждению метода Марчука, запишем P_L -уравнения второго порядка**

$$-D_i \varphi_i'' + \gamma_i \varphi_i = c_i S + \sum_j \alpha_{ij} \varphi_j. \quad (4.116)$$

Эти уравнения можно записать в матричной форме

$$-D\varphi'' + \Sigma\varphi = CS.$$

Следует помнить, что функции φ являются линейными комбинациями четных моментов потока. Очевидно, что D , Σ и C — матрицы, а φ и S — векторы. Уравнение (4.116) можно записать в конечно-разностном виде, подобно тому как записывается обычное диффузионное уравнение

$$\begin{aligned} -\frac{D_{n+}}{h_{n+}} [\varphi_{n+1} - \varphi_n] + \frac{D_{n-}}{h_{n-}} [\varphi_n - \varphi_{n-1}] + \frac{1}{2} [h_{n+} \Sigma_{n+} + h_{n-} \Sigma_{n-}] \varphi_n = \\ = \frac{1}{2} [h_{n+} S_{n+} + h_{n-} S_{n-}]. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Допустим теперь, что

$$\varphi_n = \alpha_{n+1}^{-1} [\varphi_{n+1} + \beta_n]. \quad (4.118)$$

Несмотря на то что в нашем случае α — матрица, а β — вектор, рекуррентные соотношения для них могут быть получены тем же способом, что и в гл. 1.

Для сопоставления метода Марчука с изложенным нами методом запишем:

$$\left. \begin{aligned} \left[\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h_{n+}} \right] &= \frac{1}{h_{n+}} [1 - \alpha_{n+1}^{-1}] \varphi_{n+1} - \frac{1}{h_{n+}} \alpha_{n+1}^{-1} \beta_n, \\ \frac{D_{n+}}{h_{n+}} [\varphi_{n+1} - \varphi_n] &= \frac{D_{n+}}{h_{n+}} [1 - \alpha_{n+1}^{-1}] \varphi_{n+1} - \frac{D_{n+}}{h_{n+}} \alpha_{n+1}^{-1} \beta_n. \end{aligned} \right\} \quad (4.119)$$

Уравнение (4.119) можно рассматривать как конечно-разностную аппроксимацию уравнения

$$-D\varphi' = \rho\varphi + \tau. \quad (4.120)$$

С другой стороны, из разд. 4.2.3 известно, что

$$-D\varphi' = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv J. \quad (4.121)$$

Следовательно, уравнение (4.120) представляет собой соотношение между J и φ :

$$J = \rho\varphi + \tau. \quad (4.122)$$

Ввиду того что функции ψ_i в уравнениях (4.97) являются линейными комбинациями нечетных моментов, а χ_i — линейными комбинациями четных моментов потока, уравнения (4.122) и (4.98) должны быть эквивалентны. Таким образом,

* См. обсуждение программы PALINDROME в разд. 4.4.2.

** См. разд. 4.2.3.

рекуррентные соотношения Марчука для α и β по существу являются уравнениями (4.103) и (4.104), записанными в конечно-разностной форме.

Конечно-разностная схема, содержащаяся в уравнении (4.117), обсуждалась в гл. 1. Уравнения, получаемые с ее помощью, просты и удобны в обращении. Естественно, однако, задать вопрос: возможно ли использование в нашем случае более сложных конечно-разностных схем, подобных тем, которые мы рассматривали в разд. 4.2.2? Там было отмечено, что использование конечно-разностных приближений более высокого порядка в сочетании с итерационным методом сопряжено с существенными трудностями. При решении кинетического уравнения итерационным методом функция, стоящая на месте источников, зависит от потока, а это значит, что величина шага должна быть достаточно мала, чтобы источники (и следовательно, поток) слабо менялись от точки к точке. Значит, для успешного использования конечно-разностных схем высокого порядка необходимо задать возможно меньшую величину шага.

Иначе обстоит дело при решении кинетического уравнения неитерационным способом. В моноэнергетических транспортных задачах пространственное распределение источников является обычно кусочно-постоянным и, следовательно, оно может быть абсолютно точно аппроксимировано даже при сравнительно небольшом числе точек разбиения. Неитерационная программа, основанная на конечно-разностной схеме высокого порядка, описана Шмидтом [31].

Изложение своего метода решения Шмидт начинает с аппроксимационной формулы

$$F(x) = A_n(x)F_n + B_n(x)S_n.$$

Здесь $F(x)$ — вектор потока в точке x , а F_n и S_n — соответственно поток и источники в n -й точке. Предполагается, что между точками x_n и x плотность источников постоянна. Если сечения также постоянны, то с помощью написанной выше формулы можно добиться любой степени точности. Чтобы рассчитать матрицы $A_n(x)$ и $B_n(x)$, можно, например, разложить поток в ряд Тейлора вблизи $x = x_0$, выписав столько членов, сколько требуется. При этом коэффициенты ряда полностью определяются P_L - или двойными P_L -уравнениями, записанными в форме (4.57). После получения $A_n(x)$ и $B_n(x)$ нетрудно построить матрицы A_1, A_2, A_3, B_1, B_2 и B_3 такие, что

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= A_1 \psi_n + A_2 \chi_n + A_3 S; \\ \chi_{n+1} &= B_1 \psi_n + B_2 \chi_n + B_3 S,\end{aligned}$$

где ψ , χ и S определяются уравнениями (4.99) и (4.100). Можно показать, что в плоской геометрии матрицы A и B не зависят явно от n , зависят лишь от сечений и величины шага. Далее Шмидт постулирует, что $\psi_n = M_n \chi_n + N_n$, так что

$$\left. \begin{aligned}M_{n+1} \chi_{n+1} + N_{n+1} &= A_1 [M_n \chi_n + N_n] + A_2 \chi_n + A_3 S, \\ \chi_{n+1} &= B_1 [M_n \chi_n + N_n] + B_2 \chi_n + B_3 S.\end{aligned} \right\} \quad (4.123)$$

После исключения χ_{n+1} из системы (4.123) получится одно уравнение, содержащее только χ_n . Положив, наконец, коэффициент при χ_n равным нулю, можно получить нелинейные рекуррентные соотношения для M и N .

Если плотность источников нейтронов кусочно-постоянна, то метод Шмидта может быть с равным успехом использован как при малогрупповых, так и при одногрупповых расчетах*. Необходимо лишь, чтобы для всех групп уравнения решались одновременно. Практически для этого необходимо, чтобы произведение числа групп и числа ординат было не слишком велико.

4.3.3. Подводя итоги, мы видим, что с помощью подстановки $\psi = M\chi + N$ мы преобразовали линейные уравнения метода дискретных ординат в нелиней-

* Метод может быть также приспособлен для решения краевых задач (при $S = 0$).

ные уравнения для M и N . Уравнение (4.103) представляет собой матричное уравнение Рикатти [32].

Читатель, разумеется, отметил, что ранее мы четко разграничили четные и нечетные моменты потока. Естественно задать вопрос, является ли это необходимым, т. е. должны ли мы обязательно разделить нечетные и четные моменты подобно тому, как мы это сделали в уравнениях (4.122) и (4.98)? Ответ отрицателен — вполне возможны и другие процедуры.

Введем, например, вектор F , компоненты которого описывают поток нейтронов, движущихся вправо,

$$F \equiv \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{N/2} \end{pmatrix},$$

и вектор

$$B \equiv \begin{pmatrix} F_{1+N/2} \\ F_{2+N/2} \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix}.$$

Положим

$$F = RB + T.$$

Имея в виду, что $F + B = \chi$ и $F - B = \psi$, легко показать, что

$$-M = (1 + R)^{-1}(1 - R), \quad (4.124)$$

$$N = 2(1 + R)^{-1}T. \quad (4.125)$$

Подставив (4.124) в (4.103), найдем

$$[(1 + R)^{-1}(1 - R)]' + (1 + R)^{-1}(1 - R) \sum_{tot} (1 + R)^{-1}(1 - R) = \sum_a. \quad (4.126)$$

Подобным же образом можно получить дифференциальное уравнение для T и начальные условия для R и T . При решении уравнений для R и T можно избежать накапливания погрешности округления, если двигаться слева направо. Это следует из простых интуитивных соображений. R и T являются соответственно коэффициентом отражения и вектором потока «проходящих» нейтронов. Для каждой из этих переменных погрешность округления в точке x_0 эквивалентна небольшому изменению в свойствах среды между 0 и x_0 . При $x > x_0$ в случае, когда оптическая длина между точками x_0 и x достаточно велика, изменение $R(x)$ и $T(x)$ не может быть сколько-нибудь заметным*. Это утверждение справедливо в отсутствие размножения нейтронов (в данной главе мы всюду пренебрегли размножением), а также в случае размножающих сред, далеких от критического состояния.

Если R и T известны, то поток нетрудно вычислить. Каждая из компонент потока нейтронов, летящих назад, удовлетворяет уравнению метода дискретных ординат

$$\mu_i F_i' + \sum_{tot} F_i = \frac{1}{2} \sum_s \sum_{j=1}^N \omega_j F_j + \frac{1}{2} S \quad (4.127)$$

(μ_i отрицательны). В матричной записи

$$\mu B' + \sum_{tot} B = W(F + B) + \frac{1}{2} S. \quad (4.128)$$

* Оптическая длина определяется как интеграл $\int_{x_0}^x \Sigma(x') dx'$, где $\Sigma(x)$ — полное сечение.

Из дальнейшего будет видно, что элементы матрицы W определяются соотношением

$$W_{ij} \equiv \frac{1}{2} \sum_s \omega_j. \quad (4.129)$$

Подставив выражение для F в уравнение (4.128), получим

$$\mu B' + [\sum_{tot} - W(1 + R)] B = WT + \frac{1}{2} S. \quad (4.130)$$

Как и выше, на основании физических соображений легко показать, что интегрирование уравнения (4.130) справа налево не приводит к возрастанию погрешности округления.

Необходимо отметить, что при вычислении функций M , N и χ погрешности округления имеют несколько иное поведение, нежели при вычислении функций R , T и B . При вычислении M , N и χ допустимо изменение направлений интегрирования одновременно для всех величин, т. е. допустимо решать уравнения (4.104) и (4.103), двигаясь справа налево, а уравнение (4.108) — слева направо. При $x \rightarrow \infty$ Z будет стремиться к \mathcal{K} , а не к $-\mathcal{K}$, однако возрастания погрешности округления не произойдет. С другой стороны, интегрирование уравнений, определяющих R , T и B , необходимо проводить только в тех направлениях, которые были указаны выше.

Последние несколько разделов могут оказаться знакомыми для тех читателей, которые имели дело с методом инвариантного вложения [33]. Характерной чертой этого метода является наличие «матриц отражения» и «векторов передачи». Выведенные нами уравнения для R и T могут быть также получены с помощью инвариантного вложения. Фактически методы Марчука и Шмидта можно рассматривать как разновидности метода инвариантного вложения. То же самое можно сказать о неитерационном методе, развитом недавно Валдингером с сотрудниками [34]. Связь между инвариантным вложением и различными неитерационными численными подходами обсуждается в работе [35].

§ 4.4. СФЕРЫ И ЦИЛИНДРЫ

4.4.1. Перейдем теперь от плоской геометрии к другим геометриям. Никаких новых методов в этом разделе обсуждаться не будет. Многие методы (хотя и не все), развитые выше для пластины, могут быть использованы для тел иной формы. Разумеется, для каждой новой геометрии эти методы должны быть несколько изменены. В следующих параграфах мы исследуем характерные свойства уравнений метода сферических гармоник для сферической и цилиндрической геометрии. При этом мы коротко остановимся на технике вычислений в каждом случае. Представляется оправданным начать обсуждение с наиболее простой криволинейной геометрии — со сферической геометрии.

При наличии сферической симметрии кинетическое уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial r} + \frac{(1-\mu^2)}{r} \cdot \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial \mu} + \sum_{tot}(r) F(r, \mu) = \\ = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2} \right) \sum_{s,l} F_l(r) P_l(\mu) + \frac{1}{2} S(r). \end{aligned} \quad (4.131)$$

Через r обозначена длина радиуса-вектора, $\mu = \Omega \cdot \mathbf{r}$. Остальные обозначения были введены выше. Если подставить разложение

$$F(r, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2} \right) F_l(r) P_l(\mu)$$

в левую часть уравнения (4.131), использовать рекуррентные соотношения

$$(1-\mu^2)\frac{dP_l}{d\mu}=(l+1)(\mu P_l-P_{l+1}) \quad (4.132)$$

и пренебречь членом $F'_{L+1}+\left(\frac{L+2}{r}\right)F_{L+1}$, то получится система уравнений в P_L -приближении:

$$\left. \begin{aligned} F_1' + \frac{2}{r}F_1 + \sum_a F_0 = S \quad \text{для } l=0; \\ \left(\frac{l+1}{2l+1}\right)\left[F'_{l+1} + \left(\frac{l+2}{r}\right)F_{l+1}\right] + \left(\frac{l}{2l+1}\right)\left[F'_{l-1} - \left(\frac{l-1}{r}\right)F_{l-1}\right] + \\ + (\sum_{tot} - \sum_{s,l})F_l = 0 \quad \text{для } 0 < l < L; \\ \left(\frac{L}{2L+1}\right)\left[F'_{L-1} - \left(\frac{L-1}{r}\right)F_{L-1}\right] + (\sum_{tot} - \sum_{s,L})F_L = 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.133)$$

Как было показано в разд. 4.1.2, все моменты потока непрерывны на границах раздела сред*. Можно также показать, что при $r=0$ поток обязан быть изотропным, так что при $l \neq 0$ $F_l(0) = 0$. Условия на границе с вакуумом могут быть получены так же, как и в плоской геометрии. В принципе могут быть использованы как граничные условия Марка, так и Маршака, однако условия Маршака предпочтительнее. Необходимо отметить, что условия Марка нельзя получить, если сфера окружена поглотителем, так как граничные условия должны в этом случае зависеть от сечения поглощения. Такое же утверждение справедливо и для других криволинейных геометрий. Граничные условия отражения от сферы вызывают определенные аномалии, однако они редко используются в сферической геометрии. Те же аномалии имеют место и в цилиндрической геометрии; причем там они обычно более существенны. Поэтому мы отложим обсуждение граничных условий отражения до тех пор, пока не перейдем к цилиндрам (см. разд. 4.4.2).

В сферической геометрии нетрудно получить уравнения метода дискретных ординат, эквивалентные P_L -уравнениям в том же смысле, в каком уравнения метода дискретных ординат для пластины эквивалентны P_L -уравнениям в плоской геометрии. Мы снова должны предположить, что при $l > L$ $\Sigma_{s,l} = 0$. Выберем, как и выше, ординаты μ_i и запишем

$$F(r, \mu) \approx \sum_{i=0}^L \left(\frac{2l+1}{2}\right) P_l(\mu) \sum_{j=1}^{L+1} \omega_j F_j(r) P_l(\mu_j), \quad (4.134)$$

где $F_j(r) = F(r, \mu_j)$. Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{\mu_i} &\approx \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2}\right) \frac{dP_l}{d\mu} \Big|_{\mu_i} \sum_{j=1}^{L+1} \omega_j F_j(r) P_l(\mu_j) \approx \\ &\approx \sum_{j=1}^{L+1} A_{ij} F_j(r). \end{aligned} \quad (4.135)$$

Таким образом для i -й ординаты уравнение (4.131) может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{dF_i}{dr} + \frac{(1-\mu_i^2)}{r} \sum_{j=1}^{L+1} A_{ij} F_j + \sum_{tot} F_j = \\ = \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2}\right) \sum_{s,l} P_l(\mu_i) \sum_{j=1}^{L+1} \omega_j F_j P_l(\mu_j) + \frac{1}{2} S \end{aligned} \quad (4.136)$$

* Мы предполагаем, что значение L нечетно.

или в матричной форме

$$\frac{dF}{dr} + \frac{1}{r} BF + (\Sigma - \Sigma_s)F = \frac{1}{2} S. \quad (4.137)$$

Здесь

$$F \equiv \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{L+1} \end{pmatrix}; \quad \Sigma_{ij} \equiv \Sigma_{tot} \delta_{ij} / \mu_i;$$

$$\Sigma_{s, ij} \equiv \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s, l} P_l(\mu_i) P_l(\mu_j) \omega_j \mu_i;$$

$$B_{ij} \equiv (1 - \mu_i^2) \cdot A_{ij} / \mu_i \equiv (1 - \mu_i^2) \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \right) \frac{dP_l}{d\mu} \Big|_{\mu_i} P_l(\mu_j) / \mu_i^*.$$

Мы не будем давать здесь доказательства эквивалентности уравнений (4.137) и P_L -уравнений; оно проводится в основном так же, как и для пластины.

Учитывая большую пользу, которую приносит применение двойного P_L -приближения в плоской геометрии, можно было бы ожидать, что оно также полезно и в других геометриях. Однако двойное P_L -приближение весьма редко используется в сферическом случае. Это обстоятельство объясняется несколькими причинами, из которых наиболее важной является необычайная трудность получения уравнений, точно описывающих переходный поток при наличии поглощающих зон**. Чтобы продемонстрировать разницу в поведении переходного потока в пластинах и шарах, снова обратимся к чертежу на рис. 4.2

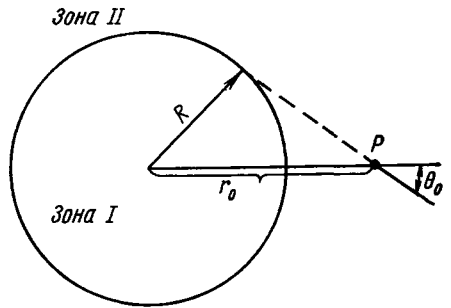


Рис. 4.3. Поглощающий шар в поглощающей среде.

(см. разд. 4.1.3). Мы уже отмечали, что при $\mu = 0$ поток терпит разрыв на границе с поглотителем. В других пространственных точках поток, вообще говоря, непрерывен, однако вблизи $\mu = 0$ он может очень быстро изменяться. Подобное поведение потока при $\mu = 0$ или вблизи $\mu = 0$ как раз и стимулировало развитие двойного P_L -приближения в плоской геометрии. К сожалению, в сферической геометрии угловая зависимость векторного потока значительно сложнее. Представим себе, что поглощающее тело имеет форму шара (на рис. 4.3 зона I). Пусть этот шар помещен в бесконечную среду, содержащую равномерно распределенные источники. Предположим для простоты, что как шар, так и окружающая среда являются чистыми поглотителями и что шар абсолютно черный. Если через R обозначить радиус шара, то при $\mu \leq 0$ $F(\mu, R) = 0$. Ясно, что $F(\mu, R)$ терпит разрыв при $\mu = 0$. Рассмотрим теперь поведение потока в некоторой точке P вне шара (т. е. в зоне II). Если r_0 — пространственная координата точки P , а $\theta_0 = \arcsin(R/r_0)$, то $F(r_0, \mu)$ имеет разрыв при $\mu_0 = \cos \theta_0$. При $\mu = 0$ поток непрерывен. Таким образом, местонахождение точек разрыва потока зависит от r . Учет такой разрывности в двойном P_L -приближении является довольно сложной задачей.

В литературе, касающейся транспортной теории, до сих пор не встречалось работ, связанных с использованием двойного P_L -приближения при наличии пространственно зависимой разрывности.

* Отметим, что согласно результатам гл. 3 $\sum_i B_{ij} = 0$.

** Этот факт был сообщен автору А. Амуялем.

Тем не менее существует важный класс задач, для решения которых двойное P_L -приближение может быть с успехом использовано. Если в системе, окруженной вакуумом, отсутствуют сильно поглощающие зоны, то разрывность по μ имеет место только на границе с вакуумом и только при $\mu = 0$. В этом случае можно ввести разложения, подобные использованным в разд. 4.1.3. Необходимо, однако, отметить, что если поток разорван при $\mu = 0$, то

$$\left(\frac{1-\mu^2}{r} \right) \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} = \frac{1}{r} [F_+(r, 0) - F_-(r, 0)] \delta(\mu).$$

Здесь

$$F_+(r, 0) = \lim_{\mu \rightarrow +0} F(r, \mu), \quad F_-(r, 0) = \lim_{\mu \rightarrow -0} F(r, \mu).$$

Таким образом, если поток непрерывен при $\mu \neq 0$, то кинетическое уравнение в сферических координатах можно записать в следующем виде:

$$\mu \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{(1-\mu^2)}{r} \frac{\partial F}{\partial \mu} \Big|_{\mu \neq 0} + \frac{1}{r} [F_+(0) - F_-(0)] \delta(\mu) + \sum_{tot} F = \frac{\Sigma_s}{2} \Phi + \frac{1}{2} S^*. \quad (4.138)$$

Предположим снова для удобства, что рассеяние изотропно. Необходимо понять, что появление δ -функции связано с предположением о разрывности потока, иными словами, с использованием разрывной аппроксимации для потока. Часто оказывается, что истинный поток непрерывен, а разрывна только его двойная P_L -аппроксимация. В таких случаях введение δ -функции в кинетическое уравнение оказывается искусственным, связанным с методом аппроксимации.

В любом случае δ -функция означает неопределенность производной в двойных P_L -уравнениях. Для вывода этих уравнений мы должны придать определенный смысл интегралам вида

$$\int_0^1 p_l^+(\mu) \delta(\mu) d\mu; \quad \int_{-1}^0 p_l^-(\mu) \delta(\mu) d\mu.$$

В работе [36] Дробаух утверждает, что

$$\begin{aligned} \int_0^1 p_l^+(\mu) \delta(\mu) d\mu &= \frac{1}{2} p_l^+(0), \\ \int_{-1}^0 p_l^-(\mu) \delta(\mu) d\mu &= \frac{1}{2} p_l^-(0). \end{aligned} \quad (4.139)$$

Доводы Дробауха кажутся не вполне убедительными, однако временно мы будем предполагать справедливость равенств (4.139). Согласно этим соотношениям δ -функция симметрична относительно $\mu = 0$, так что в известном смысле

$$\begin{aligned} \delta(\mu) &= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) p_l^+(0) p_l^+(\mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) P_l(-1) p_l^+(\mu) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (l+1) p_l^+(\mu), \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (4.140)$$

Аналогично

$$\delta(\mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) p_l^-(\mu), \quad \mu < 0. \quad (4.141)$$

* Отметим, что двойные P_L -методы, развитые здесь и в гл. 3, несколько отличаются друг от друга. В настоящее время трудно сказать что-либо об относительных достоинствах этих методов.

В двойном P_L -приближении

$$\left. \begin{aligned} \delta(\mu) &\approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^L (-1)^i (l+1) p_i^+(\mu), \quad \mu > 0, \\ \delta(\mu) &\approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^-(\mu), \quad \mu < 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.142)$$

Если

$$\begin{aligned} F(r, \mu) &\approx \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^+(\mu) \sum_{j=1}^{2L+2} \omega_j' F(r, \mu_j) p_i^+(\mu_j) \equiv \\ &\equiv \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^+(\mu) f_i^+, \quad \mu > 0^*, \end{aligned}$$

$$F(r, \mu) \approx \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^-(\mu) f_i^-, \quad \mu < 0,$$

$$\left. \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu_i} \approx \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^{+'}(\mu_i) f_i^+, \quad \mu_i > 0, \quad (4.143)$$

$$\left. \frac{\partial F(r, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu_i} \approx \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^{-'}(\mu_i) f_i^-, \quad \mu_i < 0. \quad (4.144)$$

Кроме того,

$$F_+(0) - F_-(0) \approx \sum_{i=0}^L (l+1) [(-1)^i f_i^+ - f_i^-]. \quad (4.145)$$

С помощью уравнений (4.143)—(4.145) можно сразу же записать двойные P_L -уравнения в форме уравнений метода дискретных ординат:

$$\left. \begin{aligned} \mu_i \frac{dF_i}{dr} + \frac{(1-\mu_i^2)}{r} \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^{+'}(\mu_i) f_i^+ + \frac{1}{2r} \sum_{i=0}^L (l+1) \times \\ \times [(-1)^i f_i^+ - f_i^-] \sum_{m=0}^L (-1)^m (m+1) p_m^+(\mu_i) + \sum_{tot} F_i = \\ = \frac{\Sigma_s}{2} [f_0^+ + f_0^-] + \frac{S}{2}, \quad \mu_i > 0; \\ \mu_i \frac{dF_i}{dr} + \frac{(1-\mu_i^2)}{r} \sum_{i=0}^L (l+1) p_i^{-'}(\mu_i) f_i^- + \frac{1}{2r} \sum_{i=0}^L (l+1) \times \\ \times [(-1)^i f_i^+ - f_i^-] \sum_{m=0}^L (m+1) p_m^-(\mu_i) + \sum_{tot} F_i = \frac{\Sigma_s}{2} [f_0^+ + f_0^-] + \\ + \frac{S}{2}, \quad \mu_i < 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.146)$$

Уравнения (4.146) эквивалентны уравнениям, полученным Дробаухом [36, см. также 37]. Они обладают одним нежелательным (с физической точки зрения) свойством: в чистом поглотителе нейтроны движутся только от центра — по направлению к центру не может двигаться ни один нейтрон**. Однако во втором уравнении системы (4.146) поток нейтронов, движущихся от центра (f_i^+), по-

* В двойном P_L -приближении величины μ_j являются корнями $p_{L+1}^+(\mu) = 0$ и $p_{L+1}^-(\mu) = 0$, а ω_j' — соответствующими весами. Как и в разд. 4.1.4, мы отсылаем читателя, интересующегося подробностями, к работе [19].

** Отметим, что обычно невозможно, чтобы нейтроны двигались только в одну сторону и не двигались в противоположную.

является в члене, возникающем из члена, содержащего δ -функцию. Наличие этого члена эквивалентно существованию источников нейтронов, движущихся по направлению к центру. Таким образом, движение нейтронов от центра сопровождается движением нейтронов к центру, за исключением тех точек (принадлежащих границе с вакуумом), где поток движущихся к центру нейтронов просто равен нулю. Штейн предложил несколько видоизменить двойные P_L -уравнения с тем, чтобы исключить физически нереальный поток нейтронов, движущихся к центру. Согласно Штейну значения интегралов в формулах (4.139) не являются единственно возможными. Он постулировал, что

$$\int_0^1 \delta(\mu) p_l^+(\mu) d\mu = p_l^+(0), \quad \int_{-1}^0 \delta(\mu) p_l^-(\mu) d\mu = 0, \quad (4.147)$$

откуда следует, что

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{dF_i}{dr} + \frac{(1-\mu_i^2)}{r} \sum_{l=0}^L (l+1) p_{l+}^+(\mu_i) f_{l+}^+ + \frac{1}{r} \sum_{l=0}^L (l+1) [(-1)^l f_{l+}^+ - f_{l-}^-] \times \\ \times \sum_{m=0}^L (-1)^m (m+1) p_{m+}^+(\mu_i) + \sum_{tot} F_i = \\ = \frac{\Sigma_s}{2} [f_0^+ + f_0^-] + \frac{S}{2}, \quad \mu_i > 0; \\ \mu_i \frac{dF_i}{dr} + \frac{(1-\mu_i^2)}{r} \sum_{l=0}^L (l+1) p_{l-}^-(\mu_i) f_{l-}^- + \\ + \sum_{tot} F_i = \frac{\Sigma_s}{2} [f_0^+ + f_0^-] + \frac{S}{2}, \quad \mu_i < 0. \end{aligned} \quad (4.148)$$

Свойства модификаций Штейна и Дробауха еще не полностью исследованы. Определенно лишь известно, что в некоторых случаях соотношения Дробауха позволяют получить для шаров более точные значения вероятности вылета, чем соотношения Штейна. Известно также, что значения вероятности вылета, полученные с помощью модификаций Дробауха, оказываются точнее вероятностей, полученных с помощью P_L -приближения. По-видимому, двойное P_L -приближение обладает достоинствами, которые к настоящему времени исследованы недостаточно глубоко*.

Теперь мы коротко опишем методы, которые могут быть использованы для решения P_L - и двойных P_L -уравнений в сферической геометрии. Записав уравнения метода дискретных ординат в конечно-разностном виде, их можно затем решить итерационным способом, следуя в направлении движения нейтронов (см. разд. 4.2.2). Разностные уравнения могут быть получены несколькими путями. Наиболее прямой подход заключается, по-видимому, в использовании центральных разностей. Если записать кинетическое уравнение в середине каждого интервала выбранной сетки, то с помощью обычной разностной аппроксимации можно получить

$$\begin{aligned} \mu \left(\frac{F_{n+1} - F_n}{r_{n+1} - r_n} \right) + \frac{1 - \mu^2}{(r_{n+1} + r_n)} \cdot \frac{d}{d\mu} (F_{n+1} + F_n) + \sum_{tot} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{F_{n+1} + F_n}{2} = \\ = \sum_s \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{4} + \frac{S_{n+1} + S_n}{4}. \end{aligned} \quad (4.149)$$

Разумеется, существуют способы для получения более точных разностных уравнений, однако их обсуждение здесь не представляется целесообразным.

В разд. 4.2.3 мы преобразовали P_L -уравнения в плоском случае в систему зацепляющихся диффузионных уравнений, которые решались FLIP-методом. Эта же процедура применима и в сферической геометрии. К сожалению,

* В связи с этим отметим, что в работах [53, 54] получены результаты, согласно которым метод Штейна, вообще говоря, предпочтительнее метода Дробауха.

в сферическом случае зацепляющиеся уравнения не так просты, как в плоском. Читатель помнит, что уравнения (4.94) зацеплялись только посредством φ , т. е. только посредством различных нечетных моментов. В сферическом случае зацепление происходит также членами, содержащими пространственные производные φ . Такая же ситуация имеет место и для других криволинейных геометрий. Таким образом, FLIP-метод не столь привлекателен для криволинейных геометрий, как для плоской. Тем не менее он используется для решения P_3 -уравнений в цилиндрической и (x, y) -геометриях; об этом мы еще будем говорить позднее.

Метод Марчука также применим для криволинейных геометрий. Чтобы вывести уравнения Марчука в сферическом случае, мы начнем с P_L -уравнений (4.133). Следуя Марчуку, положим

$$\varphi = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{L-1} \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_L \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} S \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

В терминах векторов φ , J и F P_L -уравнение можно записать в следующей форме:

$$\alpha \frac{dJ}{dr} + \frac{\sigma}{r} J + a\varphi = F, \quad (4.150)$$

$$\beta \frac{d\varphi}{dr} + \frac{x}{r} \varphi + bJ = 0 \quad (4.151)$$

Здесь α , σ , a , β , x и b — матрицы. Умножив уравнение (4.150) на α^{-1} , а (4.151) — на b^{-1} , можно написать:

$$\frac{dJ}{dr} + \frac{\omega}{r} J + \Sigma\varphi = f, \quad (4.152)$$

$$J = -D \left(\frac{d\varphi}{dr} + \frac{\delta}{r} \varphi \right), \quad (4.153)$$

где $\omega = \alpha^{-1}\sigma$, $\Sigma = \alpha^{-1}a$, $f = \alpha^{-1}F$. Аналогично, $D = b^{-1}\beta$, $\delta = D^{-1}b^{-1}x$.

Чтобы найти граничные условия в начале координат, заметим, что

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega}{r} J = \omega \frac{dJ}{dr} \Big|_{r=0}, \quad \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\delta}{r} \varphi = \delta \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=0}^*,$$

так что вблизи $r = 0$

$$(I + \omega) \frac{dJ}{dr} + \Sigma\varphi = f, \quad J = -D(I + \delta) \frac{d\varphi}{dr}. \quad (4.154)$$

На внешней границе

$$\varphi = RJ = -RD \left(\frac{d\varphi}{dr} + \frac{\delta}{r} \varphi \right). \quad (4.155)$$

Все существенные свойства границы содержатся в матрице R , форма которой зависит от природы граничных условий.

* Отметим, что φ само по себе не обращается в нуль в начале координат. Однако, поскольку $\delta\varphi|_{r=0} = 0$, $\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\delta}{r} \varphi = \delta \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=0}$.

Следуя далее Марчуку, проинтегрируем уравнение (4.150) от средней точки одного интервала до средней точки следующего. Используя очевидные аппроксимации, придем к уравнению

$$J_{n+\frac{1}{2}} - J_{n-\frac{1}{2}} + \frac{\omega}{4r_n} (h_{n+} + h_{n-}) \left(\frac{J_{n+\frac{1}{2}}}{r_{n+\frac{1}{2}}} + \frac{J_{n-\frac{1}{2}}}{r_{n-\frac{1}{2}}} \right) + \frac{1}{2} (\sum_+ h_{n+} + \sum_- h_{n-}) \varphi_n \approx \frac{1}{2} (f_{n+} h_{n+} + f_{n-} h_{n-}). \quad (4.156)$$

С другой стороны, из уравнения (4.153) имеем

$$J_{n+\frac{1}{2}} \approx -D_{n+} \left[\frac{(\varphi_{n+1} - \varphi_n)}{h_{n+}} + \frac{\delta}{r_{n+\frac{1}{2}}} \frac{(\varphi_{n+1} + \varphi_n)}{2} \right], \quad (4.157)$$

$$J_{n-\frac{1}{2}} \approx -D_{n-} \left[\frac{(\varphi_n - \varphi_{n-1})}{h_{n-}} + \frac{\delta}{r_{n-\frac{1}{2}}} \frac{(\varphi_n + \varphi_{n-1})}{2} \right].$$

Используем теперь уравнения (4.157) для исключения нечетных моментов потока из (4.156). Уравнение (4.156), таким образом, преобразуется в трехточечное разностное уравнение относительно φ :

$$a_n \varphi_{n+1} + b_n \varphi_n + c_n \varphi_{n-1} = s_n, \quad n \neq 0. \quad (4.158)$$

В начале координат приближенно можно написать

$$(I + \omega) \left(J_{\frac{1}{2}} - J_{-\frac{1}{2}} \right) + \sum_0 h_0 \varphi_0 = h_0 f_0.$$

Так как $J_{\frac{1}{2}} = -J_{-\frac{1}{2}}$, то

$$2(I + \omega) J_{\frac{1}{2}} + \sum_0 \beta_0 \varphi_0 = h_0 f_0. \quad (4.159)$$

С другой стороны, из второго уравнения (4.154) имеем

$$J_{\frac{1}{2}} \approx -D_0 (I + \delta) \frac{\varphi_1 - \varphi_0}{h_0}$$

и, следовательно,

$$-2(I + \omega) D_0 [I + \delta] \frac{(\varphi_1 - \varphi_0)}{h_0} + \sum_0 h_0 \varphi_0 = h_0 f_0. \quad (4.160)$$

Чтобы записать внешние граничные условия в разностной форме по Марчуку, помещают внешнюю границу в средней точке последнего интервала сетки и получают уравнение

$$\frac{\varphi_B + \varphi_{B-1}}{2} = -RD_{B-\frac{1}{2}} \left[\frac{(\varphi_B - \varphi_{B-1})}{h_{B-}} + \frac{\delta}{r_{B-\frac{1}{2}}} \frac{(\varphi_B + \varphi_{B-1})}{2} \right]. \quad (4.161)$$

Уравнения (4.158), (4.160) и (4.161), определяющие совместно φ_n , могут быть решены методом матричной факторизации.

В сферической геометрии нетрудно сформулировать также метод Шмидта. Разложим поток в ряд Тейлора вблизи $r = r_n$, снова введем функции ψ и χ и получим для них соотношения:

$$\psi(r) = P_{1n}(r) \psi_n + P_{2n}(r) \chi_n + P_{3n}(r) S,$$

$$\chi(r) = Q_{1n}(r) \psi_n + Q_{2n}(r) \chi_n + Q_{3n}(r) S,$$

справедливые для всех точек r_n , исключая $r_n = 0$. К сожалению, сферические P_L -уравнения полностью не определяются коэффициентами ряда Тейлора потока

вблизи $r = 0$. Чтобы лучше понять это, сравним поведение потока при малых r в P_3 -приближении для пластин и шаров.

В плоской геометрии мы имеем

$$\left. \begin{aligned} F_1' + \sum_a \sum_0 &= S, \\ \frac{2}{3} F_2' + \frac{1}{3} F_0' + \sum_1 F_1 &= 0, \\ \frac{3}{5} F_3' + \frac{2}{5} F_1' + \sum_2 F_2 &= 0, \\ \frac{3}{7} F_2' + \sum_3 F_3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.162)$$

Положим $F_0 \approx f_{00} + f_{02}r^2$, $F_2 \approx f_{20} + f_{22}r^2$, $F_1 \approx f_{11}r$, $F_3 \approx f_{31}r$. Тогда

$$\left. \begin{aligned} f_{11} + \sum_a f_{00} &\approx S, \\ \frac{4}{3} f_{22} + \frac{2}{3} f_{02} + \sum_1 f_{11} &\approx 0, \\ \frac{3}{5} f_{31} + \frac{2}{5} f_{11} + \sum_2 f_{20} &\approx 0, \\ \frac{6}{7} f_{22} + \sum_3 f_{31} &\approx 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.163)$$

Предположим, что в начале координат поток известен. Тогда f_{00} и f_{20} известны и с помощью уравнений (4.163) можно определить все остальные f .

В случае шаров

$$\left. \begin{aligned} F_1' + \frac{2}{r} F_1 + \sum_a F_0 &= S, \\ \frac{2}{3} \left(F_2' + \frac{3}{r} F_2 \right) + \frac{1}{3} F_0' + \sum_1 F_1 &= 0, \\ \frac{3}{5} \left(F_3' + \frac{4}{r} F_3 \right) + \frac{2}{5} \left(F_1' - \frac{1}{r} F_1 \right) + \sum_2 F_2 &= 0, \\ \frac{3}{7} \left(F_2' - \frac{2}{r} F_2 \right) + \sum_3 F_3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.164)$$

Можно показать, что $F_0 \approx f_{00} + f_{02}r^2$, $F_1 \approx f_{11}r + f_{13}r^3$, $F_2 \approx f_{22}r^2 + f_{24}r^4$, $F_3 \approx f_{33}r^3$. Таким образом,

$$\left. \begin{aligned} 3f_{11} + \sum_a f_{00} &\approx S, \\ \frac{10}{3} f_{22} + \frac{2}{3} f_{02} + \sum_1 f_{11} &\approx 0, \\ \frac{21}{5} f_{33} + \frac{4}{5} f_{13} + \sum_2 f_{22} &\approx 0, \\ \frac{6}{7} f_{24} + \sum_3 f_{33} &\approx 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.165)$$

Если в начале координат поток известен, то коэффициент f_{00} известен, однако с помощью системы (4.165) невозможно определить остальные коэффициенты f . Это обстоятельство вытекает из природы самого кинетического уравнения; при известном скалярном потоке при $r = 0$ кинетическое уравнение не определяет потока вблизи нуля*.

* Вопрос об определении потока вблизи центра сферической симметрии рассмотрен в работе [55].

С другой стороны, можно разложить поток вблизи любой точки, не совпадающей с началом координат. Следовательно, можно определить коэффициенты A_{in} и B_{in} и для вычисления в направлении уменьшения радиуса, т. е. такие, что

$$\left. \begin{aligned} \psi_{n-1} &= A_{1n} \psi_n + A_{2n} \chi_n + A_{3n} S, \\ \chi_{n-1} &= B_{1n} \psi_n + B_{2n} \chi_n + B_{3n} S. \end{aligned} \right\} \quad (4.166)$$

С помощью уравнений (4.166) можно, как и выше, вывести рекуррентные соотношения для M_n , N_n и ψ_n . Учитывая при этом природу уравнений (4.166), расчет величин M_n и N_n следует производить, двигаясь от периферии к центру.

4.4.2. Закончив рассмотрение пластин и шаров, мы перейдем теперь к существенно более сложным геометриям. В случае пластин и шаров поток зависит только от двух переменных, а именно от x (или r) и μ . Иными словами, поток зависит только от одной компоненты вектора Ω . Но Ω имеет две независимые компоненты и во всех других геометриях поток зависит от обеих компонент. Это обстоятельство надо учитывать при рассмотрении цилиндрического случая.

Для вывода цилиндрических P_L -уравнений введем обычную систему координат. Направим ось z параллельно оси цилиндра. Если \mathbf{k} — единичный вектор, параллельный оси z , то по определению

$$\mu \equiv \cos \theta = \Omega \mathbf{k}.$$

Обозначим через $\bar{\Omega}_p$ проекцию Ω на плоскость xy , а через ρ единичный вектор в радиальном направлении. Вектор $(\bar{\Omega}_p / \sin \theta)$ является единичным. Введем обозначение

$$\varphi \equiv \arccos(\bar{\Omega}_p / \sin \theta).$$

Так как рассматривается одномерная цилиндрическая геометрия, то поток в точке P зависит только от Ω и от ρ — расстояния между P и осью цилиндра.

Кинетическое уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \sin \left[\cos \varphi \frac{\partial F}{\partial \rho} - \frac{\sin \varphi}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right] + \Sigma F = \\ & = \int \Sigma_s(\Omega \Omega', \rho) F(\rho, \theta', \varphi') d\Omega' + \frac{1}{4\pi} S(\rho). \end{aligned} \quad (4.167)$$

Подобно тому, как это было сделано в § 4.1, разложим сечение рассеяния по полиномам Лежандра:

$$\Sigma_s(\Omega \Omega', \rho) \equiv \frac{\Sigma_s(\mu_0, \rho)}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s,l}(\rho) P_l(\mu_0).$$

С помощью теоремы сложения получим

$$\begin{aligned} \Sigma_s(\mu_0, \rho) &= \sum_{l'=0}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s,l'}(\rho) [P_{l'}(\mu) P_{l'}(\mu') + \\ &+ 2 \sum_{m=1}^{l'} \frac{(l'-m)!}{(l'+m)!} P_{l'}^m(\mu) P_{l'}^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi')]. \end{aligned} \quad (4.168)$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} & \int P_{l'}^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi') F(\rho, \theta', \varphi') d\Omega' = \\ &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} P_{l'}^m(\mu') [\cos m\varphi \cos m\varphi' + \sin m\varphi \sin m\varphi'] F(\rho, \theta', \varphi') d\theta' \sin \theta' d\varphi', \end{aligned}$$

а также то, что из симметрии задачи вытекает $F(\rho, \theta, \varphi) = F(\rho, \theta, -\varphi)$ и, следовательно,

$$\int_0^{2\pi} F(\rho, \theta', \varphi') \sin m\varphi' d\varphi' = 0,$$

уравнение (4.167) перепишем в виде

$$\sqrt{1-\mu^2} \left[\cos \varphi \frac{\partial F}{\partial \rho} - \frac{\sin \varphi}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right] + \sum F = \frac{1}{4\pi} S + \frac{1}{2\pi} \sum_{l'=0}^{\infty} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \times \\ \times \sum_{s, l'} \left[F_{l'}(\rho) P_{l'}(\mu) + 2 \sum_{m=1}^{l'} \frac{(l'-m)!}{(l'+m)!} F_{l'}^m(\rho) P_{l'}^m(\mu) \cos m\varphi \right]. \quad (4.169)$$

Здесь введено обозначение

$$F_l^m(\rho) \equiv \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} F(\rho, \mu', \varphi') P_l^m(\mu') \cos m\varphi' d\mu' d\varphi'.$$

Воспользовавшись далее соотношениями

$$\int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 P_l^m(\mu) P_{l'}^{m'}(\mu) \cos m\varphi \cos m'\varphi d\mu d\varphi = \begin{cases} \pi \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, & m \neq 0; \\ 2\pi \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, & m = 0, \end{cases}$$

получим после умножения (4.169) на $P_l^m(\mu)$ (для всех $l \leq L$) и интегрирования результата по φ и μ

$$Q_l^m + (\sum - \sum_{s, l}) F_l^m = S \delta_{l0}, \quad 0 \leq l \leq L. \quad (4.170)$$

Здесь

$$Q_l^m = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-\mu^2} \left[\cos \varphi \cos m\varphi \frac{\partial F}{\partial r} - \frac{\sin \varphi \cos m\varphi}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right] P_l^m(\mu) d\mu d\varphi.$$

Выполняя интегрирование по частям, получаем

$$Q_l^m = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-\mu^2} \left[\cos \varphi \cos m\varphi \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{F}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\sin \varphi \cos m\varphi) \right] P_l^m(\mu) d\mu d\varphi$$

или

$$Q_l^m = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-\mu^2} \left[\cos \varphi \cos m\varphi \left(\frac{\partial F}{\partial r} + \frac{F}{r} \right) - \right. \\ \left. - m \frac{F}{r} \sin \varphi \sin m\varphi \right] P_l^m(\mu) d\mu d\varphi.$$

Для дальнейшего удобно переписать это выражение следующим образом:

$$Q_l^m = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-\mu^2} P_l^m(\mu) \left\{ [\cos(m+1)\varphi + \cos(m-1)\varphi] \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{\partial F}{\partial r} + \frac{F}{r} \right] + m \frac{F}{r} [\cos(m+1)\varphi - \cos(m-1)\varphi] \right\} d\mu d\varphi$$

или

$$Q_l^m = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-\mu^2} P_l^m(\mu) \left\{ \left[\frac{\partial F}{\partial r} + (m+1) \frac{F}{r} \right] \cos(m+1)\varphi + \right. \\ \left. + \left[\frac{\partial F}{\partial r} - (m-1) \frac{F}{r} \right] \cos(m-1)\varphi \right\} d\mu d\varphi. \quad (4.171)$$

Для вычисления интегралов в уравнении (4.171) используем рекуррентные соотношения*

$$(l+m-1)(l+m) P_{l-1}^{m-1}(\mu) - (l-m+1)(l-m+2) P_{l+1}^{m-1}(\mu) = \\ = (2l+1) \sqrt{1-\mu^2} P_l^m(\mu), \quad m \neq 0; \quad (4.172)$$

$$P_{l+1}^{m+1}(\mu) - P_{l-1}^{m+1}(\mu) = (2l+1) \sqrt{1-\mu^2} P_l^m(\mu). \quad (4.173)$$

* См. [4], стр. 61 и 62.

Важно понять, что в уравнениях (4.172) и (4.173) и во всех последующих уравнениях функции $P_l^m(\mu)$ с отрицательным верхним или нижним индексом автоматически исчезают. С помощью уравнений (4.172) и (4.173) легко получить

$$Q_l^m = J_l^{m+1} + J_l^{m-1};$$

$$J_l^{m+1} \equiv \frac{1}{2}(1 + \delta_{m0}) \times$$

$$\times \left\{ \left[\frac{dF_{l+1}^{m+1}}{dr} + (m+1) \frac{F_{l+1}^{m+1}}{r} \right] - \left[\frac{dF_{l-1}^{m+1}}{dr} + (m+1) \frac{F_{l-1}^{m+1}}{r} \right] \right\} / (2l+1);$$

$$J_l^{m-1} \equiv \frac{1}{2}(1 - \delta_{m0}) \left\{ (l+m-1)(l+m) \left[\frac{dF_{l-1}^{m-1}}{dr} - (m-1) \frac{F_{l-1}^{m-1}}{r} \right] - \right.$$

$$\left. - (l-m+1)(l-m+2) \left[\frac{dF_{l+1}^{m-1}}{dr} - (m-1) \frac{F_{l+1}^{m-1}}{r} \right] \right\} / (2l+1).$$

В терминах только что определенных величин можно записать

$$J_L^{m+1} + J_l^{m-1} + (\Sigma - \Sigma_s, l) F_l^m = S\delta_{l0}, \quad 0 \leq l \leq L. \quad (4.174)$$

Пренебрегая F_{L+1}^m для всех m , получим цилиндрические P_L -уравнения в окончательном виде:

$$\left. \begin{aligned} J_l^{m+1} + J_l^{m-1} + (\Sigma - \Sigma_s, l) F_l^m &= S\delta_{l0}, \quad 0 \leq l < L; \\ \frac{(1 - \delta_{m0})(L+m-1)(L+m)}{2(2L+1)} \left[\frac{dF_{L-1}^{m-1}}{dr} - (m-1) \frac{F_{L-1}^{m-1}}{r} \right] - \\ - \frac{(1 + \delta_{m0})}{2(2L+1)} \left[\frac{dF_{L-1}^{m+1}}{dr} + (m+1) \frac{F_{L-1}^{m+1}}{r} \right] + (\Sigma - \Sigma_s, L) F_L^m &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.175)$$

Исследование уравнений (4.175) показывает, что некоторые из них тривиальны. Так, из соотношений $F(\rho, \mu, \varphi) = F(\rho, -\mu, \varphi)$ и

$$P_l^m(\mu) \equiv (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu) = (-1)^{l-m} P_l^m(-\mu)$$

следует, что при нечетных $l-m$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(\mu) F(\rho, \mu, \varphi) d\mu = 0.$$

Поэтому при нечетных $l-m$ уравнения (4.175) обращаются в тождества. Как и в других разделах, мы будем рассматривать только нечетные L и потребуем на границах непрерывности моментов потока. Граничные условия на оси цилиндра следуют непосредственно из соображений симметрии. Так как на оси цилиндра поток не должен зависеть от φ , то $F_l^m(0) = 0$ для всех $m \neq 0$. К сожалению, часто бывает не так просто сформулировать подходящие условия на внешней границе. Разумеется, как и в других случаях, невозможно получить точные условия на границе с вакуумом. Кроме того, условия на границе ячейки в цилиндрическом и сферическом случаях носят более искусственный характер.

Обычно топливные элементы реактора имеют форму стерженьков и образуют правильную решетку. Таким образом, ячейка оказывается двумерной и решение транспортного уравнения в такой геометрии является довольно сложной задачей*. Чтобы избежать двумерных расчетов, ячейка представляет-

* Возможно, что при наличии современных ЭВМ удобнее пользоваться методом Монте-Карло, хотя в двумерном случае этот метод требует еще большей затраты машинного времени, чем в одномерном.

ся обычно в форме цилиндра, при этом истинную границу ячейки заменяют цилиндрической поверхностью при сохранении объема замедлителя. Так как цилиндрами нельзя заполнить все пространство, то в природе не может быть цилиндрических ячеек. В связи с этим граничные условия на цилиндрической поверхности несколько произвольны и их формулировка вызывает значительные трудности.

Первоначально на цилиндрических (и сферических) поверхностях использовались условия отражения, т. е. предполагалось, что нейтрон, достигший границы ячейки, испытывает зеркальное отражение. При использовании таких условий $F(\rho_B, \mu, \varphi) = F(\rho_B, \mu, \pi - \varphi)$, где ρ_B — радиус границы. Отсюда следует, что при нечетных m справедливо условие $F_m^I(\rho_B) = 0$.

Граничные условия отражения выглядят вполне естественно, так как те же

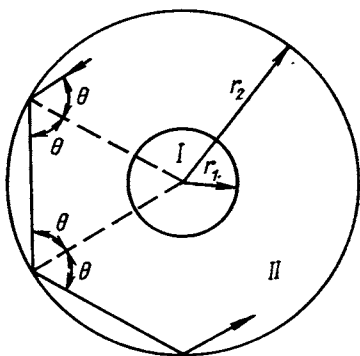


Рис. 4.4. Траектория частицы в цилиндрической ячейке при граничных условиях отражения.

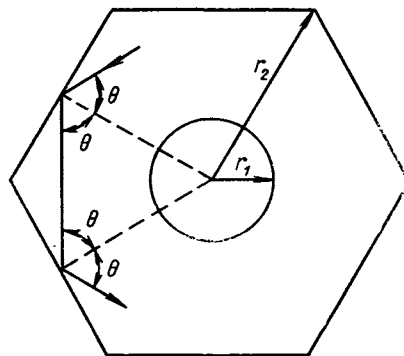


Рис. 4.5. Циклическая траектория частицы в гексагональной ячейке (угол θ должен быть равен $\pi/3$).

условия должны быть использованы на границе квадратной или гексагональной ячейки. Однако в таких ячейках условия отражения приводят к нулевому значению нормальной производной скалярного потока на границе ячейки, в то время как в цилиндрическом случае значение производной на границе положительно*, что приводит к неоправданно большой величине среднего потока в замедлителе. Ньюмарчем было показано [38], что с уменьшением размеров цилиндрической ячейки скалярный поток не становится более плоским. Эта аномалия была объяснена им следующим образом.

Предположим, что зона II на рис. 4.4 заполнена замедлителем с небольшим сечением поглощения, в то время как в зоне I (топливный стержень) сечение захвата относительно велико. Мы изобразили на рис. 4.4 типичную траекторию нейтрона. Если $\theta > \arcsin(r_1/r_2)$, то он будет сталкиваться с границей ячейки до тех пор, пока не испытает рассеяния или не поглотится. Его траектория не может пересечь области, занимаемой топливом, если он не испытает рассеивающего столкновения. Нейтроны, движущиеся по таким траекториям, имеют мало шансов поглотиться в топливе. В гексагональной ячейке подобное явление может осуществиться только в том случае, если одновременно выполняются следующие три условия: 1) $\theta = \pi/3$ (рис. 4.5); 2) $r_1/r_2 < \sqrt{3}/2$; 3) нейтрон достигает границы ячейки на средней линии грани призмы. Поэтому следует ожидать, что средний поток в замедлителе цилиндрической ячейки будет слишком высок.

Возрастание потока на границе ячейки можно устранить различными способами. В случае P_3 -приближения, например, могут быть использованы

* Здесь имеются в виду типичные расчеты для тепловых нейтронов.

следующие граничные условия*:

$$\left. \frac{dF_0^0}{d\rho} \right|_{\rho_B} = 0, \quad F_1^1(\rho_B) = 0, \quad F_3^1(\rho_B) = 0.$$

Так как F_1^1 является током, то второе условие означает отсутствие утечки из ячейки. Хонекком был предложен иной подход [40]**. Он окружил замедлитель слоем чистого рассеивателя толщиной в одну-две длины свободного пробега. На внешней границе этого слоя были использованы условия отражения. Наличие дополнительного слоя эквивалентно диффузионному отражению нейтронов от внешней границы замедлителя, что приводит к прерыванию циркулирования нейтронов в зоне I. Как условие нулевого градиента, так и введение дополнительного рассеивающего слоя дают обычно прекрасные результаты даже для ячеек небольших размеров. Тем не менее иногда — особенно в тех случаях, когда ячейки содержат тонкие слои замедлителя, — представляется полезным сравнить результаты односкоростных расчетов с результатами, полученными методом Монте-Карло.

На границе с вакуумом могут быть использованы условия Маршака. В P_L -приближении можно написать

$$F(\rho, \mu, \varphi) \approx \sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right) \left[F_l(\rho) P_l(\mu) + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} F_l^m(\rho) P_l^m(\mu) \cos m\varphi \right] \equiv F_L(\rho, \mu, \varphi).$$

Для вывода условий Маршака мы умножим поток попеременно на все функции $P_l^m(\mu) \cos(m\varphi)$ при нечетных m . Проинтегрировав затем результат по всем направлениям движения нейтронов из вакуума в систему и приравняв интегралы нулю, получим

$$\int_{-1}^1 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} F_L(\rho_B, \mu, \varphi) P_l^m(\mu) \cos(m\varphi) d\varphi d\mu = 0, \quad (4.176)$$

где m — нечетные числа. Для P_3 -приближения вычисление интегралов приводит к следующим трем условиям:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{1}{4} F_0 + \frac{1}{2} F_1^1 + \frac{5}{32} F_2^0 - \frac{5}{64} F_2^2 &= 0, \\ -\frac{3}{32} F_0 - \frac{105}{128} F_2^0 + \frac{5}{256} F_2^2 + \frac{1}{2} F_3^1 &= 0, \\ \frac{15}{16} F_0 - \frac{75}{64} F_2^0 - \frac{225}{128} F_2^2 + \frac{1}{1} F_3^3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.177)$$

Сконструировав для цилиндрического случая условия Маршака, естественно задать вопрос: существуют ли также граничные условия, аналогичные условиям Марка? Ответить на этот вопрос не так просто. Следует отметить, что в других геометриях условия Марка тесно связаны с той формой P_L -уравнений, которая соответствует методу дискретных ординат. В предыдущих разделах мы имели дело с такими уравнениями метода дискретных ординат, которые можно легко было интерпретировать, так как они имели совершенно очевидный физический смысл. Неизвестными функциями были потоки в определенных направлениях. Производные по углам вычислялись путем дифференцирования интерполяционных полиномов. Можно сказать определенно, что какой-то специальной формы, соответствующей методу дискретных ординат, не существует,

* Такие граничные условия реализованы в программе CEPTR [24].

** Относительно «белой границы» см. гл. 3.

однако близкий по смыслу подход был развит Валдингером, Агреста и Герцельем [34]. Эти авторы используют координатную систему, отличную от нашей. Они отсчитывают угол θ от ρ , а не от оси z . Через φ обозначен азимутальный угол в плоскости, перпендикулярной ρ . Если Ω , ρ и ось z лежат в одной плоскости, то $\varphi = 0$. Преобразовав уравнение Больцмана к этой координатной системе, получим

$$\cos \theta \left[\frac{\partial F(\rho, \theta, \varphi)}{\partial \rho} - \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{\rho} \frac{\partial F(\rho, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right] - \frac{\sin \theta \sin^2 \varphi}{\rho} \frac{\partial F(\rho, \theta, \varphi)}{\partial \theta} + \Sigma_{tot} F(\rho, \theta, \varphi) = \int \Sigma_s(\Omega\Omega', \rho) F(\rho, \theta', \varphi') d\Omega' + \frac{1}{4\pi} S(\rho). \quad (4.178)$$

Подобно большинству авторов, Валдингер, Агреста и Герцель использовали при выводе P_L -уравнений нормированные сферические гармоники. Четные нормированные гармоники определяются следующим образом*:

$$Y_{lm}^{(e)}(\mu, \varphi) = \left[(1 + \delta_{m0}) \pi \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \right]^{-1/2} P_l^m(\mu) \cos m\varphi. \quad (4.179)$$

Уравнения (4.178) умножаются на $Y_{lm}^{(e)}(\mu, \varphi)$ и интегрируются. В матричной форме окончательное уравнение имеет вид

$$\omega \frac{dF}{d\rho} + \frac{M}{\rho} F + M' F = S. \quad (4.180)$$

Мы не станем более подробно записывать это уравнение, так как хотим лишь изложить основные предположения и выводы работы [34]. Там показано, что матрица ω симметрична и, следовательно, она может быть диагонализирована. Введем диагональную матрицу

$$D = T^{-1} \omega T.$$

Можно доказать, что каждому положительному собственному значению соответствует равное по абсолютной величине отрицательное собственное значение. Если выбрать T соответствующим образом, то можно написать

$$D = \begin{pmatrix} \Omega & 0 \\ 0 & -\Omega \end{pmatrix}.$$

Ниже мы будем для определенности говорить о P_3 -приближении: обобщение на произвольное значение нечетного L может быть сделано немедленно. В P_3 -приближении

$$\Omega = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_3 \end{pmatrix},$$

где μ_1 и μ_2 — положительные корни $P_4(\mu) = 0$. Положим далее $T^{-1} M T = m$, $T^{-1} M' T = m'$, $T^{-1} F = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ и $T^{-1} S = s$. Тогда

$$D \begin{pmatrix} \frac{du}{d\rho} \\ \frac{dv}{d\rho} \end{pmatrix} + \frac{m}{\rho} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + m' \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \equiv D \begin{pmatrix} \frac{du}{d\rho} \\ \frac{dv}{d\rho} \end{pmatrix} + V(\rho) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = s. \quad (4.181)$$

* При таком подходе P_L -уравнения содержат иррациональные коэффициенты. В связи с этим мы используем ненормированные сферические гармоники.

Мы увидим, что уравнение (4.181) имеет характерные черты, свойственные уравнениям метода дискретных ординат, а u и v аналогичны компонентам потока нейтронов, летящих соответственно вперед и назад. Заметим, во-первых, что

$$D \begin{pmatrix} \frac{du}{d\rho} \\ \frac{dv}{d\rho} \end{pmatrix} \equiv D \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 & u_1' \\ \mu_2 & u_2' \\ \mu_3 & u_3' \\ -\mu_1 & v_1' \\ -\mu_2 & v_2' \\ -\mu_3 & v_3' \end{pmatrix}.$$

Таким образом, шесть компонент вектора $D \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}$ могут быть интерпретированы как шесть значений функции $\cos \theta \frac{dF(\rho, \theta, \varphi)}{d\rho}$, выбранных при трех значениях θ , соответствующих движению нейтронов вперед, и трех значениях, соответствующих движению назад. Во-вторых, можно показать, что $u(0) = v(0)$ и $u'(0) = -v'(0)$. Более того, при граничных условиях отражения $u(\rho_B) = v(\rho_B)$. Заслуживают внимания также свойства u и v при больших ρ . При $\rho \rightarrow \infty$ $u \rightarrow 0$ и $v \rightarrow 0$, в то время как u_1, u_2, v_1 и v_2 подчиняются P_3 -уравнениям для плоского случая:

$$\begin{aligned} \mu_1 u_1' + \Sigma_{tot} u_1 &= \sum_{l=0}^3 \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s, l} P_l(\mu_1) f_l + \frac{1}{2} S; \\ \mu_2 u_2' + \Sigma_{tot} u_2 &= \sum_{l=0}^3 \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s, l} P_l(\mu_2) f_l + \frac{1}{2} S; \\ -\mu_1 v_1' + \Sigma_{tot} v_1 &= \sum_{l=0}^3 \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s, l} P_l(-\mu_1) f_l + \frac{1}{2} S; \\ -\mu_2 v_2' + \Sigma_{tot} v_2 &= \sum_{l=0}^3 \left(\frac{2l+1}{2} \right) \Sigma_{s, l} P_l(-\mu_2) f_l + \frac{1}{2} S. \end{aligned}$$

Здесь

$$f_l = u_1 \omega_1 P_l(\mu_1) + u_2 \omega_2 P_l(\mu_2) + v_1 \omega_3 P_l(-\mu_1) + v_2 \omega_4 P_l(-\mu_2),$$

а ω_i — весовые коэффициенты квадратурной формулы Гаусса. Таким образом, на оси цилиндра, на зеркальных границах и при больших значениях ρ функции u и v обладают свойствами потоков нейтронов, движущихся в прямом и обратном направлениях. Вполне оправданным кажется предположение, что условие $v(\rho_B) = 0$ является удовлетворительным обобщением граничных условий Марка. Нетрудно понять, что система (4.181) может быть решена итерационным путем, причем расчет надо проводить в направлении движения нейтронов, т. е. от оси цилиндра при вычислении u_i и к оси цилиндра при вычислении v_i . Правда, Валдингером и его сотрудниками был выбран иной метод решения. Этот метод будет описан ниже.

Уравнения (4.181) решались неитерационным путем с помощью программы PALINDROME [34]. Алгоритм, использованный в PALINDROME, аналогичен обсуждаемому в разд. 4.3.3. Постулируется, что

$$u = Rv + \Theta, \quad (4.182)$$

$$v = Qu + \Phi, \quad (4.183)$$

где R и Q — матрицы, а Θ и Φ — векторы. После подстановки уравнений (4.182) и (4.183) в (4.181) результирующее уравнение может быть тождественно удовлетворено в том случае, если

$$\frac{dR}{d\rho} = (I, -R) V(\rho) \begin{pmatrix} R \\ I \end{pmatrix}. \quad (4.184)$$

Обозначения, фигурирующие в (4.184), имеют следующий смысл:

$$V(\rho) \begin{pmatrix} R \\ I \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} R + V_{12} \\ V_{21} R + V_{22} \end{pmatrix};$$

$$(I, -R) V(\rho) \begin{pmatrix} R \\ I \end{pmatrix} \equiv V_{11} R + V_{12} - R(V_{21} R + V_{22}).$$

Используя краткие обозначения уравнения (4.183), можно показать, что

$$\frac{d\Theta}{d\rho} = (I, -R) \left[V(\rho) \begin{pmatrix} \Theta \\ 0 \end{pmatrix} + S \right], \quad (4.185)$$

$$\frac{dQ}{d\rho} = (-Q, I) V(\rho) \begin{pmatrix} I \\ Q \end{pmatrix}, \quad (4.186)$$

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = (-Q, I) \left[V(\rho) \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi \end{pmatrix} + S \right]. \quad (4.187)$$

Уравнения (4.186) и (4.187) можно решить, двигаясь от внешней границы. В программе PALINDROME это осуществляется с помощью разностных уравнений Адамса—Башфорта с использованием в начале расчета формул Рунге—Кутты. Начальные значения Q и Φ определяются уравнением (4.183) и внешним граничным условием. Решение уравнений (4.184) и (4.185) проводится в направлении к внешней границе. Начальные значения R и Θ определяются с помощью уравнения (4.182) совместно с граничным условием на оси*. Вычислив R , Θ , Q и Φ , можно решить уравнения (4.182) и (4.183) для u , именно

$$u = (1 - RQ)^{-1} (R\Phi + \Theta), \quad (4.188)$$

а затем использовать уравнение (4.183) для вычисления v .

4.4.3. Методы Шмидта и Марчука могут быть также использованы для решения задач с цилиндрической симметрией. Представляется нецелесообразным повторять заново вывод основных уравнений. Остановимся лишь на некоторых интересных и весьма существенных различиях между этими методами и методом PALINDROME. Чтобы понять эти различия, необходимо рассмотреть несколько подробнее все три метода.

Метод Марчука приводит к разностным уравнениям следующего вида:

$$a_n \varphi_{n+1} + b_n \varphi_n + c_n \varphi_{n-1} = s_n. \quad (4.189)$$

Введем подстановку

$$\varphi_n = \alpha_{n+1}^{-1} [\varphi_{n+1} + \beta_n]. \quad (4.190)$$

Ясно, что

$$\varphi_{n+1} = \alpha_{n+1} \varphi_n - \beta_n, \quad (4.191)$$

$$\varphi_{n-1} = \alpha_n^{-1} [\varphi_n + \beta_{n-1}]. \quad (4.192)$$

Подставив уравнения (4.191) и (4.192) в (4.189), получим

$$a_n [\alpha_{n+1} \varphi_n - \beta_n] + \beta_n \varphi_n + c_n \alpha_n^{-1} [\varphi_n + \beta_{n-1}] = s_n$$

* Это условие обсуждается в работе [34]. В данном случае точный вид граничного условия несуществен.

или (после перегруппировки членов)

$$(a_n \alpha_{n+1} + b_n + c_n \alpha_n^{-1}) \varphi_n - a_n \beta_n + c_n \alpha_n^{-1} \beta_{n-1} = s_n. \quad (4.193)$$

Чтобы уравнение (4.193) удовлетворялось тождественно, необходимо положить

$$\alpha_{n+1} = -a_n^{-1} [b_n + c_n \alpha_n^{-1}]; \quad -\beta_n = \alpha_n^{-1} [s_n - c_n \alpha_n^{-1} \beta_{n-1}].$$

Таким образом, используя метод Марчука, мы вычисляем в каждой точке сетки два вектора β_n и φ_n и одну матрицу α_n . При этом для расчета α_n необходимо в каждой точке получить матрицы, обратные a_n и α_n .

Метод Шмидта приводит к разностным уравнениям

$$\psi_{n-1} = A_{1n} \psi_n + A_{2n} \chi_n + A_{3n} S_n, \quad (4.194)$$

$$\chi_{n-1} = B_{1n} \psi_n + B_{2n} \chi_n + B_{3n} S_n. \quad (4.195)$$

Используя подстановку

$$\psi_n = M_n \chi_n + N_n, \quad (4.196)$$

можно написать

$$\begin{aligned} \psi_{n-1} &= A_{1n} [M_n \chi_n + N_n] + A_{2n} \chi_n + A_{3n} S_n = \\ &= [A_{1n} M_n + A_{2n}] \chi_n + A_{1n} N_n + A_{3n} S_n, \end{aligned} \quad (4.197)$$

$$\chi_{n-1} = [B_{1n} M_n + B_{2n}] \chi_n + B_{1n} N_n + B_{3n} S_n. \quad (4.198)$$

Подставив (4.196) в уравнение (4.197), получим

$$M_{n-1} \chi_{n-1} + N_{n-1} = [A_{1n} M_n + A_{2n}] \chi_n + A_{1n} N_n + A_{3n} S_n$$

или [с учетом уравнения (4.198)]

$$\begin{aligned} M_{n-1} \{ [B_{1n} M_n + B_{2n}] \chi_n + B_{1n} N_n + B_{3n} S_n \} + N_{n-1} = \\ = [A_{1n} M_n + A_{2n}] \chi_n + A_{1n} N_n + A_{3n} S_n. \end{aligned} \quad (4.199)$$

Чтобы уравнение (4.199) удовлетворялось тождественно, необходимо иметь

$$M_{n-1} [B_{1n} M_n + B_{2n}] = A_{1n} M_n + A_{2n} \quad (4.200)$$

или

$$M_{n-1} = [B_{1n} M_n + B_{2n}]^{-1} [A_{1n} M_n + A_{2n}]$$

и

$$M_{n-1} [B_{1n} N_n + B_{3n} S_n] + N_{n-1} = A_{1n} N_n + A_{3n} S_n$$

или

$$N_{n-1} = [A_{1n} - M_{n-1} B_{1n}] N_n + [A_{3n} - M_{n-1} B_{3n}] S_n. \quad (4.201)$$

Уравнения (4.200) и (4.201) определяют M и N . Они решаются рекуррентно в направлении от внешней границы к оси цилиндра. Для вычисления потока используем уравнение (4.198), которое перепишем следующим образом:

$$-\chi_n = [B_{1n} M_n + B_{2n}]^{-1} [B_{1n} N_n + B_{3n} S_n - \chi_{n-1}].$$

Мы видим, что, применяя метод Шмидта, мы снова рассчитываем одну матрицу (M_n) и два вектора (N_n и χ_n) в каждой точке сетки. При этом в каждой точке следует рассчитать одну обратную матрицу.

Как Шмидт, так и Марчук вводят по одной вспомогательной матрице и по одному вспомогательному вектору, в то время как в программе PALINDROME используются две вспомогательные матрицы (R и Q) и два вектора (Θ и Φ). Как Шмидт, так и Марчук пользуются при расчете вспомогательных переменных обращением матриц. Никаких дополнительных операций обращения при вычислении потока производить не требуется. С другой стороны, в программе PALINDROME не требуется никаких обращений матриц при вычислении вспо-

могательных величин*. Зато при вычислении потока приходится использовать операцию обращения.

Покажем теперь, как можно модифицировать метод PALINDROME таким образом, чтобы вспомогательные переменные исчезли, а преобразования обращения не понадобились. Решим уравнения (4.184) и (4.185), двигаясь в направлении от центра. Из уравнения (4.181) имеем

$$-\Omega \frac{dv}{d\rho} + V_{21} u + V_{22} v = S_1. \quad (4.202)$$

Подставив уравнение (4.182) в (4.202), получим

$$-\frac{dv}{d\rho} + \Omega^{-1} [V_{22} + V_{21} R] v = \Omega^{-1} [S_1 - V_{21} \Theta]. \quad (4.203)$$

Уравнение (4.203) можно решить методом Адамса—Башфорта [аналогично (4.186) и (4.187)]. Поскольку это уравнение содержит только поток нейтронов, летящих влево, то его можно решить, двигаясь по направлению к центру. Единственным обращением, которое придется производить при определении потока, является обращение Ω . Разумеется, это обращение выполняется очень просто, так как матрица Ω диагональна. Таким образом, модифицированный метод PALINDROME весьма эффективен при решении P_L -уравнений. Однако читатель, по-видимому, заметил, что такой подход практически идентичен методу, рассмотренному выше (см. разд. 4.3.2). Существенной чертой модифицированного метода PALINDROME является использование дифференциальных уравнений относительно вспомогательных переменных. Эти дифференциальные уравнения можно решить с помощью «методов по шагам», не требующих обращения матриц. Марчук и Шмидт применяли метод конечных разностей непосредственно к кинематическому уравнению и, таким образом, косвенным путем получали разностные уравнения для вспомогательных переменных. При этом оказалось, что полученные разностные уравнения не могут быть решены без обращения матриц. Разумеется, существуют определенные преимущества в прямом получении разностных уравнений из дифференциальных уравнений для вспомогательных переменных, так как это те самые уравнения, с которыми мы должны иметь дело. При прямом получении разностных уравнений мы в состоянии контролировать их форму в процессе решения. В противном случае такая возможность отсутствует. Очевидно, что метод PALINDROME как в своем первоначальном, так и модифицированном виде может быть использован не только для цилиндрической, но и для плоской и сферической геометрий.

§ 4.5. АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД

4.5.1. В предыдущих разделах мы использовали для решения P_L - и двойных P_L -уравнений конечно-разностные методы. Однако очень часто эти уравнения могут быть решены аналитически. Может показаться разумным использовать аналитические методы решения во всех случаях, когда они существуют, и читатель с полным основанием может задать вопрос, почему мы довольно нерешительно делаем это.

Фактически аналитические методы приходится использовать очень редко, так как они имеют два существенных недостатка. Во-первых, они иногда очень

* Это утверждение несколько неточно. Для расчета R необходимо определить $\left. \frac{dR}{d\rho} \right|_{\rho \equiv 0} = R'(0)$. Если R является $N \times N$ -матрицей, то для определения $R'(0)$ необходимо решить уравнение N^2 степени относительно N^2 неизвестных (см. [34]). Таким образом, при больших значениях N расчет $R'(0)$ может оказаться весьма сложным. Этот расчет может быть выполнен посредством обращений $N \times N$ -матрицы. К счастью, эта матрица зависит лишь от порядка приближения и совершенно не зависит от параметров задачи. Для данного приближения обращение может быть выполнено раз и навсегда, в связи с чем мы не будем рассматривать этот вопрос.

сложны. Особенно громоздки аналитические методы в цилиндрической геометрии и прежде всего в тех случаях, когда распределение источников не является кусочно-постоянным. Во-вторых, использование аналитических методов сопряжено с трудностями, связанными с округлением. Эти трудности весьма существенны и их нелегко устранить.

Чтобы легче понять влияние эффектов, связанных с округлением, мы ограничимся случаем плоской геометрии и рассмотрим очень простую задачу. Представим себе однородную пластину, ограниченную плоскостями $x = 0$ и $x = t$ и погруженную в «вакуум». В пластине имеются однородные и изотропные источники S . Мы используем граничные условия Марка на обеих поверхностях пластины и попытаемся вычислить поток внутри нее. Запишем P_L -уравнения в форме метода дискретных ординат

$$\mu_i \frac{dF_i}{dx} + \Sigma_{tot} F_i = \sum_{l=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{l'} P_{l'}(\mu_i) + \frac{1}{2} S \quad (i = 1, 2, \dots, N); \quad (4.204)$$

$$f_{l'} \equiv \sum_{i=1}^N \omega_i F_i P_{l'}(\mu_i).$$

Как и в разд. 4.2.1, можно написать

$$D \frac{dF}{dx} + \Sigma F = \Sigma_s F + \frac{1}{2} S$$

или

$$\frac{dF}{dx} + KF = \frac{1}{2} D^{-1} S. \quad (4.205)$$

Ясно, что

$$F(t) = e^{-Kt} F(0) + \frac{1}{2} K^{-1} [1 - e^{-Kt}] D^{-1} S = MF(0) + T. \quad (4.206)$$

Разделим компоненты F на две группы, соответствующие нейтронам, летящим вправо и влево:

$$F \equiv \begin{pmatrix} F^+ \\ F^- \end{pmatrix}; \quad F^+ \equiv \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{N/2} \end{pmatrix}; \quad F^- \equiv \begin{pmatrix} F_{1+N/2} \\ F_{2+N/2} \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix}. \quad (4.207)$$

Выше мы предполагали, что N четно и что $\mu_i > 0$ при $i \leq N/2$ и $\mu_i < 0$ при $i > N/2$. Аналогично напишем

$$T \equiv \begin{pmatrix} T^+ \\ T^- \end{pmatrix}.$$

По определению

$$F(0) = \begin{pmatrix} F^+(0) \\ F^-(0) \end{pmatrix}; \quad F(t) = \begin{pmatrix} F^+(t) \\ F^-(t) \end{pmatrix}. \quad (4.208)$$

Но $F^+(0) = F^-(0) = 0$. Следовательно,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ F^-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ N_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^+(t) \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} T^+ \\ T^- \end{pmatrix}. \quad (4.209)$$

Здесь мы разделим M на четыре квадратные матрицы. Из этого последнего уравнения следует, что

$$\left. \begin{aligned} 0 &= M_{11} F^+(t) + T^+, \\ F^-(0) &= M_{21} F^+(t) + T^-, \\ F^+(t) &= -M_{11}^{-1} T^+, \end{aligned} \right\} \quad (4.210)$$

$$F^-(0) = -M_{21} M_{11}^{-1} T^+ + T^-. \quad (4.211)$$

Соотношения (4.210) и (4.211) дают формальное решение P_L -уравнений. К сожалению, как мы сейчас увидим, они практически малопригодны.

В разд. 4.2.1 мы уже отмечали, что матрица K может быть диагонализирована:

$$K = U \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & K_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & K_N \end{pmatrix} U^{-1};$$

$$e^{-Kx} = U \begin{pmatrix} e^{-K_1 x} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & e^{-K_2 x} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-K_N x} \end{pmatrix} U^{-1}.$$

Через U обозначена матрица, столбцы которой являются собственными векторами матрицы K . Пусть K_N — максимальное по величине отрицательное собственное значение. Тогда, если t достаточно велико,

$$e^{-Kt} = M \approx U \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & e^{-K_N t} \end{pmatrix} U^{-1}.$$

Если последнюю строчку U^{-1} обозначить V_N , а последний столбец U обозначить U_N , то можно написать

$$m_{ij} \approx U_{N_i} V_{N_j} e^{-K_N t},$$

где m_{ij} — элемент матрицы M . Отсюда следует, что квадратная матрица M_1 при $t \rightarrow \infty$ становится вырожденной. Таким образом, если значение t достаточно велико, расчет матрицы, обратной M_{11} , будет весьма чувствителен к погрешности округления. Из определения матрицы T мы также видим, что при возрастании t элементы этой матрицы становятся очень большими. Следовательно, при расчете $F^{-}(0)$ с помощью уравнения (4.211) приходится оперировать с очень большими числами.

4.5.2. В этом разделе мы рассмотрим один из способов устранения погрешности округления, который представляется весьма многообещающим*. Ниже мы обсудим аналитический метод расчета задач в плоской геометрии, свободный от погрешности округления. Предварительно полезно уделить внимание некоторым особенностям оператора U .

Предположим, что F_n — n -я собственная функция оператора K . Тогда

$$K_n \mu_i F_{ni} + \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{nl'} P_{l'}(\mu_i), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.212)$$

В соответствии с (4.207) мы напомним

$$F_n = \begin{pmatrix} F_n^+ \\ F_n^- \end{pmatrix}. \quad (4.213)$$

В дальнейшем перенумеруем компоненты F таким образом, чтобы

$$\mu_{1+N/2} = -\mu_1, \quad \mu_{2+N/2} = -\mu_2 \text{ и т. д.}$$

* Подход, который рассматривается ниже, был изложен в работе Л. Лойса [42]. Автор попытался использовать основные идеи работы, чтобы упростить и обобщить предложенный метод расчета.

Пусть $K_m = -K_n$. Тогда с помощью уравнения (4.212) можно показать, что

$$F_m = \begin{pmatrix} F_n^- \\ F_n^+ \end{pmatrix}. \quad (4.214)$$

Теперь перенумеруем собственные значения K так, чтобы $K_1 > 0$, $K_{1+N/2} = -K_1$, $K_2 > 0$, $K_{2+N/2} = -K_2$ и т. д. С помощью такой упорядоченной системы и соотношений (4.213) и (4.214) легко показать, что U имеет форму

$$U = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}.$$

Кроме того,

$$U^{-1} K U = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix},$$

где

$$k = \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & K_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & K_{N/2} \end{pmatrix}.$$

Теперь мы готовы к формулировке предполагаемого способа решения P_L -уравнений.

Поддействуем на уравнение (4.205) оператором U^{-1} и обозначим

$$U^{-1} F = \hat{f} = \begin{pmatrix} \hat{f}^+ \\ \hat{f}^- \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\begin{pmatrix} \frac{d\hat{f}^+}{dx} \\ \frac{d\hat{f}^-}{dx} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}^+ \\ \hat{f}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} U^{-1} D^{-1} S = s = \begin{pmatrix} s^+ \\ s^- \end{pmatrix}^*.$$

Отсюда следует, что

$$\hat{f}^+(t) = e^{-kt} \hat{f}^+(0) + k^{-1} [1 - e^{-kt}] s^+, \quad (4.215)$$

$$\hat{f}^-(t) = e^{-kt} \hat{f}^-(0) - k^{-1} [1 - e^{-kt}] s^-. \quad (4.216)$$

Далее, поскольку U имеет вид

$$U = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix},$$

матрица U^{-1} (как легко проверить) должна иметь вид

$$U^{-1} \equiv V = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

По определению

$$\hat{f}(0) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ F^-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta F^-(0) \\ \alpha F^-(0) \end{pmatrix},$$

откуда

$$\hat{f}^+(0) = \beta \alpha^{-1} \hat{f}^-(0) = \gamma \hat{f}^-(0). \quad (4.217)$$

Аналогично

$$\hat{f}^-(t) = \beta \alpha^{-1} \hat{f}^+(t) = \gamma \hat{f}^+(t). \quad (4.218)$$

* Можно показать, что $s^- = -s^+$, однако это обстоятельство для нас несущественно.

Подставив эти выражения в уравнения (4.215) и (4.216), получим

$$\begin{aligned} f^+(t) &= e^{-kt} \gamma f^-(0) + \tau^+, \\ f^-(0) &= e^{-kt} \gamma f^+(t) - \tau^-, \\ \tau^+ &= k^{-1} [1 - e^{-kt}] s^+, \\ \tau^- &= k^{-1} [1 - e^{-kt}] s^-. \end{aligned}$$

И, наконец,

$$f^+(t) = (1 - e^{-kt} \gamma e^{-kt} \gamma)^{-1} (-e^{-kt} \gamma \tau^- + \tau^+), \quad (4.219)$$

$$f^-(0) = (1 - e^{-kt} \gamma e^{-kt} \gamma)^{-1} (e^{-kt} \gamma \tau^+ - \tau^-). \quad (4.220)$$

Уравнения (4.217)–(4.220) определяют векторы $f(0)$ и $f(t)$. Поскольку $F = Uf$, мы можем написать

$$\begin{aligned} F^+(t) &= Af^+(t) + Bf^-(t), \\ F^-(0) &= Bf^+(0) + Af^-(0). \end{aligned}$$

Очевидно, что $e^{-kt} \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, вследствие чего матрица $1 - e^{-kt} \gamma e^{-kt} \gamma$ стремится к единичной и при больших t для нее нетрудно получить обратную матрицу. В только что описанной процедуре нет фактически ни одного места, где была бы существенна проблема погрешностей округления.

В наши намерения не входит детальное обсуждение аналитических способов расчета, хотя некоторые краткие замечания было бы полезно сделать. Для выполнения очерченной выше процедуры необходимо найти все собственные функции оператора K . Эта задача не так уж трудна, как может показаться. Если K является $N \times N$ -матрицей, то его собственные функции могут быть легко связаны с собственными функциями присоединенной $N/2 \times N/2$ -матрицы. Чтобы показать это, заметим, что согласно (4.204) уравнения метода дискретных ординат могут быть записаны в форме

$$\begin{aligned} \psi' + \Sigma_1 \chi &= S, \\ \chi' + \Sigma_2 \psi &= 0. \end{aligned}$$

Здесь ψ и χ имеют тот же смысл, что и в уравнениях (4.99) и (4.100), в то время как Σ_1 и Σ_2 представляют собой матрицы, которые мы не станем определять точно. Отсюда следует, что можно найти такое преобразование подобия, что

$$V^{-1}KV = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_1 \\ \Sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \tilde{K}.$$

Следовательно, если известны собственные функции \tilde{K} , можно вычислить собственные функции K .

Пусть

$$\tilde{K} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \chi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_1 \\ \Sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \chi_n \end{pmatrix} = K_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \chi_n \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\Sigma_2 \Sigma_1 \chi_n = K_n^2 \chi_n, \quad (4.221)$$

$$\psi_n = \Sigma_1 \chi_n / K_n. \quad (4.222)$$

Таким образом, χ_n — собственные векторы матрицы $\Sigma_2 \Sigma_1$, а ψ_n могут быть выражены непосредственно через χ_n^* .

Получив собственные векторы K , можно сразу же построить матрицу U , столбцы которой являются этими векторами. Правда, необходимо еще обратить матрицу U . К счастью, как мы покажем ниже, расчет матрицы U^{-1} тривиален.

* Уравнение (4.221) относительно χ_n может быть решено различными способами. По нашему мнению, очень эффективным и точным методом является метод Данилевского [43].

Перепишем еще раз уравнение (4.212), которым определяется n -я собственная функция K ,

$$K_n \mu_i F_{ni} + \Sigma_{tot} F_{ni} = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{nl'} P_{l'}(\mu_i). \quad (4.212)$$

Аналогично можно написать

$$K_m \mu_i F_{mi} + \Sigma_{tot} F_{mi} = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{ml'} P_{l'}(\mu_i). \quad (4.223)$$

Умножив теперь уравнение (4.212) на $\omega_i F_{mi}$ и (4.223) на $\omega_i F_{ni}$, получим

$$K_n \sum_{i=1}^N \omega_i \mu_i F_{ni} F_{mi} + \Sigma_{tot} \sum_{i=1}^N \omega_i F_{ni} F_{mi} = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{nl'} f_{ml'};$$

$$K_m \sum_{i=1}^N \omega_i \mu_i F_{mi} F_{ni} + \Sigma_{tot} \sum_{i=1}^N \omega_i F_{mi} F_{ni} = \sum_{l'=0}^{N-1} \left(\frac{2l'+1}{2} \right) \Sigma_{s, l'} f_{ml'} f_{nl'}.$$

Ясно, что при $n \neq m$

$$\sum_{i=0}^N \omega_i \mu_i F_{ni} F_{mi} = 0^*. \quad (4.224)$$

Вектор, компоненты которого равны $\omega_i \mu_i F_{ni}$, не может быть ортогонален N линейно независимым векторам. Следовательно,

$$\sum_{i=0}^N \omega_i \mu_i F_{ni} \equiv C_n \neq 0.$$

Предположим, что собственные векторы нормированы таким образом, что для всех n $C_n = 1$. Определим

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \mu_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \mu_{N/2} \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \omega_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \omega_{N/2} \end{pmatrix}.$$

С помощью уравнения (4.224) можно легко показать, что

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} A^T W \mu, & -B^T W \mu \\ -B^T W \mu, & A^T W \mu \end{pmatrix}.$$

Через A^T и B^T обозначены матрицы, транспонированные по отношению к матрицам A и B , встречающимся уже в этом разделе.

* Отметим, что в P_L -приближении все собственные значения различны, т. е. $K_n \neq K_m$ [22].

Предположим теперь, что распределение источников S зависит от координат. Тогда

$$f^+(t) = e^{-kt} f^+(0) + \tau^+, \quad (4.225)$$

$$f^-(0) = e^{-kt} f^-(t) - \tau^-, \quad (4.226)$$

где

$$\tau^+(t) = \int_0^t e^{k(x-t)} s^+(x) dx,$$

$$\tau^-(0) = \int_0^t e^{-kx} s^-(x) dx.$$

Кроме того, если поток влетающих нейтронов не равен нулю, то

$$f^+(0) = U^{-1} F(0) = \begin{pmatrix} \beta F^-(0) + \alpha F^+(0) \\ \alpha F^-(0) + \beta F^+(0) \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$f^+(0) = \beta \alpha^{-1} f^-(0) + (\alpha - \beta \alpha^{-1} \beta) F^+(0) = \gamma f^-(0) + \delta F^+(0). \quad (4.227)$$

Аналогично

$$f^-(t) = \gamma f^+(t) + \delta F^-(t). \quad (4.228)$$

Таким образом, из (4.225) и (4.226) получим

$$f^+(t) = e^{-kt} \gamma f^-(0) + e^{-kt} \delta F^+(0) + \tau^+(t), \quad (4.229)$$

$$f^-(0) = e^{-kt} \gamma f^+(t) + e^{-kt} \delta F^-(t) - \tau^-(t). \quad (4.230)$$

Как и выше, можно разрешить уравнения (4.227)—(4.230) относительно $f^+(t)$ и $f^-(t)$. Используя эти величины, легко получить потоки на границах.

Из последних четырех уравнений можно получить соотношения следующего вида:

$$F^-(0) = RF^+(0) + TF^-(t) + V^-(0),$$

$$F^+(t) = RF^-(t) + TF^+(0) + V^+(t).$$

Величины R и T можно рассматривать как коэффициенты отражения и прохождения соответственно; $V^+(t)$ и $V^-(0)$ — вклад в поток от источника S . Если известны R , T , $V^+(t)$ и $V^-(0)$ для различных зон многозонной пластины, то можно рассчитать поток в пластине методом инвариантного вложения. При желании читатель сможет самостоятельно исследовать этот вопрос.

В данном разделе мы еще ничего не сказали о сферической и цилиндрической геометриях. Фактически далеко не ясно, могут ли методы, изложенные в этом разделе, использоваться в других геометриях. Поскольку нам неизвестны иные способы решения, свободные от погрешностей округления, то нам представляется, что проблемы, связанные с погрешностями округления при использовании аналитических методов, еще не разрешены. Требуется проделать значительную работу, чтобы эти методы стали достаточно надежными.

§ 4.6. ДРУГИЕ ВОПРОСЫ

В самом начале данной главы мы отмечали, что появление метода сферических гармоник относится к 1926 г. Таким образом, этот метод, изобретенный первоначально астрофизиками, старше, чем теория переноса нейтронов. Мы живем в такое время, когда целые области прикладных наук рождаются, совершенствуются и иногда исчезают в течение десятилетия. В эпоху, когда физика изменяется так быстро, метод, существующий в течение сорока лет, должен считаться устаревшим. За сорок лет с помощью метода сферических гармоник было выполнено огромное количество работ, подробное изложение которых

здесь невозможно. Тем не менее, прежде чем закончить главу, нам хотелось бы остановиться на тех аспектах теории, которые мы до сих пор не рассматривали.

Читатель, по-видимому, отметил, что в предыдущих разделах мы ничего не говорили об использовании двойного P_L -приближения в цилиндрической геометрии. Насколько известно, до сих пор еще никто не дал точной формулировки двойного P_L -приближения для цилиндрической геометрии*, однако автором совместно с Шмидтом был разработан приближенный метод, сходный с двойным P_L -приближением.

Для вывода цилиндрических P_L -уравнений можно воспользоваться разложением потока по сферическим гармоникам, однако вместо этого мы используем здесь метод дискретных ординат. Обозначим через μ_i i -й положительный корень полинома $P_{2N}(\mu)$. Значения μ_i определяют N конусов, симметричных относительно оси Z . Выберем для каждого i целое число M_i и построим $1 + M_i$ ортонормированных полиномов $\pi_{ni}^{\pm}(\nu)$, удовлетворяющих условиям

$$\int_0^{\pi/2} \pi_{ni}^{\pm}(\nu) \pi_{mi}^{\pm}(\nu) d\varphi = \int_0^1 d\nu \pi_{ni}^{\pm}(\nu) \pi_{mi}^{\pm}(\nu) / (1-\nu^2)^{1/2} = \\ = \delta_{nm} \quad (n, m = 0, 1, \dots, M_i).$$

Здесь $\nu = \cos \varphi$. Пусть ν_{ij}^{\pm} — j -й корень функции $\pi_{M_i}^{\pm}(\nu)$. Обозначим $\varphi_{ij}^{\pm} = \arccos(\nu_{ij}^{\pm})$. Каждой паре ij сопоставим единичный вектор (ординату) Ω_{ij}^{\pm} с полярной координатой μ_i и азимутальной координатой ν_{ij}^{\pm} . Подобным же образом построим полиномы $\pi_{ni}^{-}(\nu)$, ортогональные в интервале $\{\pi/2, \pi\}$; определим углы φ_{ij}^{-} и ординаты Ω_{ij}^{-} . Предположим для простоты, что рассеяние изотропно. Тогда для каждой ординаты транспортное уравнение в цилиндрических координатах будет иметь вид

$$(1 - \mu_i^2)^{1/2} \left[\cos \varphi_{ij}^{\pm} \frac{\partial F_{ij}^{\pm}}{\partial r} - \frac{\sin \varphi_{ij}^{\pm}}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \Big|_{\mu_i, \varphi_{ij}^{\pm}} \right] + \Sigma F_{ij}^{\pm} = \\ = \frac{1}{4\pi} \Sigma_{s0} F_0 + \frac{1}{4\pi} S. \quad (4.231)$$

Введем теперь весовые множители w_{ij}^{\pm} такие, что

$$\sum_{j=1}^{M_i} w_{ij}^{\pm} (\nu_{ij}^{\pm})^n = \int_0^1 d\nu \nu^n / (1-\nu^2)^{1/2}, \\ \sum_{j=1}^{M_i} w_{ij}^{-} (\nu_{ij}^{-})^n = \int_{-1}^0 d\nu \nu^n / (1-\nu^2)^{1/2} \quad (n = 0, 1, \dots, M_i - 1).$$

Если весовые множители выбраны так, что выписанные выше соотношения удовлетворяются, то

$$\sum_{j=1}^{M_i} w_{ij}^{\pm} (\nu_{ij}^{\pm})^n = \int_0^1 d\nu \nu^n / (1-\nu^2)^{1/2}, \\ \sum_{j=1}^{M_i} w_{ij}^{-} (\nu_{ij}^{-})^n = \int_{-1}^0 d\nu \nu^n / (1-\nu^2)^{1/2} \quad (n = 0, 1, \dots, 2M_i - 1).$$

* З а м е ч а н и е п р и к о р р е к т у р е. В последнее время появились работы [54, 55], в которых обсуждается использование двойного P_L -приближения в цилиндрической геометрии.

Теперь в каждом полярном конусе можно аппроксимировать поток с помощью интерполирующих полиномов:

$$F(\rho, \mu_i, \varphi) \approx \sum_{l=0}^{M_i-1} f_{li}^+(\rho) \pi_{li}^+(\nu) \left(0 \leq \varphi < \frac{\pi}{2}\right), \quad (4.232)$$

$$F(\rho, \mu_i, \varphi) \approx \sum_{l=0}^{M_i-1} f_{li}^-(\rho) \pi_{li}^-(\nu) \left(\frac{\pi}{2} \leq \varphi < \pi\right). \quad (4.233)$$

Здесь

$$f_{li}^+(\rho) \equiv \sum_{j=1}^{M_i} \omega_{ij}^+ F(\rho, \mu_i, \nu_{ij}^+) \pi_{li}^+(\nu_{ij}^+),$$

$$f_{li}^-(\rho) \equiv \sum_{j=1}^{M_i} \omega_{ij}^- F(\rho, \mu_i, \nu_{ij}^-) \pi_{li}^-(\nu_{ij}^-).$$

Ясно, что

$$F_0(\rho) \approx 2 \sum_{i=1}^N \omega_i [f_{0i}^+(\rho) + f_{0i}^-(\rho)], \quad (4.234)$$

где ω_i — обычные весовые множители квадратурной формулы Гаусса. Подставив соотношения (4.232)—(4.234) в уравнение (4.231), получим систему уравнений метода дискретных ординат. Следует отметить, что зависимость F от φ является дельтаобразной. Для операций с δ -функцией необходимо использовать те же приемы, которые уже обсуждались в предыдущем разделе. К сожалению, в настоящее время мы очень мало знаем о том, какую точность можно ожидать от уравнений метода дискретных ординат в цилиндрической геометрии.

До сих пор мы ничего не сказали об использовании метода сферических гармоник в случаях, когда имеется более чем одна переменная. В многомерных геометриях P_L -уравнения при всех $L > 1$ становятся чрезвычайно сложными. Мы не будем заниматься здесь выводом многомерных уравнений. Вывод P_L -уравнений в общем случае можно найти в книге Дэвисона [5]; P_L -уравнения в (x, y) -геометрии выписаны полностью в работе [45]. Условия на границах между средами получены в работе [45]. Общие граничные условия между средами можно найти в работах [8, 39]. В последних трех работах граничные условия совпадают, однако они отличаются от условий, полученных Дэвисоном [5]. Таким образом, в вопросе о том, какие условия лучше соответствуют действительности, имеет место некоторая неопределенность. Что касается граничных условий Маршака, то сам Маршак, по-видимому, не имел определенного мнения о том, какие условия должны быть использованы в многомерных случаях. Различные граничные условия предлагались, с одной стороны Дэвисоном [5], а с другой — Дэвисом [8] и Румянцевым [39]. Вывод Дэвисоном граничных условий шивки и условий Маршака представляется несколько произвольным, в то время как Дэвис получает граничные условия непосредственно из вариационного принципа. По этой причине условия Дэвиса—Румянцева кажутся предпочтительнее, хотя в настоящее время у нас нет достаточного опыта для обоснования этого выбора.

Насколько нам известно, численные решения в двухмерных случаях получены только для P_1 - и P_3 -уравнений*. Решение P_3 -уравнений в (x, y) -геометрии реализовано в программе TRIP [45]. При этом используется метод, который мы уже обсуждали.

* Имеется решение P_5 - и P_7 -уравнений, записанных в упрощенном виде, однако решений точных P_5 - и P_7 -уравнений до сих пор не получено.

В P_3 -приближении

$$F(\mu, \varphi, x, y) = \sum_{l=0}^L \psi_{l0}(x, y) P_l(\mu) + \sum_{l=0}^L \sum_{m=1}^l [\psi_{lm}(x, y) \cos m\varphi + \chi_{lm}(x, y) \sin m\varphi] P_l^m(\mu). \quad (4.235)$$

Учитывая, что $F(\mu, \varphi, x, y) = F(-\mu, \varphi, x, y)$, мы видим, что $\psi_{lm}(x, y) = \chi_{lm}(x, y) = 0$ для всех четных $l-m$. Следовательно, в уравнениях (4.235) не обращаются в нуль только следующие коэффициенты:

$$\psi_{00}, \psi_{20}, \psi_{11}, \chi_{11}, \psi_{22}, \chi_{22}, \psi_{33}, \chi_{33}, \psi_{31}, \chi_{31}.$$

В соответствии с этим существует десять линейных P_3 -уравнений первого порядка, которые (вместе с граничными условиями) определяют указанные коэффициенты.

Из десяти уравнений шесть содержат нечетные индексы, а четыре — четные. Оказывается, что коэффициенты с нечетными индексами могут быть исключены из P_3 -уравнений*. После такого исключения останется четыре уравнения второго порядка в частных производных. Первое из этих уравнений имеет вид диффузионного; оно связано с остальными уравнениями посредством члена, описывающего источники. Остальные три уравнения являются более сложными. В таком виде система из четырех уравнений решается в программе TRIP с помощью итерационного метода, предназначенного для решения диффузионных уравнений,

$$-D_i \varphi_i' + \gamma_i \varphi_i = C_i S + \sum_j \alpha_{ij} \varphi_j. \quad (4.236)$$

Таким образом можно, например, решать P_3 -уравнения в случае пластины**

$$\begin{aligned} -D_1 \varphi_0'' + \Sigma_a \varphi_0 &= S - 2\Sigma_a \varphi_1; \\ -D_2 \varphi_1'' + \alpha \varphi_1 &= -\frac{2}{3} S + \frac{2}{3} \Sigma_a \varphi_0, \end{aligned}$$

где

$$F_0 = \varphi_0 + 2\varphi_1; \quad F_2 = \varphi_1; \quad D_1 = \frac{1}{3\Sigma_1};$$

$$D_2 = \frac{3}{7\Sigma_3}; \quad \alpha = \left(\frac{5}{3}\right) \Sigma_2 + \left(\frac{4}{3}\right) \Sigma_a.$$

В случае пластины имеется только два P_3 -уравнения второго порядка, в то время как в (x, y) -геометрии — четыре уравнения. В плоском случае уравнения (4.236) связаны между собой только посредством φ . С другой стороны, уравнения в (x, y) -геометрии связаны не только посредством четных моментов потока, но также посредством их производных. Ясно, что P_3 -уравнения в (x, y) -геометрии значительно сложнее P_3 -уравнений в плоском случае. Однако естественно возникает следующий вопрос.

Предположим, что в уравнении (4.84) мы заменили вторую производную лапласианом. Какой смысл будут иметь полученные «упрощенные P_3 -уравнения» в криволинейных или многомерных геометриях? В более общем случае: если мы заменим вторые производные лапласианами в уравнениях (4.236), какой смысл будут иметь полученные «упрощенные P_L -уравнения»? Можно показать [46], что упрощенные и точные P_L -уравнения эквивалентны в любой геометрии, если а) полное сечение не зависит от координат; б) рассеяние изотропно.

* Излагаемая здесь процедура аналогична той, которая использовалась при выводе FLIP-уравнений (см. разд. 4.2.3).

** Здесь для удобства мы переписали уравнения (4.84).

В сферической и цилиндрической геометриях условие б) может быть несколько ослаблено. В этих геометриях упрощенные и точные P_L -уравнения эквивалентны, если: а) полное сечение не зависит от координат; б) все $\Sigma_{s, l}$, кроме $\Sigma_{s, 1}$, обращаются в нуль.

Эквивалентность между P_L - и упрощенными P_L -уравнениями представляется весьма удивительной. Чтобы оценить всю неожиданность этой эквивалентности, рассмотрим следующий факт. В двухмерной геометрии имеется 36 P_7 -уравнений. Однако если условия а) и б) удовлетворяются, то эти 36 уравнений могут быть преобразованы в четыре простым образом связанных диффузионных уравнения. В то время как решение точных P_7 -уравнений в двухмерном случае сопряжено со значительными трудностями, для решения связанных диффузионных уравнений разработаны простые и вместе с тем весьма мощные методы*.

Упрощенные уравнения могут быть использованы различными способами. Рассмотрим, например, следующую задачу. Пусть требуется вычислить вероятность P вылета нейтрона без столкновения из выпуклого однородного тела, погруженного в «вакуум» и содержащего изотропный рассеиватель. Обозначим полное сечение через Σ_{tot} . Поток внутри тела не изменится, если заменить «вакуум» чистым поглотителем. Пусть Σ_a — сечение поглощения в этом поглотителе — равно Σ_{tot} . Теперь условия а) и б) удовлетворены, и мы можем использовать для расчета P упрощенные уравнения.

Иногда полезно иметь в своем распоряжении тестовую задачу, которая решена очень точно. Можно придумать много интересных геометрически сложных тестовых задач с изотропным рассеянием и пространственно независимым полным сечением. В таких задачах можно рассчитать поток с помощью P_L -приближений высокого порядка, используя упрощенные уравнения. Точные решения тестовых задач можно использовать в качестве стандартов при изучении точности любого нового расчетного метода.

Часто случается, что упрощенные и точные уравнения не точно, а лишь приближенно эквивалентны. При этом часто они дают практически одинаковые значения скалярного потока $F_0(r)$ при всех r . Это имеет место, например, в сферической и цилиндрической геометриях при условии, что все поверхности раздела лежат на расстоянии, во много раз превышающем среднюю длину свободного пробега, от центра или оси симметрии. В связи с этим упрощенные P_L -уравнения удобны при одномерных расчетах защиты. Упрощенные P_L -уравнения входят в P_3MG -программу [47], которая широко используется для расчета защиты в установке Bettis и в других установках.

Все, что мы до сих пор обсуждали, все методы, которые рассматривали в этой главе, относились исключительно к моноэнергетическому кинетическому уравнению. Однако давно уже прошло то время, когда при расчетах и проектировании реакторов полагались на однокоростные расчеты. Сегодня моноэнергетические задачи имеют лишь академический интерес. Однако все описанные выше методы могут быть использованы и при решении задач с зависимостью от координат и энергии. Практически обычно пространственно-энергетическое кинетическое уравнение сводится к совокупности моноэнергетических уравнений путем введения сетки по оси энергии. Сознвая, что наша терминология далека от совершенства, мы все-таки считаем удобным разделить групповые методы на два широких класса: многогрупповые и малогрупповые приближения.

В обоих приближениях задается конечное число интервалов на оси энергии, или энергетических групп. В многогрупповой сетке интервалы более мелкие. Фактически они настолько малы, что в многогрупповых уравнениях могут использоваться непосредственно точные значения сечений. Малогрупповые интервалы сравнительно велики, так что сечения должны быть усреднены по некоторому приближенному предварительно вычисленному спектру нейтронов. Следует понимать, что каждое из приближений непрерывно переходит

* См. гл. 2.

в другое и между ними нельзя провести какой-то резкой границы. Тем не менее, простоты ради, мы будем рассматривать эти приближения отдельно, причем ограничимся случаем плоской геометрии. Сначала рассмотрим многогрупповой метод в том виде, в каком он используется в программе GAM1 [48].

В плоской геометрии пространственно-энергетические P_L -уравнения имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} F_1'(u, x) + \Sigma_{tot}(u, x) F_0(u, x) &= \\ &= \int_0^u K_0(u' \rightarrow u, x) F_0(u', x) du' + S_0(u, x); \\ \frac{1}{3} F_0'(u, x) + \frac{2}{3} F_2'(u, x) + \Sigma_{tot}(u, x) F_1(u, x) &= \\ &= \int_0^u K_1(u' \rightarrow u, x) F_1(u', x) du', \end{aligned} \right\} \quad (4.237)$$

и т. д. Здесь u — летаргия; $K_l(u' \rightarrow u, x)$ — лезандровы моменты ядра рассеяния; $S_0(u, x)$ — источники. Происхождение источников не имеет значения. Это могут быть источники деления или источники иного вида, однако мы будем здесь предполагать, что они изотропны. Выберем $N + 1$ значений летаргии: $u_0 (u_0 \equiv 0)$, $u_1 > u_0$, $u_2 > u_1$, ..., $u_{N-1} > u_N$. Предположим, что в каждом промежутке между соседними точками поток постоянен, и определим величины

$$F_{ii}(x) = F(u, x) [u_{i+1} - u_i] \equiv F(u, x) \Delta_i, \quad u_i < u \leq u_{i+1}.$$

Проинтегрировав уравнение (4.237) от u_i до u_{i+1} ($i = 0, 1, 2, \dots, N$), найдем

$$\left. \begin{aligned} F_{ii}'(x) + \Sigma_{tot, i}(x) F_{0i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{0ij}(x) F_{0j}(x) + S_i(x), \\ \frac{1}{3} F_{0i}'(x) + \frac{2}{3} F_{2i}'(x) + \Sigma_{tot, i}(x) F_{1i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{lij}(x) F_{lj}(x) \end{aligned} \right\} \quad (4.238)$$

и т. д. Здесь

$$\Sigma_{tot, i}(x) \equiv \int_{u_i}^{u_{i+1}} \Sigma_{tot}(u, x) du / \Delta_i, \quad (4.239)$$

$$S_i(x) \equiv \int_{u_i}^{u_{i+1}} S(u, x), \quad (4.240)$$

$$K_{lij}(x) = \int_{u_{i-1}}^{u_i} du \int_{u_{i+1}}^{u_j} du' K_l(u' \rightarrow u, x) / \Delta_j. \quad (4.241)$$

Мы не будем обсуждать методы, использованные при вычислении интегралов содержащихся в этих уравнениях, а отошлем читателя к отчету по программе GAM1 [48]. Сертайн [49], а также Амстер и Гаст [50] использовали несколько более «хитроумную» разностную технику. Они предположили, что внутри интервалов поток не постоянен, а изменяется линейно. Тем не менее их многогрупповые уравнения имеют тот же вид, что и уравнения (4.238). Существенно иной метод, в котором отсутствует вычисление матриц перехода из группы в группу, описан в работе [47].

Согласно нашей классификации, многогрупповые расчеты основаны непосредственно на микроскопических сечениях, в то время как в малогрупповые уравнения входят групповые сечения в прямом смысле, т. е. сечения,

усредненные по спектру, полученному с помощью многогрупповых расчетов. Для получения малогрупповых констант используются самые разнообразные приемы, выбор которых зависит от характера рассматриваемой задачи. Например, при малогрупповых диффузионных расчетах матрицу перехода считают диагональной, несмотря на то, что в действительности рассеяние с переходом из группы в группу анизотропно. Таким образом, вычисление P_1 -матрицы является до некоторой степени искусственным*. Это может привести к существенным погрешностям, если в среде содержатся легкие изотопы. При расчете водяных или дейтериевых реакторов для достижения высокой точности необходимо учитывать недиагональные члены матрицы.

Использование малогрупповых расчетов вместо многогрупповых диктуется соображениями экономии расчетного времени. Если малогрупповой метод слабо чувствителен к малогрупповым константам, то результаты расчета могут быть получены быстро и экономично. При этом, вообще говоря, нет необходимости проводить тщательные расчеты многогруппового спектра, с помощью которого рассчитываются малогрупповые константы. Очень часто такой спектр получают, рассчитывая системы простейшей геометрической формы. В дальнейшем мы будем рассматривать только такой случай.

Пусть, например, надо получить малогрупповые константы, пригодные для P_3 -расчета. Будем предполагать, что в пределах отдельных подзон (R_n) все сечения постоянны. В этом случае в плоской геометрии многогрупповые P_3 -уравнения имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} F'_{1i}(x) + \sum_{tot, i}^n F_{0i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{0ij}^n F_{0j}(x) + S_i(x), \\ \frac{2}{3} F'_{2i}(x) + \frac{1}{3} F'_{0i}(x) + \sum_{tot, i}^n F_{1i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{1ij}^n F_{1j}(x), \\ \frac{3}{5} F'_{3i}(x) + \frac{2}{5} F'_{1i}(x) + \sum_{tot, i}^n F_{2i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{2ij}^n F_{2j}(x), \\ \frac{3}{7} F'_{2i}(x) + \sum_{tot, i}^n F_{3i}(x) &= \sum_{j=1}^i K_{3ij}^n F_{3j}(x), \quad x \in R_n. \end{aligned} \right\} \quad (4.242)$$

Предположим, что в каждой подзоне пространственное распределение потока имеет простейший вид, т. е. для $x \in R_n$

$$S_i(x) = \chi_i^n \cos B_n x, \quad (4.243)$$

где B_n — квадратный корень из геометрического параметра подзоны. Далее, для четных l

$$F_{li}(x) = f_{li}^n \cos B_n x, \quad (4.244)$$

а для нечетных

$$F_{li}(x) = f_{li}^n \sin B_n x. \quad (4.245)$$

Подставив уравнения (4.243)—(4.245) в (4.242), найдем для каждой подзоны:

$$\left. \begin{aligned} B f_{li}^n + \sum_{tot, i}^n f_{0i}^n &= \sum_{j=1}^i K_{0ij}^n f_{0j}^n + \chi_i^n, \\ -\frac{2}{3} B f_{2i}^n - \frac{1}{3} B f_{0i}^n + \sum_{tot, i}^n f_{1i}^n &= \sum_{j=1}^i K_{1ij}^n f_{1j}^n, \\ \frac{3}{5} B f_{3i}^n + \frac{2}{5} B f_{1i}^n + \sum_{tot, i}^n f_{2i}^n &= \sum_{j=1}^i K_{2ij}^n f_{2j}^n, \\ -\frac{3}{7} B f_{2i}^n + \sum_{tot, i}^n f_{3i}^n &= \sum_{j=1}^i K_{3ij}^n f_{3j}^n. \end{aligned} \right\} \quad (4.246)$$

* См., например, работы [51] и [52].

Уравнения (4.246) легко решить относительно всех f_{li}^n , переходя от группы к группе.

Перейдем теперь к малогрупповой сетке на оси энергии следующим образом. Пусть первая группа расположена между значениями летаргии $u_0 \equiv 0$ и u_i ($i = i_1$), вторая — между u_i ($i = i_1$) и u_i ($i = i_2$) и т. д. Введем также определения

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{i1}^n &= \sum_{i=1}^{i_1} f_{li}^n, \quad \Phi_{i2}^n = \sum_{1+i_1}^{i_2} f_{li}^n, \quad \dots, \quad \Phi_{iJ}^n = \sum_{1+i_{(J-1)}}^{i_J} f_{li}^n, \\ \Sigma_{iJ}^n &= \sum_{1+i_{(J-1)}}^{i_J} \Sigma_{tot,i}^n f_{li}^n / \Phi_{iJ}^n, \\ A_{iIJ}^n &= \sum_{1+i_{(J-1)}}^{i_J} \sum_{1+i_{(I-1)}}^{i_I} K_{li_j}^n f_{li_j}^n / \Phi_{iJ}^n, \\ T_I^n &= \sum_{1+i_{(I-1)}}^{i_I} \chi_i^n. \end{aligned} \right\} \quad (4.247)$$

Просуммировав уравнения (4.246) по i , найдем

$$\left. \begin{aligned} B_n \Phi_{iI}^n + \Sigma_{0I}^n \Phi_{0I}^n &= \sum_{J=1}^n A_{0IJ}^n \Phi_{0J}^n + T_I^n, \\ -\frac{2}{3} B_n \Phi_{2I}^n - \frac{1}{3} B_n \Phi_{0I}^n + \Sigma_{1I}^n \Phi_{1I}^n &= \sum_{J=1}^I A_{1IJ}^n \Phi_{1J}^n \end{aligned} \right\} \quad (4.248)$$

и т. д. для всех n^* . Отсюда следует, что если в каждой подзоне пространственное распределение потока имеет вид косинуса, то можно написать

$$\left. \begin{aligned} \Phi'_{iI}(x) + \Sigma_{0I}^n \Phi_{0I}(x) &= \sum_{J=1}^I A_{0IJ}^n \Phi_{0J}(x) + T_I(x), \\ \frac{2}{3} \Phi'_{2I}(x) + \frac{1}{3} \Phi'_{0I}(x) + \Sigma_{1I}^n \Phi_{1I}(x) &= \sum_{J=1}^I A_{1IJ}^n \Phi_{1J}(x), \\ \frac{3}{5} \Phi'_{3I}(x) + \frac{2}{5} \Phi'_{1I}(x) + \Sigma_{2I}^n \Phi_{2I}(x) &= \sum_{J=1}^I A_{2IJ}^n \Phi_{2J}(x), \\ \frac{3}{7} \Phi'_{2I}(x) + \Sigma_{3I}^n \Phi_{3I}(x) &= \sum_{J=1}^I A_{3IJ}^n \Phi_{3J}(x), \end{aligned} \right\} \quad (4.249)$$

где

$$\Phi_{iI}(x) \equiv \sum_{1+i_{(I-1)}}^{i_I} F_{li}(x), \quad T_I(x) \equiv \sum_{1+i_{(I-1)}}^{i_I} S_i(x).$$

Уравнения (4.249) образуют совокупность малогрупповых уравнений, эквивалентных многогрупповым уравнениям (4.242).

Разумеется, распределение потока по косинусу в каждой зоне бывает очень редко. Поэтому, вообще говоря, многогрупповые и малогрупповые уравнения не полностью эквивалентны. Наиболее сильно от косинусоидального отличается распределение потока в том случае, когда в среде отсутствует размножение нейтронов. В случае таких сред обычно предполагается, что поток спадает экспоненциально, т. е.

$$F(\mu, E, x) = f(\mu, E) e^{-kx}.$$

* При выводе малогрупповых уравнений мы не используем сопряженного потока. Использование сопряженных весовых функций обсуждается в работе [44].

Имеется целый ряд проблем, связанных с обоснованием малогруппового метода, которые мы здесь не будем рассматривать. Несмотря на наличие таких примеров, малогрупповой метод является весьма употребительным. Считается, например, что реактор с замедлителем на воде может быть удовлетворительно рассчитан с помощью малогруппового приближения, причем для быстрых нейтронов достаточно отвести пять групп. Что касается использования малогрупповых приближений в расчетах защиты, то этот вопрос еще недостаточно изучен.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- $C_{ll'}^+$, $C_{ll'}^-$ — определены в (4.33)
 d — длина экстраполяции
 e — вектор погрешности
 $F(\Omega, x)$ — поток на единицу телесного угла в направлении Ω
 $F(\mu, x) = 2\pi F(\Omega, x)$
 $F_l(x)$ — коэффициенты разложения в ряд углового распределения потока
 $F_+(r, 0) = \lim_{\mu \rightarrow +0} F(r, \mu)$
 $F_-(r, 0) = \lim_{\mu \rightarrow -0} F(r, \mu)$
 φ — поток
 $\chi_l(x)$ — коэффициенты разложения в ряд углового распределения потока при отрицательных значениях угла
 μ — косинус угла между Ω и осью x
 $\mu_0 = \Omega \Omega'$
 Ω — единичный вектор в направлении скорости нейтронов
 $P_l(\mu)$ — полином Лежандра l -го порядка
 $p_l^+(\mu) = P_l(2\mu - 1)$
 $p_l^-(\mu) = P_l(2\mu + 1)$
 $\psi_l(\mu)$ — коэффициенты разложения в ряд углового распределения потока при положительных значениях угла
 ψ — определено после уравнения (4.98)
 χ — определено после уравнения (4.98)
 $S(x)$ — изотропная плотность источников
 Σ_a — сечение поглощения
 $\Sigma_s(\Omega \Omega', x)$ — дифференциальное сечение рассеяния на единицу телесного угла в направлении Ω
 $\Sigma_s(\mu_0, x) = 2\pi \Sigma(\Omega \Omega', x)$
 $\Sigma_{tot}(x)$ — полное сечение
 x, ρ, r — пространственные координаты

ЛИТЕРАТУРА

1. Chandrasekhar S. Radiative Transfer. Dover, 1950.
2. Yvon J. La Diffusion Macroscopique des Neutrons: Une Méthode d'Approximation. J. Nucl. Energy, 1, 4, 305 (1957). See also R. Mertens, Simon Stevin. Wis. Natuurk. Tijdschr. (Suppl.) 30 (1954).
3. Eddington A. The Internal Constitution of the Stars. Dover, 1926.
4. Magnus W., Oberhettinger F. Special Functions of Mathematical Physics. Chelsea, 1949.
5. Davison B. Neutron Transport Theory. Oxford, 1957. (См. на русском языке: Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1961.)
6. Mingle J. The Even-Order Spherical Harmonics Method in Cylindrical Geometry. Nucl. Sci. Engng, 20, 3 (1964).
7. Marchuk G. Theory and Methods of Nuclear Reactor Calculations. Consultants Bureau, 1964.
8. Davis J. Variational Vacuum Boundary Conditions for a P_N Approximation. Trans. ANS 8,2 (1965); Davis J. Continuity Conditions for a Homogeneous or Heterogeneous P_N Approximation. Trans. ANS 9, 1 (1966).
9. Gelbard E., Schmidt E. Improved P_3 Vacuum Boundary Conditions and Their Use in Pulse Calculations. Trans. ANS, 8, 1 (1965).
10. Kourganoff V. Basic Methods in Transfer Problems. Oxford, 1952.
11. Weinberg A., Wigner E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. University of Chicago Press, Chicago, 1958. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)

12. Marchuk G. Numerical Methods for Nuclear Reactor Calculations. Consultants Bureau, 1959.
13. Steward J. Solutions of the Gamma-Ray Transport Equation Using Tchebysheff Polynomial Expansions and the Moments Method. University Microfilms Inc., Ann Arbor, Michigan, 1964.
14. Conkie W. Polynomial Approximations in Neutron Transport Theory. Nucl. Sci. Engng, 6, 4 (1959).
15. Flanders D., Shortley G. Numerical Determination of Fundamental Modes. J. Appl. Phys., 21, 1326 (1950).
16. Hildebrand F. Introduction to Numerical Analysis. McGraw-Hill, 1956.
17. Richtmyer R. Difference Methods for Initial-Value Problems. Interscience, 1957.
18. Goertzel G. The Method of Discrete Ordinates. Nucl. Sci. Engng, 4, 4 (1958).
19. Gast R. On the Equivalence of the Spherical Harmonics Method and the Discrete Ordinate Method Using Gauss Quadrature for the Boltzmann Equation. WAPD—TM—118 (1958).
20. Gantmacher F. R. Matrix Theory. Vol. 2, Chelsea Publishing Co., 1959. (См. на русском языке: Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., «Наука», 1966.)
21. Henrici P. Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations. John Wiley and Sons, 1962.
22. Gelbard E. Properties of the P_L - and Double P_L - Relaxation Lengths in the Presence of Anisotropic Scattering. Nucl. Sci. Engng, 24, 3 (1966).
23. Gelbard E. M., Kaplan S. Reality of Relaxation Lengths in Various Approximate Forms of the Slab Transport Equation. Nucl. Sci. Engng, 26, 4 (1966).
24. Daitch P. et al. CEPTR, An IBM—704 Code to Solve the P_3 -Approximation to the One Velocity Transport Equation in Cylindrical Geometry. MPC—20 (1959).
25. Hageman L., Mandel J. RANCH, An IBM—704 Code Used to Solve the One-Dimensional Single Energy Neutron Transport Equation with Anisotropic Scattering. WAPD—TM—268 (1960).
26. Varga R. Matrix Iterative Analysis. Prentice-Hall, 1962.
27. Ehrlich R., Hurwitz H. Multigroup Methods for Neutron Diffusion Problems. Nucleonics, 12, 2 (1954).
28. Hageman L. Block Iterative Methods for Two-Cyclic Matrix Equations with Special Applications to the Numerical Solution of the Second-Order Self-Adjoint Elliptic Partial Differential Equations in Two Dimensions. WAPD—TM—327 (1962).
29. Gelbard E. et al. Iterative Solutions to the P_L - and Double P_L - Equations. Nucl. Sci. Engng, 5, 1 (1959).
30. Anderson B. et al. FLIP, An IBM—704 Code to Solve the P_L - and Double P_L - Equations in Slab Geometry. WAPD—TM—134 (1959).
31. Schmidt E. A Stable Non-Iterative Solution to the Discrete Ordinate Equations. Trans. ANS, 6, 1 (1963).
32. Levin J. On the Matrix Ricatti Equation. Proc. Amer. Math. Soc., 10, 519 (1959).
33. Bellman R., Kalaba R. Transport Theory and Invariant Imbedding. Proc. Symp. in Appl. Math., 11 (1961). Amer. Math. Soc., Providence, R. I. p. 206.
34. Waldinger H. et al. Numerical Integration of the Spherical Harmonics Equations. Nucl. Sci. Engng, 18, 4 (1964).
35. Kaplan S., Gelbard E. Invariant Imbedding and the Integration Techniques of Reactor Theory. J. Math. Anal. Appl., 11, 1—3, 538 (1965).
36. Drawbaugh D., Noderer L. The Double Spherical Harmonics Method for Cylinders and Spheres. Nucl. Sci. Engng, 6, 1 (1959).
37. Sauer A. The Double Spherical Harmonics Method in Spherical Geometries. ORNL Central Files Number 58—1—29 (1958).
38. Newmarch D. Errors Due to the Cylindrical Cell Approximation in Lattice Calculations. AEEW—R34 (1960).
39. Rumyantsev G. Boundary Conditions in the Spherical Harmonic Method. J. Nucl. Energy. Parts A/B, 16, 111 (1962).
40. Honeck H. The Calculation of Thermal Utilization and Disadvantage Factors in Uranium/Water Lattices. Nucl. Sci. Engng, 18, 1 (1964).
41. Bennett J. Accelerating Convergence of Discrete Ordinates Method. Nucl. Sci. Engng, 19, 2 (1964).
42. Lois L. Numerical Solution of the One Velocity Boltzmann Neutron Transport Equation in Slab Geometry. Columbia University, 1966.
43. Fadeeva V. Computational Methods of Linear Algebra, Dover, 1959. (См. на русском языке: Фадеев Д. К., Фадеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.—Л., Физматгиз, 1963.)
44. Pitterle T., Maynard C. Bilinear Averaging for Diffusion Theory Parameters. Trans. ANS, 8, 1 (1965).
45. Gelbard E. et al. TRIP—1, A Two-Dimensional P—3 Program in X—Y Geometry for the IBM—704. WAPD—TM—217 (1960).
46. Gelbard E. Simplified Spherical Harmonics Equations and Their Use in Shielding Problems. WAPD—T—1182 (Rev. 1) (1961).

47. B o h l H., Jr. et al. P3MG1, A One-Dimensional Multigroup P—3 Program for the Philco—2000 Computer. WAPD—TM—272 (1963).
48. J o a n o u G., D u d e k J. GAM—1: A Consistent P 1 Multigroup Code for the Calculation of Fast Neutron Spectra and Multigroup Constants. GA—1850 (1961).
49. C e r t a i n e J. A Solution of the Neutron Transport Equation. Part II, NYO—6268 (1955).
50. G a s t R. P—9 Multigroup Method for Solution of the Transport Equation in Slab Geometry. WAPD—232 (1960).
51. B o h l H. et al. MUFT — 4, Fast Neutron Spectrum Code for the IBM — 704. WAPD—TM—72 (1957).
52. O m b r e l l a r o P., v o n H e r r m a n n P. A Method of Averaging Diffusion Coefficients. Trans. ANS, 7, 2 (1962).
53. S c h m i d t E., G e l b a r d E. M. A Double P_N Method for Spheres and Cylinders. Trans. ANS, 9, 2 (1966).
54. W a n g C. C., M a y n a r d C. W. The Double Spherical Harmonics Approximation for Cylindrical Geometry. Trans. ANS, 10, 2 (1967).
55. W a n g C. C. The Double Spherical Harmonics Approximation for Cylindrical and Spherical Geometries. Doctoral Dissertation, Univ. of Wisconsin (1967).

МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО В ПРИМЕНЕНИИ К РЕШЕНИЮ РЕАКТОРНЫХ ЗАДАЧ

М. Калос, Ф. Накач, Дж. Селник

(Объединенная корпорация по ядерным исследованиям.
Исследовательский и инженерный центр Элмсфорд, Нью-Йорк)

§ 5.1. ВВЕДЕНИЕ

Методы Монте-Карло представляют собой численные методы, в которых в качестве переменных фигурируют случайные величины. В принципе присутствие элемента случайности является, как это не удивительно, достоинством таких методов в силу двух возможных причин. Во-первых, многие процессы в природе имеют существенно стохастический характер, и поэтому допускают своего рода численное моделирование. Во-вторых, известны определенные математические задачи (например, оценка кратных интегралов или решение линейных интегральных уравнений в пространстве многих переменных), в применении к которым методы Монте-Карло оказываются весьма эффективными с вычислительной точки зрения.

Применимость методов Монте-Карло к решению реакторных задач обусловлена обеими указанными причинами. С одной стороны, процессы взаимодействия любого излучения с веществом подчиняются статистическим закономерностям. Следовательно, проблему можно свести просто к статистическому моделированию существенно случайных величин и к наблюдению за поведением воображаемых нейтронов или фотонов. С другой стороны, подобный подход можно рассматривать как некоторый численный метод решения транспортного линейного уравнения Больцмана. Последнее обстоятельство позволяет выбрать наиболее существенные в данной ситуации случайные процессы, отбросив все второстепенные.

Основным недостатком методов Монте-Карло является статистический характер получаемых результатов. Другими словами, разность между любым найденным результатом и соответствующим ему истинным значением есть случайная величина. В какой-то степени такой недостаток присущ всем численным методам, поскольку ошибки округления и обрезания всегда имеют псевдослучайную природу. Правда, методы Монте-Карло позволяют оценить ошибки и установить их достоверные пределы. Однако это не снимает проблемы, так как во многих задачах, например при расчете защиты, возникают серьезные практические трудности. Дело в том, что величина статистической ошибки, грубо говоря, обратно пропорциональна корню квадратному из числа моделируемых частиц, достигающих той области фазового пространства, где они могут дать вклад в искомый результат. В задачах же, связанных с переносом излучения через толстые слои вещества защиты, число моделируемых частиц, разумеется, мало и, следовательно, велика относительная статистическая ошибка.

Аналогичные осложнения возникают и при расчете методом Монте-Карло полного дифференциального углового энергетического спектра отраженного или прошедшего через вещество излучения. Если число независимых ячеек достаточно велико, то принципиально задача разрешима. Однако для получения результатов с разумной статистической точностью в каждой ячейке требуется очень много машинного времени.

Вообще говоря, методы Монте-Карло эффективны (они могут быть сделаны таковыми), если число искомых величин мало.

Настоящая глава посвящена изложению методов Монте-Карло в применении их к различным аспектам физических расчетов ядерных реакторов. В част-

ности, затрагиваются вопросы расчета защиты и вычисления реактивности. В связи с этим следует отметить, что существует несколько способов классификации задач в свете решения их методами Монте-Карло. Например, во многих задачах задается источник излучения, а вычислению подлежит некоторая величина, которая зависит от поля излучения, создаваемого источником. Все проблемы расчета защиты реакторов относятся именно к этому классу задач. Второй характерный класс задач — задачи, в которых ни распределение, ни мощность источников заранее не известны. Вычисление реактивности, т. е. степени отклонения конкретной системы от критичности, — типичная задача подобного рода.

В последнем случае наиболее важный этап расчета — определение источников, соответствующих условиям равновесия. После завершения первой стадии вычислений задача сводится к уже известной с заданными источниками.

§ 5.2. АНАЛОГОВЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Полезной иллюстрацией метода Монте-Карло может служить известная всем аналоговая процедура*. Для получения наглядной картины необходимо проследить за наиболее существенными стохастическими процессами, влияющими на историю нейтрона или γ -кванта при распространении их в веществе.

5.2.1 Источник. Рассмотрим сначала случай, когда источник конкретизирован. Это означает, что заданы пространственное, угловое и энергетическое распределения источника излучения. Типичные источники γ -излучения могут быть точечными изотропными и моноэнергетическими, изотропными в пространстве с энергетическим спектром, изменяющимся во времени, и т. п. Поскольку задача линейна, без потери общности можно считать мощность источника нормированной на единицу.

«История», моделирующая поведение такого поля излучения, начинается с выбора численных значений соответствующих физических величин с использованием функции плотности вероятности, равной плотности источников. (В Приложении А дан обзор некоторых технических приемов такой процедуры.) Например, точечный изотропный моноэнергетический источник задается пространственными переменными x, y, z , т. е. координатами точечного источника, энергетической переменной, равной фиксированной энергии источника, и таким направляющим вектором (определяемым направляющими косинусами $\omega_x, \omega_y, \omega_z$), который характеризует изотропность источника. В общем случае может быть смоделировано любое необходимое распределение указанных переменных.

5.2.2. Процесс переноса. Нейтроны и γ -кванты, будучи электрически нейтральными, при распространении в веществе подвержены влиянию лишь короткодействующих сил. Поэтому после испускания из источника их траектории представляют собой ломаные линии, звенья которых суть прямолинейные отрезки переменной длины. Их величину и надо определить. Траектория нейтрона или фотона определяется многочисленными случайными событиями в результате столкновения с атомами. Однако в большинстве практических случаев можно произвести усреднение по всем случайным переменным, за исключением расстояния s . Тогда функция плотности вероятности (ФПВ) будет иметь вид

$$T(s) = \mu(s) \exp \left[- \int_0^s \mu(s') ds' \right], \quad (5.1)$$

где $\mu(s)$ — макроскопический коэффициент ослабления, зависящий как от энергии и вида излучения, так и от природы среды. Интеграл в показателе экспоненты — криволинейный интеграл, который вычисляется вдоль прямолинейного отрезка, начинающегося в точке испускания излучения и имеющего направляющие косинусы $\omega_x, \omega_y, \omega_z$.

* См. также дополнительную литературу [1—11].

Забегая вперед, укажем способ выбора s . Пусть λ определяется функцией плотности вероятности $e^{-\lambda}$. Тогда, если s — решение уравнения

$$\lambda = \int_0^s \mu(s') ds', \quad (5.2)$$

то s имеет требуемую функцию распределения (5.1).

5.2.3 Геометрия. Предположим, что среда неоднородна. Тогда возникают трудности, сопряженные с решением уравнения (5.2) относительно расстояния s . Если среда кусочно-однородна, то решение уравнения (5.2) сводится к нахождению отрезков пути пробега s_1, s_2, \dots, s_n , лежащих в соответствующих областях. Пусть

$$\sum_{j=1}^{n-1} \mu_j s_j \leq \lambda < \sum_{j=1}^n \mu_j s_j.$$

Тогда пробег оканчивается в n -й области на расстоянии

$$s_n' = \frac{1}{\mu_n} \left(\lambda - \sum_{j=1}^{n-1} \mu_j s_j \right)$$

от точки входа в эту область.

Расстояние s_n' определяется точками пересечения прямой линии (см. рис. 5.1)

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \Omega s'$$

с поверхностью $f_n(x, y, z)$, являющейся границей n -й области. Если $f_n(x, y, z)$ — поверхность 2-го порядка, то s можно вычислить непосредственно. Если же границы областей состоят из кусков различных поверхностей, расчеты значительно усложняются, так как истинные точки пересечения должны удовлетворять некоторым неравенствам (см. приложение Б).

Существуют различные программы, с помощью которых выполняются расчеты для сложных геометрий [12, 13].

5.2.4. Столкновения. В предыдущих разделах мы говорили об эмиссии частицы из источника и о ее прямолинейном движении непосредственно после вылета из источника. В конце своего прямолинейного пути частица может оказаться вне рассматриваемой конфигурации, и тогда ее история будет завершена. Если же частица останется внутри системы, она, как всякая реальная частица, должна будет испытать разного рода столкновения.

Анализ характера этих столкновений требует знания ядерной физики. Читателям, интересующимся данным вопросом, можно рекомендовать соответствующую литературу [14, 15]. Отметим лишь, что частица имеет вероятность после столкновения поглотиться, рассеяться или размножиться. Каждый из указанных процессов характеризуется определенным сечением, которое является функцией энергии излучения и изменяется от ядра к ядру. Если известно, что столкновение произошло, то относительная вероятность конкретного вида взаимодействия излучения с конкретным атомом пропорциональна сечению данного взаимодействия с данным атомом. Пусть $\sigma_{iA}(E)$ — сечение реакции i на ядре A . Тогда относительная вероятность реакции i на ядре A равна

$$p_{iA} = \frac{N_A \sigma_{iA}}{\sum_{j \in B} N_B \sigma_{jB}}.$$

При статистическом моделировании i и A можно выбирать наудачу, используя эти вероятности.

Если осуществится реакция поглощения, то излучение исчезнет и его история прекратится. Возможна также альтернатива рассеяния. Число рассеянных частиц, их энергию и направление следует выбирать на основе нормированной

функции распределения вероятностей, полученной из соответствующих спектров.

События (все, кроме поглощения) типа i , происходящие в результате взаимодействия с элементом A , описываются ядрами

$$C_{iA} = (E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega).$$

Ядра характеризуют вероятность того, что частица после столкновения имеет энергию E (в единичном интервале) и движется в направлении Ω (в единичном телесном угле) при условии, что до столкновения она обладала энергией E' и двигалась в направлении Ω' . Например, рассеяние нейтрона на свободном протоне описывается ядром

$$C_H(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) = \begin{cases} 2\Omega \cdot \Omega' \delta[E - E' (\Omega \cdot \Omega')^2], & \Omega \cdot \Omega' \geq 0, \\ 0, & \Omega \cdot \Omega' < 0. \end{cases}$$

В дальнейшем рассмотрении мы будем пользоваться суперпозицией всех ядер

$$C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r) = \sum_{i, A} N_A(r) \sigma_{iA}(E') C_{iA}(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) / \mu(E', r),$$

где

$$\mu(E', r) = \sum_{i, A} N_A(r) \sigma_{iA}(E').$$

Частица, испытавшая соударение, идентична с точки зрения производимых ею эффектов частице источника, имеющей такие же координаты. Поэтому путь частицы после столкновения можно проследить уже описанными способами (см. разд. 5.2.2 и 5.2.3). Чередование соударений и свободных пробегов будет продолжаться до тех пор, пока частица не поглотится или не покинет системы, после чего ее история завершится.

5.2.5. Счет событий. Повторение всего процесса с момента рождения частицы и до момента ее гибели обеспечивает достаточно большое число представительных моделированных событий, на основании которых можно получить решение физической задачи. Среднее число историй, оканчивающихся утечкой частицы, характеризует вероятность утечки. Энергия, потерянная при соударении или выделившаяся в результате поглощения, усредненная по всем историям, является мерой теплового эффекта излучения. Аналогичным образом можно найти статистическую оценку любой измеримой величины.

5.2.6. Временная зависимость. При непосредственном моделировании свободных пробегов и столкновений нетрудно вычислить скорость частицы как функцию энергии (для частиц с ненулевой массой покоя). При моделировании можно учесть также временную зависимость источника, введя, если необходимо, случайную величину, моделирующую время. Следовательно, разрешима любая задача, в которой необходимо принимать во внимание временную зависимость различных величин.

Обычно при решении большинства задач временную зависимость игнорируют. Однако ее можно восстановить, если связать с источником и с процессом свободного пробега соответствующие задержки.

5.2.7. Неаналоговый подход. Полезно проанализировать процессы, описанные в предыдущих разделах, более формально. Пусть $\chi(r, E, \Omega)$ — средняя плотность столкновений частиц в точке (r, E, Ω) фазового пространства. Функция $\chi(r, E, \Omega)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\chi(r, E, \Omega) = S(r, E, \Omega) + \int K(r', E', \Omega'; r, E, \Omega) \chi(r', E', \Omega) dr' dE' d\Omega', \quad (5.3)$$

где $K(r', E', \Omega'; r, E, \Omega)$ характеризует вероятность того, что частица, находящаяся до соударения в единичной окрестности точки (r', E', Ω') фазового пространства, попадает после соударения в единичную окрестность точки (r, E, Ω) .

Ядро K есть произведение ядра T , описывающего свободный пробег (см. разд. 5.2.3), и ядра C , описывающего соударения (см. разд. 5.2.4).

Воспользуемся некоторыми результатами теории вероятностей. Пусть $f(P)$ — функция случайной величины P , имеющей плотность вероятности $\chi(P)$. Предположим, что P_1, P_2, \dots, P_N — выборка из независимых наблюдений случайной величины P . Построим по данной выборке среднее арифметическое функции $f(P)$:

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(P_i). \quad (5.4)$$

Известно, что при бесконечном возрастании N написанная сумма сходится по вероятности к интегралу

$$\bar{f} = \int \chi(P) f(P) dP. \quad (5.5)$$

Вернемся теперь к нашей задаче. Если в качестве случайной величины P взять совокупность (\mathbf{r}, E, Ω) , то только что описанная процедура будет в точности соответствовать расчету по методу Монте-Карло: процесс моделирования истории порождает функцию плотности вероятности χ , а процесс счета событий дает оценку \bar{f} .

Таким способом можно получить численные результаты, отвечающие событиям, которые происходят очень редко или не происходят вообще. Нужно только, чтобы эти результаты допускали запись в виде (5.5) (или в какой-либо эквивалентной форме, включающей плотность соударяющихся частиц). Так, вероятность утечки без дальнейших соударений после вылета из источника или после очередного столкновения равна $\exp \left[-\int_0^{\infty} \mu(s) ds \right]$. Полная вероятность утечки есть сумма p_i для всех столкновений, усредненная по всем возможным столкновениям:

$$p_i = \int \chi(\mathbf{r}, E, \Omega) \exp \left[-\int_0^{\infty} \mu(s) ds \right] d\mathbf{r} dE d\Omega.$$

Метод Монте-Карло обеспечивает оценку экспоненты для каждого столкновения.

Приведем еще один пример. Рассмотрим величину

$$\exp \left[-\int_0^{s_i} \mu(s) ds \right] - \exp \left[-\int_0^{s_{i+1}} \mu(s) ds \right],$$

где s_i — расстояние до входа в конкретную область; s_{i+1} — расстояние до выхода из этой области. Написанная величина есть математическое ожидание числа столкновений в указанной области. С ее помощью можно оценить поток.

Обсуждение более общих методов продолжается в § 5.5.

Надежда на улучшение точности при учете всех столкновений в некоторых случаях может оказаться иллюзией. В частности, это относится к задачам, связанным с переносом излучения на большие расстояния в глубь вещества. Вблизи внешней границы число соударений весьма мало или вообще равно нулю. Тем не менее описанные методы позволяют рассчитать утечку. Однако результаты получаются неправильными. Дело в том, что интеграл $\int \mu(s) ds$ велик и, следовательно, соответствующая экспонента мала. Поэтому даже очень большое число наблюдений малых результатов даст в итоге величину, которая будет мала по сравнению с истинной, определяемой лишь небольшим числом соударений, происходящих вблизи внешней границы.

5.2.8 Проблема собственных значений. Многие задачи реакторной физики связаны с вычислением равновесного распределения потока нейтронов (собственного распределения). В таких задачах в отличие от рассмотренных выше об источнике ничего заранее не известно. К счастью, равновесное распределение устанавливается лишь через много «поколений». Поколение характеризуется

временем жизни популяции нейтронов от момента деления ядра до момента поглощения с последующим делением. Поэтому можно в основу расчета положить любое произвольное пространственное и энергетическое распределение нейтронов и проследить за популяцией таких нейтронов вплоть до полного их поглощения или утечки из системы. В общих чертах процедура подобного наблюдения изложена в предыдущих разделах.

На протяжении истории поколения нейтронов может произойти событие, идентифицируемое как деление. Для каждого такого события с помощью соответствующих распределений вероятности следует вычислить число нейтронов деления, их энергию и направление. Множество всех найденных случайных величин будет служить источником для следующего поколения. Указанную процедуру продолжают до тех пор, пока не установится стационарное распределение. По достижении равновесия можно дополнительно смоделировать процесс переноса нейтронов для определения интересующего параметра, например, реактивности.

Время, необходимое для достижения стационарного распределения нейтронов, классифицируют как время работы вычислительной машины вхолостую, или мертвое время. Способы снижения этого мертвого времени представляют сами по себе специальную проблему вычисления собственных значений. Они рассмотрены в разд. 5.7.3. Подобный недостаток в какой-то степени присущ всем методам расчета реактивности. Но поскольку вычисления методом Монте-Карло требуют особенно много времени, желательно свести к минимуму предварительные расчеты.

За исключением отмеченной особенности, общие проблемы уменьшения дисперсии по существу одни и те же как в собственно реакторных задачах, так и в задачах расчета защиты, хотя многие конкретные детали различны (например, статистические ошибки в первом случае должны удовлетворять более жестким требованиям).

§ 5.3. ВЫБОРКА ПО ВАЖНОСТИ

Многие задачи переноса излучения сводятся к нахождению величины

$$\langle f \rangle = \int f(P) \chi(P) dP, \quad (5.6)$$

где $f(P)$ — «вклад» частицы в точке P фазового пространства; $\chi(P)$ — плотность столкновений частиц в точке P . Вычисления методом Монте-Карло включают счет $f(P)$ для каждой частицы, попавшей после столкновения в точку P . Согласно центральной предельной теореме, при достаточно большом числе выбранных частиц выборочное среднее значение будет аппроксимировать величину $\langle f \rangle$.

В данном параграфе мы рассмотрим методы, с помощью которых удастся путем видоизменения ядра добиться большей эффективности счета. Все они сводятся к попыткам максимизировать произведение $f(P)\chi(P)$. Будем вести выборку таким образом, чтобы число частиц, поступающих в любую область, было пропорционально «значимости» этой области. Тогда на каждом шаге аналоговой игры придется принимать новое решение, чтобы усилить роль тех точек фазового пространства, ожидаемый вклад которых в искомую величину $\langle f \rangle$ максимален. Можно показать, что принцип выборки по важности позволяет проводить вычисления методом Монте-Карло с нулевой дисперсией. Правда, на практике невозможно реализовать такой метод, который обеспечивал бы контроль эффективности вычислений.

Запишем интегральное транспортное уравнение Больцмана для плотности столкновений частиц $\chi(P)$ в точке P фазового пространства:

$$\chi(P) = \int K(P' \rightarrow P) \chi(P') dP' + S(P). \quad (5.7)$$

Здесь $K(P' \rightarrow P)dP'$ характеризует вероятность того, что частица попадет после соударения в единичную окрестность точки P фазового пространства при условии, что до соударения частица находилась внутри элементарного объема dP' около точки P' ; $S(P)$ — плотность распределения источников. Уравнение (5.7) можно преобразовать к новому виду с помощью произвольной положительной функции $I(P)$, являющейся мерой «ценности» частицы в точке P .

Умножим обе части уравнения (5.7) на величину

$$I(P) / \int I(P') S(P') dP'$$

и положим по определению

$$\tilde{\chi}(P) = \chi(P) I(P) / \int I(P') S(P') dP'. \quad (5.8)$$

Тогда уравнение (5.7) примет вид

$$\tilde{\chi}(P) = \int \tilde{K}(P' \rightarrow P) \tilde{\chi}(P') dP' + \tilde{S}(P), \quad (5.9)$$

где новое ядро \tilde{K} дается выражением

$$\tilde{K}(P' \rightarrow P) = \frac{I(P)}{I(P')} K(P' \rightarrow P), \quad (5.10)$$

а новая нормированная функция распределения источников удовлетворяет соотношению

$$\tilde{S}(P) = \frac{I(P) S(P)}{\int I(P') S(P') dP'} = \frac{I(P) S(P)}{S_0}. \quad (5.11)$$

Подставляя из (5.8) выражение для функции $\chi(P)$ в соотношение (5.6), получаем

$$\langle f \rangle = S_0 \int \frac{f(P)}{I(P)} \tilde{\chi}(P) dP. \quad (5.12)$$

Чтобы решить уравнение (5.12) методом Монте-Карло, необходимо в каждой точке, в которой происходят столкновения, найти плотность столкновений с помощью функции $\chi(P)$ и подсчитать величину $f(P)/I(P)$. После вычисления соответствующего интеграла результат следует умножить на нормировочный коэффициент S_0 .

Попробуем установить вид функции $I(P)$, отвечающий наибольшей эффективности метода. Заметим, что согласно соотношениям (5.10) и (5.11) функция $I(P)$ вызывает смещение заданной функции источника S и ядра K . Введение функции ценности преследует цель реализации такой стратегии игры, при которой осуществляется наблюдение за частицами в точках фазового пространства, дающих наибольший вклад в окончательный ответ. Поэтому функция $I(P)$ должна быть тесно связана с предполагаемым вкладом частицы, наблюдаемой непосредственно после столкновения в единичной окрестности точки P фазового пространства. Пусть $J(P)$ характеризует вклад частицы, оказавшейся в конце акта данного столкновения в точке P и испытавшей затем еще ряд последовательных соударений вплоть до поглощения или утечки из системы.

Функция $J(P)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$J(P) = f(P) + \int K(P \rightarrow P') J(P') dP', \quad (5.13)$$

где первый член в правой части характеризует вклад частицы в рассматриваемый эффект в результате данного столкновения, а второй член — вклад в результате всех последующих столкновений. Формальное уравнение (5.13) совпадает с уравнением (5.7). Единственное отличие состоит в том, что в (5.13) интегрирование распространяется на все последующие столкновения по отношению к данному, а в (5.7) — на все предыдущие. Поскольку оба ядра характеризуют процесс переноса частицы между точками P и P' , ядро $K(P \rightarrow P')$ можно рас-

смаивать как транспонированное, или сопряженное, по отношению к ядру $K(P' \rightarrow P)$. Следовательно, уравнение (5.13) будет сопряженным по отношению к уравнению (5.7).

Покажем теперь, что функция «ценности», определенная либо как полный вклад частицы, либо как решение сопряженного уравнения, может быть использована для вычислений методом Монте-Карло с нулевой дисперсией. Пусть $N(P')$ — общее число частиц, попавших после рассеяния частицы в точке P' в единичную окрестность любой точки фазового пространства* при условии, что после предыдущего соударения каждая из указанных частиц рассеялась в единичную окрестность точки P' , т. е.

$$N(P') = \int K(P' \rightarrow P) dP. \quad (5.14)$$

В видоизмененной игре соответствующая величина равна

$$\tilde{N}(P') = \int \tilde{K}(P' \rightarrow P) dP. \quad (5.15)$$

Используя в качестве функции ценности $J(P)$ и подставляя выражение (5.10) для $\tilde{K}(P' \rightarrow P)$ в соотношение (5.15), получаем

$$\tilde{N}(P') = \frac{1}{J(P')} \int K(P' \rightarrow P) J(P) dP.$$

Окончательно после подстановки в последнее равенство величины $\int K(P' \rightarrow P) J(P) dP$, найденной из соотношения (5.13), будем иметь

$$\tilde{N}(P') = 1 - f(P')/J(P'). \quad (5.16)$$

Вычислению методом Монте-Карло подлежит интеграл (5.6), который может быть переписан в виде

$$\langle f \rangle = \int \frac{f(P) \chi(P)}{p_A(P)} p_A(P) dP, \quad (5.17)$$

где $p_A(P)$ — вероятность поглощения в точке P . Для игры с измененной стратегией в силу соотношения (5.16)

$$p_A(P) = f(P)/J(P). \quad (5.18)$$

Подставив выражение (5.18) для $p_A(P)$ и выражение (5.8) для $\chi(P)$ в соотношение (5.17), перепишем нужный нам интеграл в следующем виде:

$$\langle f \rangle = S_0 \int \left[\frac{f(P)/J(P)}{f(P)/J(P)} \right] \tilde{\chi}(P) \frac{f(P)}{J(P)} dP.$$

В игре, соответствующей написанному выше интегралу, каждая поглощенная или ушедшая из системы частица получает «очко» с вероятностью $f(P)/J(P)$. Общее число очков затем умножается на нормировочный коэффициент S_0 . Таким образом, если результат разделить на полное число прослеженных историй, то, поскольку каждая частица дает один и тот же вклад, мы получим S_0 с нулевой дисперсией. Это и не удивительно, так как при $I(P) = J(P)$ в силу (5.11)

$$S_0 = \int J(P) S(P) dP.$$

Последнее равенство показывает, что S_0 есть ожидаемый вклад каждой частицы источника, проинтегрированный по всему фазовому пространству.

* Поскольку точка P фазового пространства характеризуется набором переменных (r, E, Ω) , выражение «частица рассеялась в единичную окрестность точки P » означает, что в единичном объеме около точки r обычного пространства частица испытала рассеивающее соударение, в результате которого она имеет энергию E (в единичном интервале) и движется в единичном телесном угле около направления Ω . — Прим. перев.

Проведенное рассмотрение иллюстрирует способ изменения игры для получения нужного результата с нулевой дисперсией. Практически, однако, дело обстоит несколько иначе. Для определения правильного значения нормировочного коэффициента необходимо знать функцию $J(P)$ в каждой точке фазового пространства. Но если бы функция $J(P)$ была известна, интеграл

$$\langle f \rangle = \int J(P) S(P) dP = \int f(P) \chi(P) dP \quad (5.19)$$

допускал бы вычисление в квадратурах. В действительности дисперсия положительна. Поэтому задача сводится к выбору такой функции $I(P)$, которая бы, надлежащим образом аппроксимируя $J(P)$, позволяла выполнять вычисления с весьма малой дисперсией. Очень часто выбор функции $I(P)$ диктуется самим физическим смыслом функции $J(P)$.

Существует еще одна трудность, препятствующая эффективному использованию функции ценности. Предположим, что известна идеальная функция ценности $J(P)$. Тогда можно оценить интеграл (5.15). Но для $I(P) \approx J(P)$ не всегда удается найти этот интеграл в замкнутой форме. Подобную трудность можно обойти двумя способами. Первый из них — наиболее очевидный — выбор функции $I(P)$, допускающей вычисление интеграла (5.15). В качестве такой функции удобно воспользоваться некоторой экспоненциальной зависимостью (см. обсуждение ниже).

Другой возможный способ — образовать ядро $K'(P' \rightarrow P)$, подобное ядру $\tilde{K}(P' \rightarrow P)$, и, оценив величину

$$N' = \tilde{K}(P' \rightarrow P) / K'(P' \rightarrow P),$$

найти число частиц, рассеявшихся в точку P фазового пространства. Подобное обобщение обычного расщепления и игры в рулетку можно, в свою очередь, реализовать несколькими путями. Если положить $K' = K$, процедура сведется просто к наблюдению за несмещенной траекторией частиц от соударения до соударения и к вычислению для каждой из частиц, попавшей непосредственно после соударения в точку P фазового пространства, величины $I(P)/I(P')$. Это наиболее непосредственный способ, страдающий, однако, тем недостатком, что важные области фазового пространства будут затрагиваться не часто. Следовательно, образование большого числа частиц будет весьма редким событием. Разумеется, такая процедура должна характеризоваться большой дисперсией.

Метод вычисления, в котором предпринята попытка аппроксимировать достаточно точно функцию K , описан в работе [16]. Стоит, по-видимому, отметить, что указанный там метод позволяет вычислять поток излучения на весьма больших глубинах проникновения — вплоть до 170 длин свободного пробега. Правда, рассмотрение проводилось для водородсодержащей среды с явным использованием аналитических свойств ядра рассеяния на водороде. Поэтому конкретные тонкости метода не могут представлять широкого интереса. Более общий (хотя и не так детально развитый) метод, основанный на принципе выборки по важности изложен применительно к проблемам защиты в следующем разделе.

§ 5.4. ВЫБОРКА ПО ВАЖНОСТИ В ЗАДАЧАХ, СВЯЗАННЫХ С ПЕРЕНОСОМ ИЗЛУЧЕНИЯ В ЗАЩИТЕ

Для иллюстрации общей идеи выборки по важности в проблеме переноса излучения будем проводить рассмотрение в сферической геометрии. В силу этого предположим, что среда разделена на конечное число концентрических сферических поясов, в каждом из которых свойства среды постоянны. Границы сферических поясов обозначим r_0, r_1, \dots, r_l . Пусть далее интересующий нас энергетический интервал разбит на группы с границами E_0, E_1, \dots, E_J . Для

частицы, обладающей энергией E из j -го энергетического интервала и находящейся в i -м сферическом слое, выполняются неравенства

$$E_0 \leq E_{j-1} \leq E < E_j \leq E_j, \\ 0 \equiv r_0 \leq r_{i-1} \leq r < r_i \leq r_i.$$

Если ставится задача наблюдения частиц на больших глубинах, желательно выбрать функцию ценности так, чтобы она отражала роль слоев, удаленных на большое расстояние от центра. Поскольку с увеличением радиуса r поток излучения уменьшается по экспоненциальному закону, попытаемся задать функцию ценности в виде

$$I = e^{\mu_0 r}.$$

Будем для общности считать, что параметр μ_0 зависит от номера энергетической группы j и номера сферического слоя i . Иными словами, будем задавать функцию ценности кусочно-экспоненциальной зависимостью вида

$$I(r, E) = \exp \left[\mu_{ii}(r - r_{i-1}) - \sum_{k=i}^j \mu_{kj}(r_k - r_{k-1}) \right]. \quad (5.20)$$

Функция I нормирована таким образом, что $I(r_i, E) = 1$. Это соответствует ситуации, в которой частицы всех энергий дают вклад в утечку.

Для осуществления выборки расщепим ядро $K(P' \rightarrow P)$ на ядро «переноса» (транспортное ядро) и ядро «столкновений»:

$$K(P' \rightarrow P) = T(r' \rightarrow r | E', \Omega') C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r). \quad (5.21)$$

Здесь $T(r' \rightarrow r | E', \Omega')$ характеризует вероятность того, что частица, испытав соударение в точке r' и имея после этого энергию E' и направление Ω' , испытывает следующее соударение в точке r ; $C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r)$ характеризует вероятность того, что частица после соударения в точке r имеет энергию E и движется в направлении Ω при условии, что до соударения она имела энергию E' и двигалась в направлении Ω' .

Ядро переноса можно записать как функцию распределения вероятностей для расстояния s между двумя последовательными столкновениями*:

$$T(s | E') = \mu_m(E') \exp \left[- \sum_{k=1}^m s_k \mu_k(E') \right], \quad (5.22)$$

где $\mu_m(E')$ — коэффициент ослабления в слое m для частиц с энергией E (номера слоев отсчитываются в порядке попадания в них частицы в процессе блуждания). Полное расстояние, пройденное частицей между двумя последовательными столкновениями, есть $s = \sum_{k=1}^m s_k$, где s_k — отрезок пролетного расстояния в k -м слое.

Ядро $\tilde{K}(P' \rightarrow P)$ всегда можно преобразовать следующим образом:

$$\tilde{K}(P' \rightarrow P) \equiv \frac{I(r, E)}{I(r', E')} T(r' \rightarrow r | E', \Omega') C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r) = \\ = \left[\frac{I(r, E')}{I(r', E')} T(r' \rightarrow r | E', \Omega') \right] \left[\frac{I(r, E)}{I(r, E')} C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r) \right] = \tilde{T} \tilde{C}. \quad (5.23)$$

Первый член в правой части равенства (5.23) играет роль модифицированного ядра переноса, второй член — роль модифицированного ядра столкновения. Можно учесть также угловое распределение величины I , включая соответствующую зависимость в ядро C или вводя некоторый угловой фактор.

* Частицы источника эквивалентны частицам, претерпевающим столкновения.

Займемся сначала рассмотрением ядра \tilde{T} . Для частицы, свободный пробег которой начинается в области i' , а заканчивается в области i (которой принадлежит m -й отрезок пробега), ядро \tilde{T} дается выражением

$$\tilde{T}(s, E') = \mu_i(E') \exp \left[- \sum_{k=1}^m s_k \mu_k(E') + \mu_{ij}(r - r_{i-1}) - \mu_{i'j'}(r' - r_{i'-1}) + \sum_{l=i'}^{i-1} \mu_{lj}(r_l - r_{l-1}) \right] \equiv \mu_i(E') \exp[-\Lambda(s)]. \quad (5.24)$$

Чтобы воспользоваться полученным соотношением, необходимо найти процедуру выборки, приводящую к ядру \tilde{T} . Одна из возможностей — проследить историю частицы от точки \mathbf{r}' до точки \mathbf{r} , оперируя недеформированным (несмещенным) ядром \tilde{T} , и рассчитать среднее число частиц $I(\mathbf{r})/I(\mathbf{r}')$, испытавших рассеяние в точке \mathbf{r} . Такой метод реализуется достаточно просто. Однако он страдает одним весьма серьезным недостатком: когда частица движется в радиальном направлении наружу, вероятность образования большого числа частиц с теми или иными параметрами мала; следовательно, возникает дополнительная дисперсия, связанная с процессом расщепления, и она может быть велика. Поэтому желательно иметь дело с ядром, в известном смысле наиболее хорошо аппроксимирующим \tilde{T} .

Оперировать с самим ядром \tilde{T} трудно (хотя бы потому, что оно не отнормировано точно на одну частицу, претерпевающую каждое следующее столкновение). Можно непосредственно пользоваться нормализованным ядром

$$T'(s|E') = \frac{d\Lambda(s)}{ds} \exp[-\Lambda(s)]. \quad (5.25)$$

Величину $\Lambda(s)$ можно найти как решение уравнения

$$\int_s^{\infty} \Lambda(z) \exp[-\Lambda(z)] dz = \xi$$

или

$$\Lambda(s) = -\ln \xi, \quad (5.26)$$

где ξ — случайная величина, равномерно распределенная на интервале $(0, 1)$.

Процесс блуждания включает вычисление $-\ln \xi$ и последующее определение расстояния, на которое продвинется частица, пока сумма величин $[\mu_k(E')s_k - \mu_{ij}\Delta r_l]$ не превысит величины $\Lambda(s)$. Пусть λ — наименьшее положительное значение функции

$$\Lambda(s) - \sum_{k=1}^m \mu_k(E')s_k + \sum_{l=i'}^i \mu_{lj}\Delta r_l, \quad \Delta r_l = r_l - r'.$$

Другими словами, λ представляет собой дополнительную длину среднего свободного пробега, которая подлежит вычислению в конечном сегменте.

Соотношение между дополнительным расстоянием, которое должна пройти частица в области i , и соответствующими радиус-векторами иллюстрируется рис. 5.1. Итак,

$$\lambda = \mu_i(E')s' - \mu_{ij}[(r_{i-1}^2 + s'^2 + 2\omega' r_{i-1} s')^{1/2} - r_{i-1}]. \quad (5.27)$$

Решая уравнение (5.27) относительно s' , получаем

$$s' = \frac{\mu\lambda + \mu_{ij}^2 \rho - \mu_{ij} r_{i-1} + \mu_{ij} [(\mu_{i-1} - \mu_{ij} \rho)^2 + 2\lambda(\mu\rho - \mu_{ij} r_{i-1}) + \lambda^2]^{1/2}}{\mu^2 - \mu_{ij}^2}, \quad (5.28)$$

где $\mu = \mu_i(E')$, $\rho = \omega' r_{i-1}$.

Мы предполагали, что $\mu > \mu_{ij}$. Подобное ограничение не является необходимым. Но чтобы от него избавиться, пришлось бы более детально кон-

кретизировать поведение функции ценности при больших r и более тщательно вычислять s при $\mu \approx \mu_{ij}$.

Если для определения s используется иное ядро, нежели \tilde{T} , следует позаботиться о том, чтобы в точке r испытывали рассеяние N_1 частиц, где

$$N_1 = \frac{\tilde{T}}{T'} = \mu_i(E') / \left. \frac{d\Lambda}{ds} \right|_r \quad (5.29)$$

или

$$N_1 = \frac{\mu_i(E')}{\mu_i(E') - \omega \mu_{ij}}. \quad (5.30)$$

Здесь ω — косинус угла между направлением полета частицы и радиус-вектором новой точки столкновения.

Из равенства (5.30) видно, что число частиц N_1 велико, когда $\mu - \omega \mu_{ij} \approx 0$. Чтобы обойти эту трудность, можно бы было ввести ограничение $\mu_{ij} < c\mu$ для каждой энергетической группы (c — некоторая константа). Для $c = 0,85$ число частиц, испытывающих следующее соударение рассеяния, не превышает семи.

До сих пор мы обсуждали влияние функции ценности исключительно на путь свободного пробега частицы. Но поскольку I зависит от энергии, эффект замедления также связан с функцией ценности, о чем и свидетельствует соотношение $\tilde{C} = [I(r, E)/I(r, E')]C$ в выражении (5.23).

Ввиду сложной формы ядра \tilde{C} , характеризующего процесс рассеяния нейтронов, во всех упоминаемых нами программах выбор ядра \tilde{C} сопровождался вычислением величины

$$N_2 = I(r, E)/I(r, E') \quad (5.31)$$

и выборкой с использованием исходного ядра C . N_2 можно интерпретировать как среднее число образующихся в результате столкновения частиц на каждую частицу, испытавшую соударение*. Разумеется, непосредственный выбор величины \tilde{C} кажется более эффективным. Однако N_2 весьма редко превышает единицу (а может быть и вообще не превышает). Точная функция ценности всегда содержит вклад от будущих столкновений [см. (5.13)]. Ценность быстрых нейтронов, которые поглощаются слабо, при соответствующих высоких энергиях не меньше по крайней мере ценности нейтронов при более низких энергиях, до которых замедляются нейтроны. Разумно предположить, что $I(r, E)$ является неубывающей функцией E^{**} . Если $N_2 \leq 1$, изложенный метод дает результаты, не включающие дополнительной дисперсии.

Рассмотренный метод оценки свободного пробега можно применить (хотя с некоторыми усложнениями) к задачам с плоской геометрией (например, к плоскому слою). Тогда ω будет обозначать косинус угла между направлением полета частицы и нормалью к поверхности плоского слоя. Очевидно, ω будет постоянным вдоль пути свободного полета.

* Если $N_2 < 1$, то N_2 можно трактовать как вероятность образования новой частицы; если $N_2 > 1$, можно выделить из N_2 целую и дробную части и интерпретировать N_2 как число идентичных частиц (целая часть) плюс одна частица, образующаяся с вероятностью, равной дробной части.

** Естественно, что подобное предположение неверно, если в процессе замедления имеет место захват нейтронов (например, в ядерных реакторах).

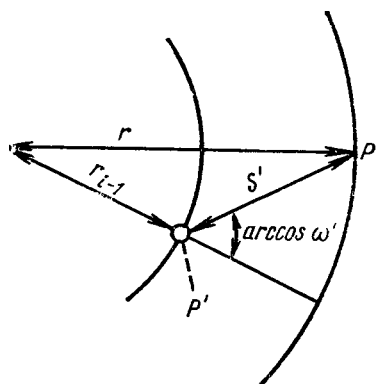


Рис. 5.1. К определению дополнительного пути свободного пробега.

Если для гомогенной среды функция ценности имеет вид

$$I(z) = \exp(\mu_j z), \quad (5.32)$$

то эффективное ядро переноса определяется равенством

$$\tilde{T} = \mu \exp[(\mu_j - \mu/\omega)z]. \quad (5.33)$$

Выборка, как и выше, осуществляется с ядром

$$T' = (\mu/\omega - \mu_j) \exp[(\mu_j - \mu/\omega)z], \quad (5.34)$$

которое по форме аналогично ядру (5.25). Кроме того, снова необходимо потребовать, чтобы выполнялось неравенство $\mu_j < \mu$. Правда, в задачах с плоской геометрией последнее требование безболезненно можно снять. Для этого следует положить $\tilde{\mu} = \mu/\omega - \mu_j$ и считать, что слой кончается при $z = Z$. Если выборку координаты каждого следующего соударения производить с помощью ядра

$$T''(z' \rightarrow z) = \frac{\mu \exp(-\tilde{\mu}z)}{1 - \exp[-\tilde{\mu}(Z - z')]}, \quad Z > z > z', \quad (5.35)$$

то реализация равенства $\tilde{\mu} = 0$ не будет представлять опасности. При $\tilde{\mu} = 0$ из соотношения (5.35) вытекает, что выбор точки z должен осуществляться с равной вероятностью по всему интервалу (z', Z) .

Равенство (5.35) можно обобщить следующим образом:

$$T'' = \frac{\beta \tilde{\mu} \exp(-\tilde{\mu}z)}{1 - \exp[-\tilde{\mu}(Z - z')]}, \quad Z > z > z';$$

$$T'' = (1 - \beta) \gamma \exp[-\gamma(Z - z)], \quad z > Z.$$

Написанное ядро отвечает столкновениям, которые с вероятностью $1 - \beta$ реализуются при $z > Z$ и которым соответствует эффективный коэффициент ослабления γ .

Возможность использования экспоненциального ядра в задачах на глубокое проникновение исследовалась несколькими авторами [17—23]. Были рассмотрены различные подходы к решению задач при условии $\mu_j < \mu$; в большинстве из них это требование выполнялось. Лаймдорфер проанализировал множество возможных вариантов, в том числе вариант с включением процесса «деления» [3, 18], допускающий неравенство $\mu_j > \mu$.

5.4.2 Деформация спектра источника. Концепция выборки по важности использовалась многими авторами для анализа интегрального уравнения Больцмана (5.7). Было показано, что в этом случае следует деформировать не только ядро переноса и ядро столкновения, но и исходную функцию распределения источников. Деформированная функция распределения источников дается соотношением (5.11):

$$\tilde{S}(P) = I(P) S(P) / \int I(P') S(P') dP'.$$

Предположим, что исходному источнику отвечает функция (рассмотрение ведется в сферически симметричной геометрии)

$$S(r, E, \Omega) = R(r) N(E), \quad (5.36)$$

где $R(r)$ — кусочно-постоянная функция r ; $N(E)$ — дифференциальный спектр нейтронов деления или какое-либо другое распределение. Пусть R_i — плотность источников (на единицу объема) в i -й области; \tilde{S}_{ij} — деформированная

функция источника, соответствующая i -й области и j -й энергетической группе, т. е.

$$\tilde{S}_{ij} = 4\pi \int d\Omega \int_{r_{i-1}}^{r_i} r^2 dr \int_{E_{j-1}}^{E_j} S(r, E, \Omega) dE \quad (5.37)$$

или

$$\tilde{S}_{ij} \propto Q_{ij} \equiv 4\pi \int_{r_{i-1}}^{r_i} r^2 dr R_i I(r, E_j) \int_{E_{j-1}}^{E_j} N(E) dE. \quad (5.38)$$

Далее

$$\int_{E_{j-1}}^{E_j} N(E) dE = F(E_{j-1}) - F(E_j), \quad (5.39)$$

где $F(E) = \int_E^{\infty} N(E) dE$, т. е. $F(E)$ — доля частиц источника, энергия которых больше или равна E .

Вспоминая, что I дается выражением (5.20), т. е.

$$I(r, E_j) = \exp \left[\mu_{ij}(r - r_{i-1}) - \sum_{k=i}^j \mu_{kj}(r_k - r_{k-1}) \right],$$

приходим к соотношению

$$Q_{ij} = 4\pi \frac{R_i}{\mu_{ij}^3} [F(E_{j-1}) - F(E_j)] \exp \left[- \sum_{k=i}^j \mu_{kj}(r_k - r_{k-1}) \right] \times \\ \times \{ [2 - 2\mu_{ij}r_i + (\mu_{ij}r_i)^2] \exp [\mu_{ij}(r_i - r_{i-1})] - [2 - 2\mu_{ij}r_{i-1} + (\mu_{ij}r_{i-1})^2] \}. \quad (5.40)$$

Окончательно имеем

$$\tilde{S}_{ij} = Q_{ij} / \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J Q_{ij}. \quad (5.41)$$

Теперь можно описать процедуру выборки для деформированного распределения источников \tilde{S} . Рассмотрим сначала пространственную область i . Введем обозначения

$$\tilde{S}_i = \sum_{k=1}^i \sum_{j=1}^J \tilde{S}_{kj}, \quad \tilde{S}_0 = 0. \quad (5.42)$$

Далее выберем случайную величину ξ , равномерно распределенную на интервале $(0, 1)$, и определим область i так, чтобы для нее выполнялись неравенства

$$\tilde{S}_{i-1} \leq \xi < \tilde{S}_i. \quad (5.43)$$

Чтобы локализовать исходную энергетическую группу j , найдем наименьшее число j , для которого имеет место соотношение

$$\xi > \tilde{S}_{i-1} + \sum_{l=1}^j \tilde{S}_{il}, \quad (5.44)$$

где ξ — выбранная ранее случайная величина. Для определения координаты r внутри i -й области воспользуемся функцией распределения вероятности

$$q_i(r) = \frac{r^2 \exp(\mu_{ij}r)}{\int_{r_{i-1}}^{r_i} r^2 \exp(\mu_{ij}r) dr}, \quad r_{i-1} \leq r < r_i. \quad (5.45)$$

Метод осуществления выборки с помощью подобной функции распределения описан ниже. Наконец, для выбора источника с энергией E , заключенной между граничными энергиями j -й энергетической группы ($E_{j-1} \leq E < E_j$), используем усеченный спектр деления.

При рассмотрении переноса вторичного излучения удобнее считать энергию излучения дискретной и решать соответствующие задачи, предполагая энергию в пределах данной группы постоянной. В последующем изложении мы будем, кроме того, предполагать, что плотность вторичных источников может быть представлена экспонентой. Тогда распределение исходных источников будет иметь вид

$$S_{ij} = C_i \exp(-a_i r) \delta(E - E_j), \quad r_{i-1} \leq r < r_i, \quad (5.46)$$

где E_j — энергия излучения источника.

С учетом функции ценности (5.20) деформированное распределение источников запишется с помощью следующего соотношения:

$$\tilde{S}_{ij} = C_i \delta(E - E_j) \exp \left[-a_i r_{i-1} + (\mu_{ij} - a_i)(r - r_{i-1}) - \sum_{k=i}^l \mu_{kj} (r_k - r_{k-1}) \right]. \quad (5.47)$$

Полная мощность деформированного источника будет определяться равенством

$$Q_{ij} = \int_{r_{i-1}}^{r_i} 4\pi r^2 \tilde{S}_{ij} dr \quad (5.48)$$

или

$$Q_{ij} = \frac{4\pi C_i \delta(E - E_j)}{(\mu_{ij} - a_i)^3} \exp \left[-a_i r_{i-1} - \sum_{k=i}^l \mu_{kj} (r_k - r_{k-1}) \right] \times \\ \times \left[e^{z_{ij}} (2 - 2z_{ij} + z_{ij}^2) - 2 \right], \quad (5.49)$$

где

$$z_{ij} = (\mu_{ij} - a_i)(r_i - r_{i-1}).$$

Относительная доля источников, соответствующая i -й области, равна

$$\tilde{S}_{ij} = Q_{ij} / \sum_{i=1}^l Q_{ij}. \quad (5.50)$$

Для задания области i выбирают некоторую случайную величину ξ , равномерно распределенную на интервале $(0, 1)$, и фиксируют i так, что $\tilde{S}_{i-1} \leq \xi < \tilde{S}_i$. Точку r внутри i -й области находят с помощью функции распределения вероятности

$$q_i(r) = \frac{r^2 \exp[(\mu_{ij} - a_i)r]}{\int_{r_{i-1}}^{r_i} r^2 \exp[(\mu_{ij} - a_i)r] dr}.$$

Для этого применим процедуру отбраковки, состоящую в следующем. Пусть $p_i(r)$ — усеченное экспоненциальное распределение, т. е.

$$p_i(r) = \frac{(\mu_{ij} - a_i) \exp[(\mu_{ij} - a_i)r]}{\exp[(\mu_{ij} - a_i)r] - \exp[(\mu_{ij} - a_i)r_{i-1}]} \quad (5.51)$$

Введем также функцию

$$g_i(r) = r^2 / r_i^2, \quad r_{i-1} \leq r < r_i. \quad (5.52)$$

Теперь для выбора r будем использовать распределение $p_i(r)$, следуя процедуре, описанной в Приложении А. Именно, решим уравнение

$$\int_{r_{i-1}}^{r_i} p_i(r) dr = \xi$$

относительно r :

$$r = \frac{1}{\mu_{ij} - a_i} \ln \left\{ \xi \left[\exp [(\mu_{ij} - a_i) r_{i-1}] - \exp [(\mu_{ij} - a_i) r_i] \right] + \exp [(\mu_{ij} - a_i) r_i] \right\}. \quad (5.53)$$

Здесь ξ — случайная величина, равномерно распределенная на интервале $(0, 1)$.

При выборе r на основе распределения $p_i(r)$ следует отбрасывать все значения r , для которых

$$\xi \leq g_i(r) = (r/r_i)^2. \quad (5.54)$$

Дисперсию можно уменьшить, если использовать расслоенную выборку случайной величины (см. разд. 5.6.1) при задании начального положения и исходного энергетического интервала.

5.4.3. Интерпретация потока. Рассмотрим множество частиц, испытавших рассеяние в окрестности $\Delta r'$ точки r' в области i и движущихся после этого в некотором конкретном направлении. Обозначим максимальную длину трека в данной области s_1 . Тогда расстояние s между точками столкновения в модифицированной игре определяется соотношением

$$T'(s) = \frac{d\Lambda(s)}{ds} \exp[-\Lambda(s)]. \quad (5.55)$$

Частица может как испытать соударение в пределах области ($s < s_1$), так и покинуть эту область, не испытав соударения ($s = s_1$). Математическое ожидание величины s дается выражением

$$\langle s \rangle = \int_0^{s_1} s \Lambda'(s) \exp[-\Lambda(s)] ds + s_1 \int_{s_1}^{\infty} \Lambda'(s) \exp[-\Lambda(s)] ds, \quad (5.56)$$

откуда

$$\langle s \rangle = \int_0^{s_1} \exp[-\Lambda(s)] ds.$$

Умножим обе части соотношения (5.56) на $\mu(E')$ и подставим выражение для $\Lambda(s)$, определяемое соотношением (5.24):

$$\mu(E') \langle s \rangle = \mu(E') \int_0^{s_1} \exp[-\mu(E')s + \mu_{ij}(r - r')] ds. \quad (5.57)$$

Математическое ожидание числа столкновений в интервале ds при беспристрастном выборе равно $\mu(E') \exp[-\mu(E')s] ds$. Таким образом, равенство (5.57) означает, что величина $\mu(E') \langle s \rangle$ есть просто интеграл от математического ожидания числа столкновений с весом $\exp[\mu_{ij}(r - r')]$. Поскольку указанная величина не зависит ни от направления частиц, ни от их происхождения и поскольку плотность частиц, испытавших соударение, имеет смещение $\exp[\mu_{ij}(r' - r_{i-1})]$, сумма по всем трекам дает

$$\mu(E') \langle s \rangle = \int \psi(r) \exp[\mu_{ij}(r - r_{i-1})] dV,$$

где ψ — плотность столкновений. Деля обе части последнего равенства на $\mu(E')$ и вспоминая, что $\psi(r)/\mu(E') = \varphi_j(r)$, получаем

$$\langle s \rangle = \int \varphi_j(r) \exp[\mu_{ij}(r - r_{i-1})] dV$$

или более точно

$$\langle s_{ij} \rangle = 4\pi \int_{r_{i-1}}^{r_i} \varphi_j(r) I(r, E_{j-1}) r^2 dr. \quad (5.58)$$

Формула (5.58) служит иллюстрацией использования средней длины трека для оценки потока в модифицированной игре. В общем случае поток вычисляется по формуле

$$\bar{\varphi}_{ij} = \frac{\langle s_{ij} \rangle}{4\pi E_j \int_{r_{i-1}}^{r_i} I(r, E_{j-1}) r^2 dr}. \quad (5.59)$$

Это истинный средний поток (на единичный интервал энергии), взвешенный с функцией $I(r, E_{j-1})$. Для тонких областей, в пределах которых функция I практически постоянна, соотношение (5.59) дает приемлемую величину локального потока.

По-видимому, небезынтересно было бы обсудить вопрос о том, является ли оценка взвешенного потока по формуле (5.59) более полезной, нежели обычное усреднение потока по объему, дающее непосредственно полное число реакций. Разумеется, последний метод применим только к достаточно большим объемам, в которых значительное число взаимодействий осуществляется на протяжении разумного числа историй. Использование среднего потока, взвешенного с функцией ценности, может оказаться выгодным в задачах, в которых пространственное распределение потока подчиняется закону $\exp(-\mu_0 r)$. Тогда, если в качестве параметра функции ценности использовать μ_0 , средневзвешенный поток будет постоянным. Аналогично в задачах, в которых первостепенный интерес представляют генерация и последующая утечка вторичного излучения, параметр μ_{ij} может быть принят за длину релаксации вторичного излучения. В этом случае взвешенный поток будет пропорционален так называемой эффективной полной генерации. Именно, функция распределения вторичных источников, вычисленная с помощью взвешенного потока, будет представлять собой среднее по всем положениям, причем в каждом положении источник будет взвешен с функцией, характеризующей вероятность выхода излучения из данной точки. Далее можно произвести уточнение, усреднив полученную величину по энергиям и направлениям с весом, характеризующим вероятность утечки как функцию этих переменных.

5.4.4. Выбор параметров функции ценности. Одна из трудностей, связанная с использованием выборки по важности, — выбор параметров функции ценности. Метод Монте-Карло считается наиболее эффективным в том случае, если заданные параметры обеспечивают максимально хорошее приближение к точному сопряженному решению. Практически выбор надлежащих величин осуществляется методом проб и ошибок.

Возвратимся снова к сферической геометрии (см. разд. 5.4.1), для которой сопряженное решение можно во многих случаях приблизить функцией $\exp(\mu_{tr} r)$. Здесь μ_{tr} — транспортный, или эффективный макроскопический, коэффициент ослабления для частиц в данном энергетическом интервале. Пусть в интересующей нас задаче, в которой источник расположен вблизи центра системы, проблема сводится к нахождению утечки частиц. Обозначим через $\mu_i(E)$ макроскопическое транспортное сечение, усредненное по всем присутствующим в области i элементам, и положим

$$\mu_{ij} = \min_{E < E_j} [\mu_i(E)]. \quad (5.60)$$

Использование такого минимального значения согласуется с упомянутым в разд. 5.4.1 требованием, в соответствии с которым функция ценности при убывании энергии, как правило, не должна возрастать [см. замечание после соотношения (5.31)].

Задача, в которой первостепенный интерес представляет генерация вторичных частиц, может быть поставлена следующим образом. Предположим, что в области i нейтрон с энергией в пределах j -й энергетической группы порождает γ -излучение с энергией E_γ . Пусть энергия E_γ соответствует j' -й группе энергетического спектра γ -излучения. Обозначим через μ_{ij} минимальное значение μ_{tr} для γ -квантов с энергией в пределах j' -й энергетической группы в области i . Тогда в качестве параметров функции ценности для нейтронов, порождающих эти γ -кванты, следует взять наименьшее значение из μ_{ij} и μ_{ij}' .

Выскажем некоторые общие замечания, относящиеся к изложенной методике. Во-первых, использование в качестве параметра транспортного сечения законно в задачах, сводящихся к определению утечки и связанных с рассмотрением проникновения нейтронов в водородсодержащую защиту. В подобных случаях распространение нейтронов в глубь защиты сопровождается потерей энергии вплоть до вылета из защиты. Поэтому во внешних областях величины μ_{ij} , соответствующие данной энергетической группе, должны быть меньше. Во-вторых, если предметом рассмотрения является генерация вторичного излучения, то величина μ_{ij} не должна обязательно непрерывно возрастать с уменьшением энергии, дабы нейтроны не выбыли из игры, не успев породить вторичного излучения (предполагается, что генерация вторичного излучения осуществляется в основном при низких энергиях нейтронов).

5.4.5. Расщепление. Использование функции ценности для увеличения эффективности расчетов методом Монте-Карло значительно упрощается, если функция ценности является кусочно-постоянной. В этом случае существует прямой метод вычисления модифицированного ядра, мало отличающийся от метода беспристрастной выборки. Кроме того, кусочно-постоянная функция обеспечивает необходимую гибкость при конкретизации ценности. В силу указанных причин подобный метод особенно полезен для сложных геометрий*.

В качестве иллюстрации рассмотрим задачу о прохождении излучения через полубесконечный плоский слой, в который частицы попадают слева. Предположим, что функция ценности зависит только от координаты и как функция координаты является кусочно-постоянной. Заметим, что при анализе прохождения излучения через вещество $I(z)$ должна быть неубывающей функцией z . Это вытекает из определения функции ценности $I(z)$ как меры ожидаемого вклада частиц в точке z . Следовательно, в задачах, связанных с прохождением излучения через вещество, функцию $I(z)$ можно интерпретировать как вероятность утечки, последняя же возрастает с увеличением z . Поскольку функция ценности зависит только от координаты, соотношение (5.23) приводит к равенству

$$\tilde{T}(z' \rightarrow z) = T(z' \rightarrow z) I(z) / I(z').$$

Типичное поведение функции $I(z)$ показано на рис. 5.2. На этом же рисунке приведены графики функций T и \tilde{T} для частицы, движущейся направо.

Метод, обычно используемый для корректного вычисления ожидаемой плотности столкновений, сводится к расщеплению на плоскостях, где происходит изменение функции ценности. Для определенности предположим, что на границе i функция ценности испытывает скачок ζ . Тогда при пересечении частицей границы слева направо необходимо образовать ζ частиц, или, что то же самое, приписать одной частице вес ζ . Для частицы, движущейся справа налево, следует продолжать историю с вероятностью ζ^{-1} .

Покажем, что указанная процедура представляет собой конкретный способ выбора \tilde{T} . Согласно соотношению (5.1) можно написать для $s > s_k$

$$T(s) = \exp \left[- \int_0^{s_k} \mu(s') ds' \right] T(s - s_k), \quad s > s_k. \quad (5.61)$$

* Соответствующая методика известна под названием «расщепление». Она использована в программах UNC-SAM [12] и 05R [13].

Первый множитель в этом выражении представляет собой вероятность того, что частица достигнет s_k , не испытав ни одного соударения. Обозначим его X_k . Тогда при переходе от области k к области $k + 1$

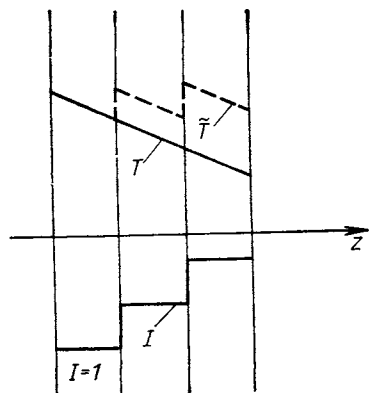
$$T(s) = X_k \frac{I_{k+1}}{I_k} T(s - s_k), \quad s > s_k. \quad (5.62)$$

Таким образом, расщепление (рулетка) дает I_{k+1}/I_k частиц в области $k + 1$. Если за всеми за ними следить обычным способом [т. е. используя $T(s - s_k)$], то результирующая плотность столкновений окажется равной $(I_{k+1}/I_k)T(s - s_k)$. Поскольку все это осуществляется, если частица достигает s_k , т. е. с вероятностью X_k , \tilde{T} и есть искомая величина. Оценки, полученные из видоизмененных с учетом расщепления плотностей столкновения, будут корректными, если каждой области k приписать вес I_k .

Многие авторы [24, 25] анализировали различные возможности выбора границ и соотношения функций ценности в разных областях. Общее заключение сводится к следующему: границы областей следует располагать таким образом, чтобы поток между ними падал вдвое, а величину скачка ζ рекомендуется задавать равной 2. Аллен [35] предлагает также выделить первый пролет, соответствующий начальной энергии.

При умелом подходе метод расщепления позволяет поддерживать поток «важных» частиц (т. е. частиц с высокой энергией при вычислениях дозы) приблизительно постоянным на всем протяжении от источника до детектора. В качестве величины фактора расщепления

Рис. 5.2. Поведение функции $I(z)$.



можно выбрать любое значение ζ . Однако значительные искусственные изменения плотности столкновений ведут к увеличению дисперсии при рождении (с малой вероятностью) большого числа идентичных частиц. Использование малых значений ζ может оказаться неэффективным, так как в веществах с большим коэффициентом ослабления будет искусственно создаваться много областей, а это, в свою очередь, вызовет напрасную трату времени блуждания, особенно в системах со сложной геометрией.

В видоизмененном методе расщепления для получения надлежащей величины плотности столкновений при вычислении \tilde{T} следует прибегать к расщеплению в каждой точке столкновения (задаваемой ядром T), а не в плоскостях расщепления. На каждую частицу, претерпевшую соударение в точке z' , в ее следующей точке столкновения z будет приходиться $I(z)/I(z')$ частиц, испытавших соударение в точке z . Таким образом, если бы между точками z' и z было две границы, то число рассеянных в точке z частиц равнялось бы четырем. Вообще говоря, метод генерации дополнительной частицы при пересечении двойной границы дает уменьшение дисперсии в каждой истории.

В результате эффекта расщепления замысел обычного розыгрыша методом Монте-Карло не меняется, успех обеспечивается за счет увеличения генерации числа «перспективных» частиц. Другими словами, мы играем, в обычную азартную игру, выжидая только, когда «важные» частицы будут умножены, а «ненужные» уничтожены.

Выбор функции ценности, зависящей только от координаты, обусловлен единственной причиной — возможностью упрощения расчетов. Но в тех областях, где величина μ_T уменьшается с увеличением энергии, вероятность пропускания тем больше, чем больше энергия. В этом случае можно использовать простую технику расщепления (описанную в начале предыдущего раздела), но ввести в соответствующие формулы энергетическую зависимость. Весь ин-

тервал возможных энергий следует разбить на энергетические группы и в каждой пространственной области функцию ценности задать как кусочно-постоянную функцию энергии.

Тогда, согласно принятым в разд. 5.4.1 обозначениям, она будет записываться как I_{ij} . Далее можно ввести величины T и C , фигурирующие в соотношении (5.23), которые в данном случае будут в соответствующих точках испытывать скачки. При этом величина T будет иметь обычный смысл, а C следует трактовать так же, как в разд. 5.4.1.

Подобно тому, как описано в разд. 5.4.2, можно осуществить переход к смещенной плотности источников.

Если функция ценности кусочно-постоянна, то возможен другой, более прямой способ вычисления плотности будущих столкновений. Введем в рассмотрение вероятность того, что в каждой пространственной области рассеявшаяся частица испытает следующее столкновение. Эта вероятность может оказаться равной нулю, за исключением областей, непосредственно прилегающих к пути полета частицы. Для учета ценности исходную вероятность того, что частица, испытавшая столкновение в области i' , испытает следующее столкновение в области i , надо умножить на $I_i/I_{i'}$. Тогда число частиц, подвергшихся рассеянию в области i , будет даваться равенством

$$N_i = \frac{I_i}{I_{i'}} [\exp(-\Lambda_{i-1}) - \exp(-\Lambda_i)]. \quad (5.63)$$

Для плоской геометрии фактор Λ_i определяется выражением

$$\Lambda_i = \frac{1}{\omega} \left[\sum_{l=i}^i \mu_T(l, E) (z_i - z_{l-1}) - \mu_T(i', E) (z - z_{i'-1}) \right],$$

где ω — косинус угла между направлением полета и нормалью к поверхности, z — координата точки последнего столкновения.

Итак, установлено, что в среднем в каждой области вдоль пути полета частицы с ней испытывают соударения N_i частиц. Для каждой из них остаточная длина свободного пробега определяется плотностью вероятности

$$T_\lambda = \exp(-\lambda) / \{1 - \exp[-(\Lambda_i - \Lambda_{i-1})]\}. \quad (5.64)$$

Как и в случае простого расщепления, ведется наблюдение за одной единственной частицей, в то время как остальные находятся до поры до времени в списке «скрытых» переменных, откуда они будут выбираться позднее. Когда же в списке не останется ни одной частицы, выбирается для наблюдения другая частица источника.

В разд. 5.5.1 будет показано, что для оценки потока можно использовать среднюю длину трека в рассматриваемой области. Однако в описываемой здесь игре Монте-Карло частицы не перемещаются между точками столкновения, так что длины треков не аккумулируются. Из сравнения соотношения (5.78) и (5.63) видно, что взвешенный с функцией ценности поток в области i , обусловленный частицей, испытавшей рассеяние в области i' , дается выражением $N_i/\mu_T(i, E)$. Такой метод применим к любой геометрии.

Хотя изложенный метод выборки по важности всегда приводит к меньшей дисперсии за историю, чем метод пространственного расщепления на границах, он не обязательно эффективнее последнего. (Под эффективностью мы понимаем в данном случае общее вычислительное время, необходимое для достижения нужной дисперсии.) Например, при расчете тонких защит таким методом дополнительное время наблюдения неоправданно велико и не компенсируется выигрышем за счет уменьшения дисперсии.

Описанный метод в некоторых случаях можно распространить на проблемы замедления. Рассмотрим столкновения нейтрона с атомом водорода в области i . Пусть начальная энергия E' нейтрона соответствует l -й энергетической

группе. Запишем выражение для математического ожидания числа нейтронов $N_{k'}$, рассеянных в k -ю энергетическую группу:

$$N_{k'} = \int_{4\pi} d\Omega \int_{E_{k-1}}^{E''} dE (I_{ik}/I_i) C(E' \rightarrow E', \Omega' \rightarrow \Omega), \quad (5.65)$$

где $E'' = \min(E', E_k)$. При рассеянии на водороде конечная энергия нейтрона имеет менее равномерное распределение по всему возможному интервалу энергий, нежели его начальная энергия. Именно,

$$\int d\Omega C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) = 1/E'. \quad (5.66)$$

После подстановки (5.66) в (5.65) получаем (для водорода)

$$N_{k'} = \frac{I_{ik}}{I_{il}} \frac{E'' - E_{k-1}}{E'}, \quad (5.67)$$

где $E'' = \min(E', E_k)$. Энергия рассеянного нейтрона E равномерно распределена по интервалу энергий k -й группы, так что

$$E = (E'' - E_{k-1}) \xi + E_{k-1}, \quad (5.68)$$

где ξ — случайная величина, равномерно распределенная по интервалу (0, 1).

Для других событий подобная процедура может оказаться трудно выполнимой, поскольку не всегда удастся записать ядро столкновений в простой аналитической форме. Правда, можно вычислить $N_{k'}$ приближенно или предварительно рассчитать его численно, чтобы воспользоваться преимуществами описанного метода. Приближенное значение $N_{k'}$ можно затем откорректировать с помощью весовых функций (см. разд. 5.4.6).

В заключение отметим, что в функцию ценности можно ввести также и угловую зависимость. Конечно, тогда функция ценности будет напоминать идеальную функцию ценности, т. е. решение сопряженного уравнения. Однако дополнительные осложнения ввиду конкретизации пространственной, энергетической и угловой зависимостей могут оказаться препятствием к использованию такой функции ценности в задачах о прохождении излучения через вещество защиты. Например, в этом случае в задачах с множеством областей возникнет трудная проблема определения необходимых параметров функции ценности. Недавно были предприняты попытки автоматизировать процесс нахождения соответствующих параметров [7]. Общие соображения, касающиеся установления параметров функции ценности в случае экспоненциального преобразования, изложены в разд. 5.4.3. Они остаются справедливыми и в задачах с расщеплением.

5.4.6. Смещенный (пристрастный) выбор. В предыдущих разделах мы обсуждали вопрос об изменении характера случайного блуждания частиц для улучшения статистической точности результатов. Такое изменение связано с использованием функции ценности $I(P)$. Но существует еще альтернативный метод смещенного выбора, применяемый для той же цели. Он заключается в непосредственном переходе к деформированному (смещенному) ядру, которое в § 5.2. было обозначено $K'(P' \rightarrow P)$. При этом можно ввести также деформированную функцию источника $S'(P)$. Случайное блуждание осуществляется посредством выбора точек источника на основе распределения $S'(P)$ с последующим выбором с использованием ядра $K'(P' \rightarrow P)$. На протяжении всей истории частицам приписывается вес. На начальном шаге вес равен

$$W_0(P) = S(P)/S'(P), \quad (5.69)$$

а на последующих шагах он вычисляется с помощью веса $W(P')$, приписываемого предыдущему столкновению, согласно соотношению

$$W(P) = W(P') K(P' \rightarrow P)/K'(P' \rightarrow P). \quad (5.70)$$

Пусть $\chi'(P)$ — плотность распределения весовой функции частицы после столкновения в точке P^* . Вклад в функцию $\chi'(P)$, обусловленный предыдущими столкновениями, определяется выражением

$$\int \chi'(P') K'(P' \rightarrow P) W(P) dP', \quad (5.71)$$

представляющим собой результат усреднения плотности $\chi(P')$ по всем возможным точкам P' , умноженной на вес W в точке P . Учитывая соотношение (5.70) для веса в точке P , получаем

$$\chi'(P) = S(P) + \int \chi'(P') K(P' \rightarrow P) dP'. \quad (5.72)$$

Таким образом, χ' удовлетворяет такому же интегральному уравнению, как и функция χ [см. (5.3)]. Поскольку решение этого уравнения единственно, во всех вычислениях в качестве χ можно использовать функцию χ' .

Очевидно, что подобный метод является весьма общим. Единственное ограничение, связанное с необходимостью получения несмещенной оценки, отражено в условии

$$K'(P' \rightarrow P) > 0, \quad \text{если} \quad K(P' \rightarrow P) > 0. \quad (5.73)$$

Разумеется, предметом особого обсуждения должен служить вопрос о возможности уменьшения дисперсии при использовании конкретного ядра $K'(P' \rightarrow P)$.

Описанный метод применяется часто в тех случаях, когда физическая интуиция подсказывает, как непосредственно сконструировать K' . Наиболее распространенный прием такого рода — подавление поглощения — состоит в следующем. Запишем ядро

$$C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r) = [\mu_s(E', r) / \mu(E', r)] C'(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r). \quad (5.74)$$

Первый множитель в правой части равенства (5.74) — вероятность рассеяния, второй — ядро рассеяния, нормированное на единицу. Если ядро C заменить ядром C' , то поглощение будет отсутствовать, а вес соответственно уменьшится в отношении $p_s = \mu_s(E', r) / \mu(E', r)$ при рассеянии в точке r частицы с начальной энергией E' .

Существует много задач, в которых указанный прием оказывается полезным. Однако слепое применение его чревато неприятными последствиями. Предположим, что число столкновений при замедлении до некоторой конкретной энергии меняется от истории к истории достаточно сильно. Тогда, хотя величина p_s будет весьма близка к единице, веса будут меняться в весьма широком диапазоне с ростом числа столкновений (например, если величина p_s постоянна, вес на протяжении n столкновений уменьшится в p_s^n раз). Это введет дополнительную дисперсию, которая может быть большой. Представим теперь другую ситуацию. Пусть принимаются во внимание только истории с большими весами. Тогда будут неоправданно большими напрасные затраты вычислительного времени на прослеживание огромной популяции частиц с малыми весами.

Если подавлять все события, ведущие к потере частиц, история вообще никогда не завершится. Если при этом включить в рассмотрение какие-либо процессы ветвления, например деление, может произойти настоящая катастрофа; если по-прежнему считать, что усредненный по истории ответ является правильным, тогда вычислительное время будет равно бесконечности.

Если наложить на веса дополнительное ограничение, разрешив им изменяться только в определенном диапазоне, можно существенно подавить частицы с излишне малыми весами и более эффективно использовать частицы с высокими весами. Пусть

$$W_U(E) > W_M(E) > W_L(E). \quad (5.75)$$

В процессе замедления текущий вес частицы W' должен быть заключен в некоем интервале (W_L, W_U). Как только окажется, что $W' > W_U$, частица

* В выборочном методе, использующем функцию ценности $I(P)$, вес равен $I(P)^{-1}$.

расщепится с образованием N идентичных частиц. Число N можно определить, например, равенством*

$$N = [W'/W_L].$$

Если регулировать вес таким образом, чтобы он был равен

$$W = W'/N,$$

то получится несмещенный результат. Если задаться условием $W_U \geq 2W_L$, можно гарантировать выполнение неравенства $W \leq W_U$. При $W' < W_L$, история будет продолжаться с вероятностью W'/W_M (или же закончится) и ее вес должен быть принят равным W_M . Выбор W_M полностью аналогичен выбору функции ценности, так как $W_M(E) \sim 1/I(E)$.

Во многих задачах, связанных с расчетом защиты, смещение вводится непосредственно в функцию источника для выделения энергий и направлений, от которых существенно зависит глубина проникновения. Часто истинный коэффициент ослабления каким-либо специальным образом понижается для стимулирования более длинных пробегов. Некоторые из этих задач страдают уже известным недостатком: частицы могут попадать в данную точку совершенно различными путями и потому их веса будут изменяться в довольно широком диапазоне.

§ 5.5. МЕТОДЫ СЧЕТА

5.5.1. Оценка последнего свободного пробега. В прямых аналоговых методах Монте-Карло ответ дается всякий раз, как только частицы попадают в интересующую нас область. Однако в тех задачах, для которых априорная вероятность достижения некоторой «важной» области частицами источника весьма мала, прямая аналоговая «игра» может оказаться крайне неэффективной. В § 5.4 для иллюстрации был описан метод изменения транспортного аспекта игры; в результате такого изменения увеличивалась вероятность достижения частицей «важной» области. В этом разделе будет описан метод «счета» частиц, дающих вклад в искомый результат, не требующий достижения частицей заданной области.

В большинстве задач, подобных задачам расчета защиты, существенной величиной является поток частиц. Величина потока может быть важна как сама по себе, так и для получения промежуточных результатов. Примерами последних могут служить интенсивность вторичного γ -излучения, активация, нагревание, доза или соответствующие величины, определяемые как произведение потока и функций чувствительности.

Поток может быть выражен как частное от деления плотности столкновений на полное макроскопическое сечение для этих частиц. Чтобы вычислить полный поток частиц в объеме V , энергии которых заключены в интервале ΔE , необходимо сосчитать величину $1/\mu_T(E)$ для всех частиц, испытывающих столкновения в объеме V . Средняя величина потока частиц в единице объема, энергии которых лежат в единичном интервале, дается соотношением

$$\bar{\varphi}(V, \Delta E) = \frac{1}{NV \Delta E} \sum_{n_i=1}^N \frac{1}{\mu_T(E)}. \quad (5.76)$$

Здесь индекс i отвечает i -му столкновению в объеме V для частицы n -й истории. Вероятность соударения в пределах данной области определяется выражением

$$p = 1 - \exp[-\mu_T(E) S_M],$$

* Если задана некоторая величина x (вообще говоря, не равная целому числу), то целая часть величины x записывается как $[x]$.

где S_M — максимальное расстояние, которое может пройти частица вдоль своего пути полета в пределах данной области. Дисперсия равна величине $p(1-p)$, которая мала при больших S_M , так как при больших значениях S_M справедливо приближенное равенство $p(1-p) \approx \exp[-\mu_T(E)S_M]$. В небольших областях $p \approx \mu_T(E)S_M$, и стандартное отклонение на одном пролете равно

$$\sigma/p \approx 1/\sqrt{\mu_T(E)S_M}.$$

Это отклонение велико при малых S_M .

В тонких или небольших по размерам областях поток можно вычислить более точно, если оценить вероятность столкновения частицы вдоль ее пути полета в пределах рассматриваемой области. Оценка для среднего потока в этом случае будет иметь вид

$$\bar{\varphi}(V, \Delta E) = \left\langle \frac{1}{NV \Delta E} \sum_{n_j=1}^N \frac{1 - \exp[-\mu_T(E)S_M]}{\mu_T(E)} \right\rangle. \quad (5.77)$$

Из соотношения (5.77) следует, что для определения вклада в поток частицы n -й истории на ее j -м пролете в данном объеме необходимо вычислить величину отношения $\{1 - \exp[-\mu_T(E)S_M]\}/\mu_T(E)$. Таким образом удастся исключить дисперсию, связанную с проблемой установления факта столкновения частицы.

В описанном методе фигурировало предположение, что частица достигает интересующего нас объема. Однако такое требование не является обязательным. Можно вычислить также вклад в поток в объеме V от частиц, испытавших соударения вне V . Для этого надо вычислить вероятность того, что частица, летящая после рассеяния в точке r в направлении, пересекающем V , претерпит следующее соударение внутри объема V (рис. 5.3). Оценка для среднего потока будет тогда даваться соотношением

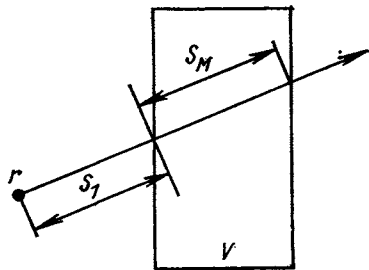


Рис. 5.3. К оценке функции $\bar{\varphi}(V, \Delta E)$.

$$\bar{\varphi}(V, \Delta E) = \left\langle \frac{1}{NV \Delta E} \sum_{n_i=1}^N \frac{1 - \exp[-\mu_T(E)S_M]}{\mu_T(E)} \exp\left[-\int_0^{s_1} \mu_T(E) ds\right] \right\rangle. \quad (5.78)$$

В соотношении (5.78) суммирование происходит по всем соударениям i , имевшим место как внутри объема V , так и вне его.

Данный метод можно использовать при соответствующих расчетах для протяженных, но тонких областей, охватывающих большой телесный угол. Если рассматриваемый объем настолько мал, что вероятность попадания в него частицы после очередного столкновения невелика, оценку можно произвести, начиная с предыдущего шага. Именно, для всех частиц, испытывающих рассеяние в данной точке, можно вычислить вероятность попадания в энергетический интервал ΔE при направлении движения после рассеяния в сторону V . Подставив вычисленную величину в соотношение (5.78), нетрудно получить новую оценку. Указанный метод развивается в следующем разделе.

Следует напомнить, что хотя при использовании всех перечисленных методов, имеющих различные степени «статистической точности», общая дисперсия за историю уменьшается (ввиду возрастания числа столкновений, дающих вклад в искомый результат), необходимое для расчета истории машинное время увеличивается. Следовательно усложнение задачи не всегда оправдано, ибо оно не обязательно влечет улучшение эффективности*. Например, в тех слу-

* Под эффективностью мы понимаем общее машинное время, необходимое для получения результатов с заданной точностью.

чаях, когда основной вклад в поток в объеме V обусловлен столкновениями частиц вблизи этого объема или непосредственно внутри него, не имеет смысла оценивать эффект от соударений на значительном удалении от рассматриваемого объема. Особенно не рекомендуется учитывать вклад далеких столкновений для сложных геометрий, когда требуется вычисление большого числа оптических длин и соответствующих экспоненциальных функций.

Для решения таких задач можно использовать те или иные модификации схемы смещения в сочетании с обычным порядком счета. Один из подобных методов дает оценку потока с вероятностью $q(s_1)$, в то время как с вероятностью $1 - q(s_1)$ частица прослеживается без оценки вклада от данного столкновения. При счете по такой схеме в выражение для потока следует ввести фактор $1/q(s_1)$. Оптимальный вид функции $q(s_1)$ зависит от характера решаемой задачи.

5.5.2. Оценки длины трека и других параметров. Нетрудно показать, что корректной оценкой или мерой потока является длина трека частицы в рассматриваемой области*. Именно,

$$\bar{\varphi}(V, \Delta E) = \left\langle \frac{1}{NV \Delta E} \sum_{n=1}^N s \right\rangle, \quad (5.79)$$

где s — длина трека в объеме V частицы n -й истории. Соотношение (5.79) служит хорошим приближением для тонких сферических слоев, вероятность пересечения которых частицами без столкновений достаточно велика. В этом случае величина s практически одна и та же для всех частиц и результирующая дисперсия мала. Кроме того, поскольку длину трека приходится, как правило, рассчитывать в любых задачах с блужданием, вычисление потока требует лишь незначительных дополнительных затрат машинного времени.

Если геометрия системы и параметры углового распределения таковы, что не исключены большие пробеги в некоторых направлениях, относительная дисперсия может оказаться заметной. Это утверждение относится, например, к системам с близко расположенными параллельными плоскими или сферическими слоями. Но абсолютная дисперсия остается ограниченной.

Как указывалось выше, не имеет смысла решать задачу прямым аналоговым методом Монте-Карло, если интересующую вычислителя область достигает лишь небольшое число частиц. В предыдущем разделе были получены различные статистические оценки потока. Теперь мы воспользуемся найденными оценками. Для каждой частицы получена вероятность того, что после рассеяния в данной точке она достигнет объема V , не испытав по пути ни одного соударения, и в объеме V она претерпит следующее столкновение.

Вклад частицы, имеющей надлежащее направление движения, в поток в объеме V равен вероятности прохождения расстояния s_1 без соударений, умноженной на вероятность столкновения в объеме V и на функцию, определяющую вклад в поток в единичном объеме в результате рассеяния частицы в объеме V , т. е. $\exp \left[- \int_0^{s_1} \mu_T(E, s') ds' \right] \frac{t}{V}$. Эту величину следует умножить на плотность частиц $\psi(r', E', \Omega')$, претерпевающих соударения в точке r' , на ядро, характеризующее рассеяние в направлении к V , и на телесный угол A/s_1^2 (рис. 5.4). Результат надлежит проинтегрировать по всем возможным направлениям:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_0(r, E) = & \iiint \psi(r', E', \Omega') \left\{ \exp \left[- \int_0^{s_1} \mu_T(E, s') ds' \right] \times \right. \\ & \left. \times C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | r') / s_1^2 \right\} dr' dE' d\Omega'. \end{aligned} \quad (5.80)$$

* Фактически справедливость этого утверждения демонстрируется материалом, изложенным в разд. 5.4.3. Фигурирующую там функцию ценности можно восстановить, положив $\Lambda'(s) = \mu$.

Величина, стоящая в скобках в выражении (5.80), является соответствующей оценкой для потока, которую надо получить для каждой частицы, испытывающей рассеяние. Заметим, что для изотропного рассеяния $C = \mu_s / (4\pi\mu_T)$, но во многих задачах нейтронной физики ядро C приходится рассчитывать численно с помощью таблиц, содержащих параметры рассеяния. Ввиду существования корреляции между углом рассеяния и энергией рассеяния обычно определяют E по известной величине $\Omega' \cdot \Omega$ и накапливают поток, соответствующий энергетическому интервалу конечной ширины. Разумеется, можно также регистрировать поток в различных телесных углах около направления Ω .

Если точка r лежит внутри рассеивающего объема, возникают трудности при использовании соотношения (5.80). Дело в том, что дисперсия в этом случае становится бесконечной. Для доказательства последнего утверждения рассмотрим небольшой объем вблизи детектора, в котором плотность столкновений можно считать практически постоянной. Вероятность столкновения на пути ds_1 есть $4\pi\psi s_1^2 ds_1$. Из выражения (5.80) вытекает по существу, что

$$\bar{\varphi} \sim \psi \int \left(\frac{1}{4\pi s_1^2} \right) 4\pi s_1^2 ds_1.$$

Написанная величина конечна. Однако

$$\bar{\varphi}^2 \sim \psi \int \left(\frac{1}{4\pi s_1^2} \right) 4\pi s_1^2 ds_1, \text{ т. е.}$$

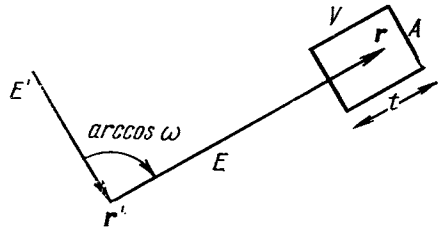


Рис. 5.4. К оценке функции $\bar{\varphi}_0(r, E)$.

$\bar{\varphi}^2$ стремится к бесконечности при $s_1 \rightarrow 0$.

Бесконечную дисперсию можно исключить, окружив детектор небольшой сферой, в которой не следует производить никаких оценок. Однако, если сфера слишком тонка, дисперсия будет оставаться немалой вследствие столкновений частиц вблизи сферы. Стоит отметить, что наличие бесконечной дисперсии не влечет с необходимостью отказа от использования метода Монте-Карло. Например, при увеличении числа историй асимптотическое поведение упомянутой выше дисперсии следует закону $N^{-1/2}$, в то время как для конечной дисперсии характерно поведение $N^{-1/2}$.

Вопрос о возможности исключения бесконечной дисперсии был проанализирован авторами работы [26]. Как правило, дисперсия в оценке интегралов методом Монте-Карло уменьшается, если функция плотности выбирается близкой к подынтегральному выражению. Если подынтегральная функция содержит некую сингулярную компоненту, ее рекомендуется включать в выборочное распределение. Чтобы в этом случае оценить поток в данной точке, необходимо учесть вклад в поток от соударений еще в «некоторой точке». Например, если столкновение происходит в точке r_C , а детектор расположен в точке r_D , в качестве такой дополнительной точки выбирается точка r_I , в которой функция плотности имеет особенность вида $(|r_C - r_I| |r_I - r_D|)^{-2}$. После нахождения этой точки вычисляется поток, обусловленный столкновениями в точках r_C и r_D . Подробно указанный метод описан в работе [26].

Помимо вычисления на каждом шагу потока сталкивающихся частиц следует отдельно аналитически рассчитать поток несталкивающихся частиц.

Подобная техника может быть использована для улучшения оценки потока, усредненного вдоль линии. Оценки типа (5.78) дают конечную дисперсию для потока, усредненного по поверхности.

Некоторые усовершенствования позволяют применять изложенный метод к решению многогрупповых многоскоростных задач в сложной многозонной геометрии. Соответствующие методы оценок включены в некоторые рабочие программы, например в программы SAM [12] и ATHENA [81].

Для вычисления потока в данной точке при наличии протяженного источника можно решать, конечно, сопряженную задачу. Но если и источник, и детектор — точечные, возникают новые трудности.

В некоторых реакторных задачах требуется вычислять поток в малых областях, обусловленный протяженным источником. Методы, основанные на решении сопряженного уравнения, были развиты Мейнардом, Гелбардом и Спанье. Они более подробно изложены в § 5.7.

§ 5.6. ПРОЧИЕ МЕТОДЫ

5.6.1. Расслоение. Предположим, что в процессе вычислений методом Монте-Карло случайную величину выбирают, используя единственную случайную переменную (см. Приложение А). Пусть, например, координата источника в задаче с плоской геометрией вычисляется как

$$x = \xi X_0.$$

Выбираемые таким образом величины x являются абсолютно независимыми и случайными. Во многих случаях удобнее более равномерное распределение координат источника, нежели заданные выше. Для этой цели можно осуществить расслоение координаты источника, вычислив для некоторого целого числа (N) n последовательных расслоенных случайных чисел ξ_n^* :

$$\xi_n^* = (n - \xi_n)/N, \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

Здесь ξ_n — последовательность обычных случайных чисел. Если величину x_n^* вычисляют с помощью ξ_n^* , то выборочное распределение координат источника оказывается более гладким, в силу чего можно ожидать уменьшения ошибки в окончательном ответе.

Разумеется, теперь последовательные истории будут коррелированными и их уже нельзя считать независимыми при вычислении дисперсии. Эту трудность можно преодолеть, разделив все множество историй на отдельные группы, каждая из которых содержит N частиц источника. Последовательные группы будут расщепляться одинаковым образом, но независимо. Тогда средние по группам величины, используемые для анализа ошибок, также будут независимыми случайными величинами. Такую процедуру можно применять к любой случайной величине, связанной обычно с начальным периодом истории, — к координате, энергии, направлению (для источника), длине первого пролета.

Нетрудно обобщить указанный метод и рассматривать одновременно несколько переменных. Пусть x_{nj} — последовательные (по n) значения случайных величин X_j ($j = 1, 2, \dots, J$). Предположим для простоты, что величины X_j связаны одинаковым образом со случайной переменной ξ . Тогда для выбора множества точек (в пространстве размерностью J) методом расщепления следует ввести величины

$$\xi_{nj}^* = (m_j - \xi_{nj})/M,$$

$$m_j = 1, 2, \dots, M; \quad j = 1, 2, \dots, J.$$

Здесь каждое число m_j изменяется независимо от других в интервале от 1 до M , а ξ_{nj} — обычные независимые случайные переменные. Результатом выборки является множество M^J коррелированных точек. Если M^J должно быть равно заданному числу коррелированных историй и если $J > 2$, то M — довольно малое число. Ясно, что в этом случае расслоение будет слабым.

Штейнберг [27] предложил остроумную схему, позволяющую обойти указанную трудность. Для J переменных x_j следует образовать J независимых случайных перестановок из целых чисел 1, 2, ..., N . Пусть m_{nj} — n -й член j -й перестановки. Тогда расслоенные случайные переменные будут иметь вид:

$$\xi_{nj}^* = (m_{nj} - \xi_{nj})/N;$$

$$n = 1, 2, \dots, N; \quad j = 1, 2, \dots, J; \quad 1 \leq m_{nj} \leq N.$$

Такая схема позволяет использовать преимущества метода расслоения при рассмотрении наборов из большого числа случайных величин. Эта схема называется наиболее эффективной в применении к решению интегральных уравнений методом случайной выборки, если ее приспособить для использования в процедуре выборки по важности (см. разд. 5.4.2).

5.6.2 Антитетичные (противоположные) случайные величины. Хэммерсли и Хендскомб [10, 28, 29] предложили целый класс остроумных приемов, с помощью которых часто удается значительно уменьшить дисперсию без существенного увеличения затрат вычислительного времени. Общая идея состоит в следующем. С каждым конкретным исходом случайного события связывается одно (или более) дополнительное событие, вклад которого в искомую величину вызывает отрицательную корреляцию по отношению к первоначальному событию. Так, выбор конкретного направления рассеяния может послужить основой для оценки (методами, изложенными в § 5.5) потока. Если частный вклад от данного направления больше среднего, тогда вклад от противоположного направления в большом числе случаев должен быть меньше среднего. Среднее из этих двух коррелированных оценок ближе к математическому ожиданию, а дисперсия меньше, чем для каждой из оценок.

Оценка вклада от направления, противоположного рассматриваемому, представляет собой наиболее общий подход при использовании антитетичных случайных величин [30], но, очевидно, в качестве антитетичных переменных можно брать также энергию и длину свободного пробега. Кроме того, при оперировании антитетичными случайными величинами не требуется накладывать ограничений на результаты оценок: если в процессе случайного блуждания участвуют более одной частицы, возникающие естественным путем (т. е. вследствие деления) или образующиеся в результате процедуры расщепления, удобно иметь отрицательную корреляцию конечных вкладов от различных частиц. Подобные эффекты возникали при расслоении выборки после отбора методами, описанными в разд. 5.6.1.

5.6.3. Коррелированные выборки. Возможность использования ядра K' совместно с подходящими весовыми функциями может быть реализована иным способом, нежели описано в разд. 5.4.6. Рассмотрим две различные, но близкие конфигурации, для каждой из которых требуется получить конкретный ответ. Предположим, что одна из задач характеризуется ядром K_1 , другая — ядром K_2 . Задачу 1 можно решить на основе выбора ядра K_1 . Для задачи 2 K_1 можно считать смещенным (в смысле определения, введенного в разд. 5.4.6) ядром и вычислять весовые функции (для каждого столкновения необходимо учитывать поправочный фактор K_2/K_1 для веса), а затем получать несмещенный результат, используя истории из задачи 1. Можно также для обеих задач проводить оценки, предложенные в § 5.5, с использованием одних и тех же историй и весов.

Результаты для обеих задач должны быть коррелированными, и если условия задач различаются незначительно, разность между двумя оценками вычисляется более точно, чем в случае независимых расчетов. Кроме того, вычисление весовых функций может потребовать меньше времени, чем процесс выборки. Поэтому параметрический анализ окажется более экономичным, чем при независимых вычислениях.

Первый из упомянутых методов удобно применять в реакторных задачах, для которых существенный интерес представляют малые эффекты. Он обсуждается в разд. 5.7.2.

Возможны также такие задачи, условия которых различаются незначительно и для одной из которых известен точный ответ. Тогда рекомендуется указанным здесь методом вычислить разность между искомым ответом и заданным. В результате можно получить нужную оценку с высокой точностью.

Для определенности предположим, что полные сечения, характеризующие задачи 1 и 2, различны. Пусть, кроме того, в этих задачах несколько различаются вероятности рассеяния p_s как функции энергии. Последнее обстоятельство может быть обусловлено разницей в температурах или некоторым различием

ем концентраций составляющих материалов. Поскольку в обеих задачах источники одинаковы, вес W_2 , служащий для корректировки результатов задачи 2, должен быть равен в начальный момент единице. На протяжении любого свободного пробега расстояние определяется функцией распределения вероятности

$$T_1(s) = \mu_1(s) \exp \left[- \int_0^s \mu_1(s') ds' \right].$$

Поэтому вес W_2 изменяется в отношении

$$\begin{aligned} T_2(s)/T_1(s) &= \\ &= [\mu_2(s)/\mu_1(s)] \exp \left\{ - \int_0^s [\mu_2(s') - \mu_1(s')] ds' \right\}, \end{aligned} \quad (5.81)$$

причем при рассеянии частицы с энергией E в точке \mathbf{r} коэффициент изменения весовой функции, обусловленного изменением p_s , есть $p_{s2}(E, \mathbf{r})/p_{s1}(E, \mathbf{r})$.

Аналогично оценивается эффект от изменения закона рассеяния, т. е. $S(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | \mathbf{r})$. Кроме того, можно представить себе следующие два случая: имеются две конфигурации, состоящие из одинаковых материалов, а все размеры одной системы отличаются от соответствующих размеров другой в одно и то же число раз. Если характерные размеры системы 2 равны соответствующим размерам системы 1, умноженным на β , весовой фактор дается соотношением (заметим, что $\mu_2 = \mu_1$)

$$T_2/T_1 = \exp \left[- \beta \int_0^s \mu(s') ds' \right]. \quad (5.82)$$

В плоской геометрии характерным размером является толщина (для многозонной задачи следует рассматривать набор толщин). В других геометриях задача усложняется: изменение линейных размеров влечет изменение углов. Для большинства типов рассеяния это означает изменение энергии. Как правило, подобное изменение удается учесть включением энергетической зависимости в отношении весов. Может случиться, что изменение энергии в задаче 2 больше, чем в задаче 1. Поэтому в системе 2 окажется возможным протекание пороговых реакций, которые исключены в действительной истории. Такой тип изменений нельзя скорректировать никаким весовым фактором.

Попытки оценить изменения, являющиеся результатом замещения одного материала другим при условии, что возможны реакции различных типов, наталкиваются на аналогичную трудность. Е. С. Трубецкой* предложил следить за историей частицы в третьей конфигурации, содержащей оба материала. Для приведения результатов к любой из чистых систем можно использовать относительные весовые функции. Если на протяжении истории в материале A осуществляется реакция, протекание которой запрещено в материале B , весовая функция для системы B принимается равной нулю.

5.6.4. Вариационный метод Монте-Карло. В § 5.3 было показано, что решением сопряженного уравнения является оптимальная функция ценности, при использовании которой вычисления методом Монте-Карло осуществляются с нулевой дисперсией. Однако получить решение сопряженного уравнения не менее трудно, чем найти решение уравнения Больцмана. Поэтому высказанное утверждение не имеет практического применения. Кроме того, если бы функция $J(P)$ была известна, математическое ожидание $\langle f \rangle$ можно было бы вычислить в квадратурах в соответствии с равенством

$$\langle f \rangle = \int J(P) S(P) dP, \quad (5.83)$$

не прибегая к соотношению (5.6).

* Частное сообщение.

Сущность выбора функции ценности заключалась в отыскании приближенного решения $I(P)$ сопряженного уравнения, которое бы имело основные особенности функции $J(P)$ и могло бы быть использовано для модификации ядра K .

В основе видоизмененного метода [31] получения искомого ответа с нулевой дисперсией лежит использование стационарных выражений для $\langle f \rangle$. Равенство (5.6) можно переписать в виде

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(P) \chi(P) dP \cdot \int J(P) S(P) dP}{\int \chi(P) J(P) dP - \int \int \chi(P') K(P' \rightarrow P) J(P) dP dP'} \quad (5.84)$$

Выражение (5.84) устойчиво по отношению к малым, но совершенно произвольным отклонениям $\chi(P)$ и $J(P)$ от их точных значений. Если бы либо $\chi(P)$, либо $J(P)$ были известны, тогда соотношение (5.84) давало бы точную оценку. Таким образом, метод сводится к приближенному вычислению сопряженной функции, т. е. к нахождению $I(P)$, к численному (а возможно, и аналитическому) расчету определенного интеграла $\int J(P)S(P)dP$ и к последующей одновременной оценке методом Монте-Карло оставшихся двух интегралов в выражении (5.84) с использованием одной и той же нейтронной истории. В каждой точке столкновения без поглощения вычисляется вклад обоих интегралов. После окончания заданного числа историй оценивается среднее значение $\langle f \rangle$. Для набора необходимой статистики производится серия независимых оценок этого математического ожидания. Разумеется, если для оценки обоих интегралов используются одни и те же случайные числа, результаты не являются независимыми. Если бы $I(P)$ была равна точной функции ценности, обе оценки были бы совершенно одинаковыми. Коэффициент корреляции, являющийся в некотором смысле мерой стохастического подобия интегралов, предполагается равным единице, в силу чего статистические ошибки в оценке обоих интегралов должны быть одного порядка. Значит, ошибка в величине $\langle f \rangle$, вычисленной описанным способом, может быть на порядок меньше, чем ошибка в оценке каждого из интегралов.

Это не гарантирует, конечно, улучшения эффективности, поскольку является необходимостью в вычислении дополнительного интеграла. В частности, для сложных геометрий становится трудоемким расчет двойного интеграла по фазовому пространству в знаменателе выражения (5.84) даже при простом виде функции $I(P)$. Однако всегда имеется возможность вычислить интегралы способом случайной выборки или какой-либо искусственной выборки. В таких случаях эффективность метода будет, естественно, снижаться. Указанная процедура была использована для расчета доли поглощаемых нейтронов в данной области плоской решетки [31, 32]. Кроме того, проводился анализ двух взаимосвязанных задач: физического расчета реактора и результатов измерения нейтронного потока. Было найдено, что вариационный метод дает улучшение эффективности вычислительных схем.

§ 5.7. ЗАДАЧИ, СВЯЗАННЫЕ С ОЦЕНКОЙ РЕАКТИВНОСТИ

5.7.1. Классификация задач. Сосредоточим теперь внимание на задачах, связанных с расчетом конструктивных параметров ядерного реактора. Как отмечалось в гл. 1, подобные задачи можно разделить на два основных типа: задачи с фиксированным источником и задачи на собственные значения. Для второго класса задач требуется прежде всего вычислить скорость спада потока или постоянную времени системы, хотя обычно необходимо определить и некоторые другие характеристики собственного распределения. Выше уже обсуждалась возможность получения собственного распределения путем повторного слежения за поколениями нейтронов. В этом случае степень критичности будет определяться как отношение полных чисел нейтронов в последовательных поколениях. Реактивность наряду с другими параметрами можно также находить усреднением по стационарным распределениям. Тогда задача будет сводиться к задачам первого класса.

Итак, параметры ядерных реакторов можно вычислять как некоторые интегральные величины с использованием плотности столкновений, полученной методом Монте-Карло. Как правило, вклад различных областей системы и вклад частиц всех энергий оказывается более равномерным, чем в задачах, связанных с расчетом защиты. Другими словами, функция ценности в первом случае изменяется менее быстро. По этой причине смещение «аналоговых» процессов не является уже существенным* для генерации историй, за исключением, быть может, некоторых специальных задач. Пример одной из таких задач — расчет поглощения в небольших областях. Но для этого используется обычно иной подход, нежели излагаемый ниже.

Уменьшение дисперсии в задачах рассматриваемого в данном разделе типа остается важным фактором, но обычно соответствующие меры сводятся к сглаживанию (посредством расслоения) распределения источников и к выбору наилучшего вида оценки, которая определяется типом задачи и зависит от величины сечений (мы рассмотрим этот вопрос ниже). Стоит заметить, что для указанных целей наиболее усложненные схемы счета не являются обязательно наилучшими. Например, полную скорость поглощения в больших областях удобнее оценивать посредством счета актов поглощения на протяжении истории, нежели интегрировать поток (выраженный в терминах длины трека), умноженный на соответствующее сечение.

Существенным требованием в задачах, связанных с анализом термализации нейтронов, с расчетом резонансного поглощения и температурных коэффициентов реактивности, является детальное представление (в пределах экспериментальных погрешностей) сечений взаимодействия нейтронов с различными нуклидами. Ведь только в немногих исключительных случаях поведение сечений следует известному математическому закону. Обычно удобно выражать все сечения через энергию в определенных точках, причем число таких точек и интервалы между ними должны определяться скоростью изменения сечения с энергией. Эти данные следует хранить в памяти машины в таком виде, чтобы ими можно было быстро воспользоваться в процессе слежения. Для важного класса задач, связанных с определением реактивности в слабообогатенных урановых и плутониевых системах с водой (в которых поведение нейтронов существенно зависит от наличия резонансов в сечениях делящихся материалов и от величины сечений неупругих процессов в замедлителе), проблема хранения и записи ядерных данных становится трудноразрешимой.

В задачах на собственные значения интерес представляют только свойства нейтронов в собственных состояниях. Поэтому период «установления», в течение которого распределение нейтронов в фазовом пространстве трансформируется из предполагаемого начального распределения в стационарное, является как бы холостым машинным временем. Было предложено несколько способов уменьшения излишнего времени слежения. Они описаны в разд. 5.7.3.

Применение методов Монте-Карло непосредственно к расчету критических размеров сопряжено со значительными трудностями. Зато ответ на вопрос, находится ли система в подкритическом или в надкритическом состоянии, получить с помощью этих методов достаточно просто.

Общая идея всех методов расчета критических размеров сводится к следующему: в некотором диапазоне вычисляется реактивность как функция характерного линейного размера, а затем осуществляется интерполяция между промежуточными точками и экстраполяция к нулевой избыточной реактивности. Однако будет показано, что подгоняемый параметр весьма чувствителен к степени отклонения от собственного состояния, хотя это мало влияет на истинную реактивность системы. Подобные трудности объясняют относительно редкое применение методов Монте-Карло к решению указанного типа задач. Тем

* Было бы интересно проанализировать, до какой степени можно улучшить результаты физического расчета реактора, выбирая подходящую функцию ценности, трансформируя распределение источников и т. п. (см. § 5.3). Хотя ожидается, что улучшение эффективности не будет таким существенным, как при расчете защиты, все-таки стоило бы проанализировать эту задачу.

не менее есть надежда, что число таких расчетов со временем увеличится в результате расширения объема памяти и увеличения быстродействия вычислительных машин.

5.7.2. Задачи с внешним источником. Типы задач. Методы Монте-Карло использовались и используются для расчета конструктивных параметров ядерных реакторов в тех случаях, когда оказывается несправедливой диффузионная теория или когда ввиду сложной геометрии и других трудностей невозможно использовать различные приближения транспортного уравнения. Интересные задачи с внешним источником, для которых существуют подробные машинные программы, делятся на следующие категории.

1. Термализация нейтронов: расчет скорости поглощения тепловых нейтронов, потока тепловых нейтронов, скорости деления на тепловых нейтронах, коэффициента использования тепловых нейтронов, коэффициента самоэкранирования для тепловых нейтронов.

2. Замедление нейтронов в резонансной области: вычисление вероятности захвата эпитепловых нейтронов, вероятности избежать резонансного захвата, коэффициента деления на быстрых нейтронах.

3. Расчет температурных коэффициентов реактивности: оценка влияния доплер-эффекта и газовых зазоров на коэффициент диффузии и длину диффузии.

Термализация нейтронов. Оценка эффекта и анализ влияния теплового движения атомов замедлителя на поток тепловых нейтронов были впервые осуществлены в 1955 г. [33]. Ввиду отсутствия достаточной информации предполагалось, что скорости движения атомов подчиняются распределению Максвелла—Больцмана, а сечение рассеяния при нулевой температуре постоянно. Во избежание геометрических усложнений рассматривалась бесконечная однородная среда. Одной из характерных особенностей этой задачи было использование метода исключения, который позволяет делать правильный выбор между актами поглощения и рассеяния, доставляя в последнем случае нужную информацию о скорости атомов. Окончательные результаты представляли собой простое число актов поглощения и рассеяния в пределах каждой группы скоростей. Установили, что в области низких энергий нейтроны имели максвелловское распределение с некоторой эффективной температурой. Выше порога тепловой области энергий поведение потока нейтронов подчинялось закону $1/E$. Полученные данные хорошо согласуются с результатами расчета по методу Вигнера—Уилкинса для водорода и с результатами измерения спектра в воде [34]. Такого совпадения результатов расчета на основе модели свободного атома водорода и данных эксперимента следовало ожидать, поскольку принцип детального равновесия гарантирует для бесконечной среды с непоглощающим замедлителем установление максвелловского спектра тепловых нейтронов. Было также установлено, что спектр тепловых нейтронов в поглощающих замедлителях отличается от максвелловского. В свете имеющихся экспериментальных данных относительно сечений передачи энергии для медленных нейтронов это обстоятельство не вызывает удивления.

В настоящее время в программы вычислений методом Монте-Карло внесены усовершенствования, связанные с применением реалистических математических моделей для более правильного представления ядра рассеяния тепловых нейтронов. Например, для оценки вероятности неупругого рассеяния тепловых нейтронов на химически связанных ядрах в замедлителе применяются теперь многоосцилляторные модели: модель Нелкина для воды [40], модель Гоулдмана для полиэтилена [41] и др.

Программы вычислений методом Монте-Карло, которые начали создаваться еще в 1955 г., предназначены для решения задачи об оценке скорости активации тепловыми нейтронами в ячейках реакторных решеток с резко выраженными неоднородностями. Краткое описание программ, представленное фирмами «Вестингауз», «Дженерал Электрик» и «Юнайтед Ньюклар», включает изложение усовершенствований и усложнений, которые были внесены в эти программы для оценки вероятности захвата в гетерогенных системах.

Первая программа, составленная по заданию фирмы «Вестингауз», носит название TUT-T5 [35]. Она обеспечивает возможность одногруппового (по энергии) расчета скорости активации, усредненной по всем областям в двухмерной прямоугольной ячейке с квадратным сечением. Источники нейтронов считаются изотропными и равномерно распределенными в каждой области, уровень мощности источника произволен. Предполагается, что все элементы, за исключением водорода, рассеивают нейтроны изотропно в лабораторной системе координат. Кроме того, предполагается, что угловое распределение нейтронов, рассеянных на водороде, является линейной функцией косинуса угла рассеяния. Это ограничивает средний косинус угла рассеяния $\bar{\mu}$ пределами $0 \leq \bar{\mu} \leq 1/3$. Оценка по длине пробега, предложенная Герцелем и Калосом [2], дает возможность с хорошей точностью вычислять вероятность захвата нейтронов.

Вторая программа TRAM [36] решает ту же задачу, что и TUT-T5, но в 32-групповом приближении для областей в виде параллелепипеда.

Частицы источника выбираются из распределения нейтронов, являющегося результатом рассеяния на водороде нейтронов с энергией 100 эв. Рассеяние на водороде описывается пятью различными законами, соотносящимися друг с другом в разных пропорциях в пределах каждой из 32 энергетических групп. Такая модель обеспечивает хорошее совпадение результатов расчета спектра и длины диффузии в бесконечной среде с экспериментальными данными. В диапазоне энергий от 100 до 0,5 эв рассеяние на водороде считается изотропным в системе центра масс с закрепленным атомом рассеивателя. Полное сечение подбирается таким образом, что рассеянные нейтроны не могут иметь энергию меньше 0,96 кТ. При энергиях ниже 0,5 эв принимается во внимание тепловое движение рассеивающих протонов. В интервале между 0,5 и 0,005 эв ядро рассеяния аппроксимируется зависящей от номера группы комбинацией законов рассеяния на свободных атомах, изотропного рассеяния, рассеяния без обмена энергией в лабораторной системе координат и обратного рассеяния без обмена энергией*.

При энергиях ниже 0,005 эв ядро рассеяния аппроксимируется комбинацией, полученной на основе модели рассеяния на свободных ядрах и модели изотропного рассеяния без обмена энергией.

Интересной особенностью этой программы, обеспечивающей максимальную эффективность, является использование линейной комбинации обычной двоичной оценки (например, числа столкновений в некоторой конкретной области вне первоначально выбранного объема) и оценки длины пробега.

Программа TRAC [37], написанная для компьютера Philco-2000, служит для решения той же геометрической задачи, что и программа TUT-T5. Задача решается или в одногрупповом приближении или (в зависимости от исходных данных) перед группой тепловых нейтронов вводится еще область замедления. Снижение дисперсии осуществляется тем же способом, что и в программе TRAM. С помощью программы TRAC можно исследовать до 75 областей и до 99 различных композиций. Кроме того, можно вычислять скалярный поток в какой-либо точке ячейки. При анализе определенной композиции в одногрупповом приближении удастся существенно уменьшить дисперсию при расчете вероятности захвата. Метод, развитый Мейнардом, основан на теореме взаимности [38]. В соответствии с этим методом вычисляется соотношение между вероятностью захвата в конкретной области R_0 и вероятностями захвата во всех областях сопряженной задачи с единичным источником в R_0 . Достоинство этого метода состоит в том, что учитывается вклад каждого нейтрона данной сопряженной задачи в вероятность захвата в области R_0 . Однако для оценки вероят-

* Обратное рассеяние подобно изотропному в системе центра масс (с закрепленным атомом мишени) рассеянию на водороде с той лишь разницей, что падающие на мишень нейтроны имеют обратное направление. Этот искусственный прием дает возможность развить упрощенную модель, обеспечивающую хорошее согласие для первых двух сферических моментов ядра рассеяния на водороде.

ности захвата в других областях приходится решать новые сопряженные задачи.

При расчетах методом Монте-Карло по программе [39], разработанной фирмой «Вестингауз», можно исходить как из обычной многогрупповой системы транспортных уравнений, так из соответствующей многогрупповой системы сопряженных уравнений. В последнем случае уравнения преобразуются таким образом, чтобы можно было использовать двойную выборку по важности для понижения дисперсии.

Метод Мейнарда [38] может найти широкое применение при решении реакторных задач. Поэтому ниже мы изложим его.

В операторной форме транспортное уравнение имеет вид

$$L\varphi = S. \quad (5.85)$$

В соответствии с общим определением сопряженного оператора второе уравнение запишется как

$$L^+ \varphi^+ = S^+. \quad (5.86)$$

Нетрудно показать, что справедливо следующее соотношение:

$$(S^+, \varphi) = (S, \varphi^+). \quad (5.87)$$

На языке теории векторных пространств такая запись означает равенство скалярных произведений, или интегралов, взятых по всему фазовому пространству. Следовательно, если в качестве S^+ выбрать зависящее от энергии сечение реакции в рассматриваемой области, а всюду вне этой области положить $S^+ = 0$, то скорость реакции можно получить как результат вычисления либо (S^+, φ) , либо (S, φ^+) . В задачах, в которых требуется рассчитать поглощение в какой-то малой области, оценка величины (S^+, φ) может включать большую дисперсию, поскольку относительно малое число нейтронов будет пересекать данную область. Оценка с использованием сопряженной функции (S, φ^+) оказывается более эффективной, так как число нейтронов, дающих в нее вклад, в этом случае значительно возрастает. Программа MARC включает формулу оценки из программы TRAM, а расчет осуществляется с использованием прямой и сопряженной функций.

Физическая модель для программы MARC следующая: основная прямоугольная ячейка делится на $R (\leq 60)$ прямоугольных подобластей; интервал тепловых энергий делится на 36 энергетических групп; нейтроны вводятся в систему изотропно, их энергетический спектр имеет ступенчатый вид, а пространственное распределение задается как входное условие.

Вероятность того, что нейтрон j -й энергетической группы (с энергией E), имеющий направление Ω , после столкновения с ядром водорода в точке \mathbf{x} рассеется в направлении Ω' и попадет после рассеяния в i -ю энергетическую группу, определяется ядром

$$C_{H}^{i,j}(\Omega \rightarrow \Omega' | \mathbf{x}) = \frac{\sigma_j^{i,j}}{\sigma_{s,H}^j} \mu_{s,H}(\Omega \rightarrow \Omega' | \mathbf{x}) \quad (5.88)$$

$$(1 \leq i \leq 36).$$

Здесь σ^{ij} — элемент матрицы перехода, характеризующий вероятность рассеяния из группы j в группу i , причем

$$\sum_{i=1}^{36} \sigma^{i,j} = \sigma_{s,H}^j.$$

Величина $\sigma_{s,H}^j$ есть полное микроскопическое сечение рассеяния на водороде из группы j . Величина $\mu_{s,H}(\Omega \rightarrow \Omega' | \mathbf{x}) = \mu_{s,H}(\mathbf{x}) g(\Omega \rightarrow \Omega')$ представляет собой дифференциальное сечение рассеяния на водороде нейтронов j -й группы с изменением направления Ω на Ω' . Угловое распределение $g(\Omega \rightarrow \Omega')$ состоит из двух компонент, одна из которых изотропна, а вторая характеризуется преимущественным рассеянием вперед или назад.

Значительное расширение возможностей анализа тепловых систем методом Монте-Карло реализуется программой THERMOPILE [42, 43], развитой в 1965 г. Объединенной Ядерной Корпорацией (United Nuclear Corporation). Цель программы — обеспечить детальную информацию о спектральном распределении нейтронов вплоть до энергий несколько электрон-вольт в различных частях гетерогенной системы. Кроме того, с помощью этой программы оцениваются вероятности поглощения, рождения нейтронов, деления ядер в каждой рассматриваемой области и (или) для конкретных элементов в каждой энергетической группе результирующего спектра.

Программа допускает анализ 200 областей, состоящих из прямоугольных параллелепипедов, цилиндров, клиньев, сфер, усеченных конусов, ориентированных произвольным образом. Можно рассматривать до 32 различных сред и до 50 различных элементов (каждый из которых характеризуется своим атомным весом и своей температурой). Результирующее распределение по энергии рассчитывается в 100 узловых точках.

Эффективное доплеровское уширение сечений при температуре T вводится в измеренные при комнатной температуре T_0 величины сечений путем численного свертывания величины $v^2\sigma(v, T_0)$ с гауссовским ядром. При этом предполагается, что скорости ядер среды имеют распределение Максвелла—Больцмана, а $T \geq T_0$. Рассеяние на молекулах воды и других замедлителей описывается в рамках модели эффективного газа или в рамках многоосцилляторной модели. Табулирование результирующих сечений в зависимости от энергии осуществляется с переменным (по энергии) шагом, чтобы обеспечить детальное представление резонансных особенностей. Предполагается, что или нейтроны вводятся при асимптотической плотности замедления и имеют конкретное пространственно-угловое распределение или используются выходные данные программы UNC-SAM [12], на основе которой методом Монте-Карло вычисляются необходимые величины во всем диапазоне спектра деления выше тепловой области.

Формула для расчета потока является близкой к оптимальной комбинацией двоичного распределения и оценки для длины трека.

Пусть μS — расстояние (измеренное в длинах свободного пробега) вдоль направления полета от точки столкновения до границы области. Тогда можно показать, что:

1. Оценка длины трека дает меньшую дисперсию, чем двоичное распределение, при $\mu S < 1,255$.

2. Аналитическая формула оценки с нулевой дисперсией есть $(1 - e^{-\mu S})/\mu$.

3. Линейная суперпозиция s оценки длины трека s_1 и двоичной оценки s_2

$$s = as_1 + (1 - a)s_2$$

оптимальна при $a = \mu S e^{-\mu S} / (1 - e^{-\mu S})$.

Однако аналитическая оценка и s связаны с вычислением экспоненты при каждом столкновении вдоль длины трека. Это увеличивает вычислительное время часто до такой степени, что повышения эффективности уже не наблюдается. Максимальное снижение дисперсии, достижимое при линейной суперпозиции оценок, получается при расчете по программе THERMOPILE, в которой используется следующая аппроксимация a :

$$\tilde{a} = \frac{1}{1 + \mu S / 1,255} \cdot$$

Еще один подход к решению подобных задач, основанный на применении метода Монте-Карло, описан в работах [44—48]. Здесь стоит упомянуть о статистической модели, которая была применена Ротенбергом [44] для вычисления коэффициента теплового использования в квадратной решетке, образованной стержнями из обогащенного урана в воде. Каждой истории приписывалась своя весовая функция. Каждое столкновение в каждой среде приводило к уменьшению веса ввиду существования ненулевой вероятности поглощения в этой среде. Подсчитывалось изменение веса в каждой среде. После каждого столкновения

вес сравнивался с наперед заданной величиной W_c . Если он оказывался больше W_c , история продолжалась, если меньше — выбиралось случайное число ξ и сравнивалось с W_c . Если выполнялось неравенство $\xi > W_c$, история продолжалась с того места, где произошло последнее столкновение, но вес при этом увеличивался в $1/W_c$ раз. Когда вес снова становился меньше W_c , еще раз разыгрывалась «рулетка». Применение этой техники смещения описано в разд. 5.4.6.

Замедление нейтронов в резонансной области. Вычисление вероятности резонансного поглощения в реакторной решетке и оценка изменения этой величины в зависимости от температуры топливных стержней рассматривались многими исследователями как весьма интересная область применения методов Монте-Карло.

В 1955 г. Рихтмайер [49, 50] рассчитал методом Монте-Карло вероятность избежать резонансного захвата для шестиугольной реакторной решетки. Поглощение в U^{238} оценивалось для идеального случая: предполагалось, что брейт-вигнеровские резонансы просто накладываются на картину потенциального рассеяния, а интерференции при этом не наблюдаются. В качестве основного замедлителя был выбран водород.

Интересная особенность метода — модификация процедуры Монте-Карло, приводящая к уменьшению дисперсии. В начальный момент нейтрону приписывался вес $W = 1$ и учитывался лишь статистический характер столкновений, приводящих к рассеянию. Место следующего столкновения на пути нейтрона определялось с использованием только сечения рассеяния и после каждого столкновения оценивалось уменьшение веса, чем учитывалась вероятность поглощения. Серия из 10 000 историй дает вероятность резонансного поглощения с погрешностью около 2%.

Вычисление вероятности избежать резонансного захвата выполнялось различными методами для разных типов реакторных решеток с учетом детального хода полного сечения и сечения поглощения нейтронов.

Мортон [51, 52] описывает метод вычисления нейтронных сечений для тяжелых четно-четных ядер в резонансной области энергий (с учетом вклада p -волны) и метод оценки резонансного поглощения в решетке реактора в Колдер Холле (квадратная решетка, топливные стержни из естественного урана, замедлитель — графит). В дополнение к программе Рихтмайера [49], в соответствии с которой каждому нейтрону приписывается свой вес, получена более эффективная оценка резонансного поглощения методом счета «ветвящихся» столкновений.

Риф дает описание нескольких программ [53, 54], которые представляют собой развитие и усовершенствование метода Рихтмайера [49]. С помощью этих программ можно вычислять фермиевский возраст нейтронов, коэффициент размножения на быстрых нейтронах, вероятность резонансного поглощения и потоки нейтронов в конфигурациях различных геометрий. В программах использован прием подавления поглощения (см. разд. 5.4.6) и введения для компенсации соответствующей весовой функции. При любом столкновении вычисляется величина

$$P_{jk} = \nu(E) \mu_{jk}(E) / \mu_T(E)$$

для каждого изотопа. Здесь ν и μ_{jk} — среднее число нейтронов, освобождающихся при одном делении, и сечение деления изотопа k .

Регистрируется также сумма

$$\psi_k = \sum P_{jk} W,$$

взятая по всем столкновениям вплоть до рассматриваемого. Предполагается, что как только ψ_k достигнет первоначального веса* W_0 или окажется больше

* Из доклада Рифа как будто следует, что величина W_0 для каждой истории наперед задана. Если это так, т. е. если нет случайного выбора, то место рождения вторичных нейтронов (но не их число) регистрируется неправильно, оно оказывается смещенным в сторону более поздних столкновений.

него, осуществится акт деления. Тогда сразу же регистрируется положение нейтрона, ψ_k уменьшается в W_0 раз и история продолжается.

Положения рождения вторичных нейтронов накапливаются в запоминающем устройстве, откуда потом выбираются нейтроны с энергиями спектра деления. Эта процедура описана в Приложении А.

Вероятность резонансного захвата в решетке из плоскопараллельных слоев или в решетке со стержнями можно рассчитать с помощью программ, написанных Канделором и Гастом [55—57]. Ими составлена библиотека сечений, куда включены результаты расчета сечений с учетом доплеровского уширения для пяти нуклидов, каждый из которых имеет не больше 50 разрешенных резонансов, но может иметь еще и неразрешенные резонансы. Кроме того, допускается наличие пяти нерезонансных нуклидов с сечением захвата, изменяющимся по закону $1/v$, и с постоянным сечением рассеяния.

Гелбард и Спанье [62] обобщили недавно метод, основанный на принципе суперпозиции, применив его к расчету вероятности избежать резонансного захвата в тонких изолированных топливных стержнях. Идея их обобщения сводится к следующему: исходная задача метода Монте-Карло заменяется такой, в которой частицы начинают историю в области с топливом; предметом же вычисления является оценка скорости утечки нейтронов из топливного стержня.

Описания других доступных программ, предназначенных для решения подобных задач без использования каких-либо принципиально новых подходов, даны в работах [58—61].

Оценка температурного коэффициента реактивности. Изменения параметров реактора, обусловленные температурными колебаниями, можно оценить с помощью программ, описанных выше. Однако часто случается, что разница в значениях данного параметра, вычисленных для двух температур, имеет тот же порядок величины, что и ошибка в величине того же параметра при каждой температуре. Поэтому обычно реализуются модифицированные процедуры, посредством которых эффект небольших изменений параметра, обусловленный температурными колебаниями, удается оценить непосредственно и с гораздо большей точностью, чем при сравнении независимых результатов. Эти процедуры можно связать с двумя общими методами Монте-Карло, использованными Рихтмайером [49] для оценки влияния температуры на резонансное поглощение.

Первый из указанных методов основан на прямом методе Монте-Карло. В нем фигурирует то же множество псевдослучайных чисел, в силу чего истории в различных задачах оказываются почти одинаковыми (забегая вперед, скажем, что можно было бы использовать две согласованные во времени серии историй, если в одной из них использовать большее число случайных чисел, чем в другой). В каждой из задач считается число столкновений, в результате которых нейтрону удастся проскочить резонансную область энергий.

Во втором методе для расчета вероятности избежать резонансного захвата применяется техника коррелированных выборок, описанная в разд. 5.6.3. В этом разделе считалось, что все взаимодействия являются рассеивающими, и из распределения вероятности $e^{-\mu_s D}$ выбирались расстояния между столкновениями (μ_s — макроскопическое сечение рассеяния, предполагающееся не зависящим от энергии). Но после каждого пролета вес уменьшался в $e^{\mu_a D}$ раз (μ_a — макроскопическое сечение поглощения), чем учитывалась возможность поглощения. Если решать такую задачу при другой температуре, истории останутся прежними, а вес вдоль пути изменится. Усредняя изменение веса по всем историям, можно определить влияние температуры на вероятность избежать резонансного захвата.

Следует упомянуть о подобном, но более общем методе, развитом Олфтом [63] для оценки доплер-эффекта при неравномерном распределении температуры в топливных элементах. В основу метода положена следующая идея. Любой параметр реактора и его производную по какой-либо переменной, например по температуре, можно выразить через решение интегрального транс-

портного уравнения, представленное рядом Неймана. Если соотношение между историями в методе Монте-Карло и рядами Неймана установлено, задача оценки параметров реактора и их производных сводится к выбору надлежащей случайной переменной, зависящей от траекторий нейтронных историй.

Пусть P — шестимерный вектор фазового пространства. Тогда плотность нейтронов, претерпевающих столкновения в точке P , дается выражением

$$\psi(P) = \tilde{S}(P) + \int_{P'} K(P' \rightarrow P) \psi(P') dP', \quad (5.89)$$

где

$$\tilde{S}(P) = \int_{P''} S(P'') T(P'' \rightarrow P) dP'', \quad (5.90)$$

а $S(P)$ — плотность источников нейтронов; $T(P'' \rightarrow P)$ — вероятность того, что нейтрон, покинувший источник в точке P'' испытывает соударение в точке P ; $K(P' \rightarrow P)$ — вероятность того, что нейтрон, испытавший соударение в точке P' , претерпит следующее соударение в точке P .

Представление решения уравнения (5.89) в виде ряда Неймана получается как результат последовательных приближений, т. е.

$$\psi(P) = \tilde{S}(P) + \sum_{l=1}^{\infty} \psi_l(P), \quad (5.91)$$

где

$$\psi_l(P) = \int_{P_{l-1}} \dots \int_{P_0} K(P_{l-1} \rightarrow P_l) \dots K(P_0 \rightarrow P_1) \tilde{S}(P_0) dP_0 \dots dP_{l-1}. \quad (5.92)$$

Параметры реактора в общем случае можно представить в виде функционала

$$J(\alpha) = \int_P W(P, \alpha) \psi(P, \alpha) dP, \quad (5.93)$$

где α — некоторая переменная, от которой функция W и плотность столкновений ψ зависят параметрически. Например, если α — это температура, а $W(P, \alpha) = \mu_\alpha(P, \alpha) / \mu_T(P, \alpha)$, то $J(\alpha)$ есть число нейтронов, поглощенных в фазовом пространстве P при температуре α .

Выражение (5.93) можно записать в виде ряда Неймана

$$J(\alpha) = \sum_{l=0}^{\infty} J_l(\alpha), \quad (5.94)$$

где

$$J_0(\alpha) = \int_{P_0} W(P_0, \alpha) \tilde{S}(P_0, \alpha) dP_0, \quad (5.95)$$

а для $l \geq 1$

$$J_l(\alpha) = \int_{P_l} \dots \int_{P_0} W(P_l, \alpha) K(P_{l-1} \rightarrow P_l, \alpha) \dots K(P_0 \rightarrow P_1, \alpha) \times \\ \times \tilde{S}(P_0, \alpha) dP_0 \dots dP_l. \quad (5.96)$$

Прямой метод Монте-Карло для оценки величины $J(\alpha)$ состоит в наблюдении за историями N частиц от их рождения до смерти и в вычислении в каждой точке столкновения величины $W(P, \alpha)$, если точка столкновения принадлежит соответствующему фазовому пространству. Тогда

$$\frac{\overline{J(\alpha)}}{\tilde{S}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} W_{l,i}(P, \alpha). \quad (5.97)$$

Аналогично можно записать в виде ряда Неймана производную $J(\alpha)$ по α . Действительно,

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\partial J_l(\alpha)}{\partial \alpha}, \quad (5.98)$$

где

$$\frac{\partial J_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{P_0} \left[\frac{1}{W_0} \cdot \frac{\partial W_0}{\partial \alpha} + \frac{1}{\tilde{S}_0} \cdot \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial \alpha} \right] W_0 \tilde{S}_0 dP_0, \quad (5.99)$$

а при $l \geq 1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_l(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{P_l} \dots \int_{P_0} \left[\frac{1}{W_l} \cdot \frac{\partial W_l}{\partial \alpha} + \frac{1}{K_l} \cdot \frac{\partial K_l}{\partial \alpha} + \dots + \frac{1}{K_1} \cdot \frac{\partial K_1}{\partial \alpha} + \frac{1}{\tilde{S}_0} \cdot \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial \alpha} \right] \times \\ \times W_l K_l \dots K_1 \tilde{S}_0 dP_0 \dots dP_l. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Всюду использованы следующие обозначения:

$$W_l = W(P_l, \alpha); K_l = K(P_{l-1} \rightarrow P_l, \alpha); \tilde{S}_0 = \tilde{S}(P_0, \alpha).$$

Вычисление $\partial J(\alpha)/\partial \alpha$ реализуется аналогичным вычислению $J(\alpha)$ способом путем оценки в каждой точке столкновения величины

$$DJ_l = W_l \left[\frac{1}{W_l} \cdot \frac{\partial W_l}{\partial \alpha} + \frac{1}{K_l} \cdot \frac{\partial K_l}{\partial \alpha} + \dots + \frac{1}{K_1} \cdot \frac{\partial K_1}{\partial \alpha} + \frac{1}{\tilde{S}_0} \cdot \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial \alpha} \right] \quad (5.101)$$

и последующего вычисления величины

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} / \tilde{S} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} DJ_{l,i}. \quad (5.102)$$

Таким образом, оценки для $J(\alpha)$ и $\partial J(\alpha)/\partial \alpha$ получаются одновременно в результате суммирования частичных оценок W_l и DJ_l в каждой точке столкновения.

Другие приложения метода Монте-Карло, применяемые для оценки температурных эффектов, эффектов пустот и т. п., описаны в работах [52] и [64—68].

5.7.3. Задачи на собственные значения. При нахождении стационарной конфигурации и выборе параметров, удовлетворяющих условиям критичности, важное значение имеет возможность уменьшения так называемого холостого времени блуждания.

Пусть $N_0(\mathbf{x}, \omega, E)$ — собственная функция распределения нейтронной плотности в момент времени $t_0 = 0$, а $N(\mathbf{x}, \omega, E, t)$ — аналогичная функция, соответствующая моменту времени t . Тогда в силу определения критичности существует постоянная τ такая, что $N(\mathbf{x}, \omega, E, t) = N_0(\mathbf{x}, \omega, E) e^{t/\tau}$. В зависимости от знака $1/\tau$ система является подкритической ($1/\tau < 0$), критической ($1/\tau = 0$) или надкритической ($1/\tau > 0$).

Задача, связанная с проблемой критичности, считается решенной до конца, если найдены $N_0(\mathbf{x}, \omega, E)$ и τ . Однако часто при определении критических размеров или критической загрузки топлива интересуются только постоянной τ , а иногда только знаком этой постоянной.

Но можно следить за популяцией нейтронов не во времени, а от поколения к поколению. Скорость размножения нейтронов будет определяться на основании сравнения количеств нейтронов в двух последовательных поколениях.

Естественный путь решения такой задачи — начать с произвольного* распределения нейтронов и наблюдать параллельно за этим нейтронами или за

* Удобно, хотя и не обязательно, начать с нейтронов спектра деления. В этом случае будут известны их энергетические и угловые распределения. Тогда необходимо будет сделать только некоторые предположения о пространственном распределении, а иногда и распределении во времени таких нейтронов.

их «потомками». Таким образом, удастся получить распределение нейтронов в каждом поколении. Каково бы ни было начальное распределение, последующие в конечном итоге должны стремиться к собственному (или так называемому стационарному) распределению. После того как распределение стабилизируется, можно приступить к вычислению скорости изменения числа нейтронов в последовательных поколениях.

Время установления, в течение которого начальное распределение нейтронов в фазовом пространстве деформируется, превращаясь постепенно в стационарное, и есть холостое время блуждания. Методы снижения этого времени можно разделить на три категории.

1. Очевидно, чем ближе начальное распределение к собственному, тем меньше число поколений, за которыми необходимо следить до установления собственного распределения. Число этих поколений зависит от типа реактора или сборки. Например, для большого теплового реактора сходимостью будет очень медленной. Даже если нейтрон претерпевает много столкновений в течение поколения, вычислительное время, связанное с начальным этапом итераций, велико. Следовательно, в любом случае необходимо ускорить сходимость процесса. Начальное распределение можно получить или на основе независимых расчетов (в диффузионном или S_n -приближении) или на основе имеющихся экспериментальных результатов для подобных систем. Можно проводить предварительное вычисление методом Монте-Карло, если регистрируются места осуществления деления, выбранные из равновесного распределения. В любом методе полезно прибегать к расслоению положения источника с учетом характера симметрии конкретной системы.

2. Вычислительное время, связанное с переходом к равновесному состоянию, можно уменьшить, если на начальных стадиях использовать поколения с малым числом нейтронов. Выборку в любой момент времени (или на протяжении нескольких поколений) нетрудно увеличить, задавая v больше нормальной величины.

3. Метод, который наверняка ускоряет сходимость, основан на идее использования матрицы деления. Он был развит Муртоком [69] и Капланом [70]. Опишем в общих чертах соответствующую схему.

Процесс наблюдения за нейтроном от поколения* характеризуется ядром $M(\mathbf{r}', \mathbf{r})$. Это ядро определяет математическое ожидание числа нейтронов деления в некотором поколении, рожденных в единице объема около точки \mathbf{r} при условии, что в предыдущем поколении в точке \mathbf{r}' родился один нейтрон. Соответствующие количества нейтронов после $n - 1$ -го поколения и после n -го поколения связаны между собой соотношением

$$N_n(\mathbf{r}) = \int M(\mathbf{r}', \mathbf{r}) N_{n-1}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

Теперь предположим, что реактор разделен на пространственные области R_i ($i = 1, 2, \dots, I$). Пусть в области R_i мы начинаем следить за $N_{n,i}$ нейтронами деления n -го поколения; в результате оказывается, что в области R_j мы начнем следить за $N_{n+1,i,j}$ нейтронами следующего поколения. Математическое ожидание матрицы

$$M_{ij} = N_{n+1,i,j} / N_{n,i}$$

есть дискретное приближение ядра $M(\mathbf{r}', \mathbf{r})$. Оценки матрицы M_{ij} можно усреднить по последовательным поколениям (если количество областей R_i не слишком велико). Возможно, что таким образом удастся достичь статистической надежности прежде, чем установится равновесие при простом наблюдении

* Матрицу можно определить также, наблюдая за популяцией нейтронов в течение некоторого фиксированного промежутка времени. Метод, основанный на наблюдении за поколениями, проще и для обсуждения и для применения, так как в этом случае для неизменных систем необходима конкретизация только мест осуществления деления.

нии за нейтронами. Если это так, то оценка степени критичности дается наибольшим собственным значением матрицы M_{ij} независимо от скорости сходимости процесса популяции нейтронов. Соответствующий собственный вектор будет характеризовать относительное число нейтронов, рожденных в каждой области в условиях равновесного распределения. Оценка этого собственного вектора может быть использована для корректировки относительного числа нейтронов (методом расщепления или методом рулетки) и, следовательно, для ускорения сходимости простых распределений. Такая процедура влечет также положительный эффект подавления некоторых флуктуаций.

Элементы матрицы M зависят в какой-то степени от распределения числа делений внутри областей. Для достаточно большого количества областей, выбранных надлежащим образом из областей, содержащих топливо, этот эффект будет мал. Когда распределение в пределах каждой области достигает равновесия, собственные значения матрицы M , элементы которой вычисляются методом последовательных приближений, становятся точными. Следовательно, если при достаточно долгом блуждании число областей выбирается из условия компромисса между точностью аппроксимации ядра $M(r', r)$ и требованием хорошей статистики, разница в вычисленных параметрах оказывается ничтожной.

Как уже отмечалось выше, одним из параметров, характеризующих степень критичности, является постоянная времени τ . Однако ее вариации вблизи критического значения далеко не линейны. Это вызывает трудности при использовании указанного параметра для оценки критических размеров реактора. Выбранный для расчетов параметр должен меняться монотонно и предпочтительно линейно в зависимости от линейных размеров. Постоянная генерации нейтронов, определяемая как отношение полных чисел нейтронов в двух последовательных поколениях, удовлетворяет этому требованию. Но мы уже говорили, что обычно оценивают элементы матрицы M , а не число нейтронов, поскольку последняя величина весьма чувствительна к степени приближения к собственному состоянию. Ярким примером такой ситуации может служить оценка критичности активной зоны, окруженной толстым отражателем. Дело в том, что сравнительно быстрые нейтроны в активной зоне намного скорее достигают равновесия во времени, чем медленные нейтроны во внешних частях отражателя. Влияние неустановившегося режима в отражателе на степень критичности системы может быть ничтожным. Однако это может существенно изменять постоянную времени системы в целом. В подобных случаях надо подыскивать другой параметр, который имеет надлежащие свойства.

Паркер и Вудкок [8, 30] ввели параметры, которые особенно удобно использовать при рассмотрении систем, состоящих из двух различных частей, разделенных границей (например, из активной зоны и отражателя). Когда в системе наступает установившийся режим, то на каждый нейтрон, пересекающий границу в одном направлении, приходится в среднем P нейтронов, возвращающихся обратно; каждому из этих P нейтронов, в свою очередь, соответствует ожидаемое число нейтронов Q , пересекающих в конце концов границу в противоположном направлении. Система будет подкритической, критической или надкритической в зависимости от значения PQ . Если $PQ < 1$, система является подкритической, если $PQ = 1$ — критической и если $PQ > 1$ — надкритической. В случае системы «активная зона — отражатель» величина P есть альбеда отражателя, а Q — поверхностный коэффициент размножения активной зоны. Параметры P и $1/Q$ изменяются почти линейно в небольшом диапазоне изменения размеров активной зоны. Они мало подвержены влиянию отклонений от установившегося режима в тех областях системы, которые незначительно влияют на степень критичности.

Метод вычисления P и Q , предложенный Паркером, может быть назван методом пересечений. Ниже мы кратко изложим его.

Впуск нейтронов, имеющих спектр деления, осуществляется изотропно вблизи центра активной зоны. За этими нейтронами ведется наблюдение до тех пор, пока они не окажутся поглощенными или не попадут на некоторую фик-

сированную граничную поверхность. Затем продолжается наблюдение за нейтронами, попавшими в отражатель. Слежение за ними прекращается по мере их поглощения, вылета из системы или попадания на заданную граничную поверхность.

По окончании такого наблюдения описанная процедура повторяется в активной зоне. Последовательные пересечения границы в прямом и обратном направлениях регистрируются печатающим устройством. Опыт показывает, что отношение P/Q быстро стремится к своему асимптотическому значению. Таким образом, установившийся режим наступает после нескольких пересечений границы. Последующие пересечения могут быть использованы для улучшения оценок P и Q .

Для вычисления критического радиуса активной зоны, окруженной толстым отражателем из воды, где термализуется большое число нейтронов, был предложен модифицированный метод пересечений [8, 30].

Все изложенные методы преследовали цель уменьшения времени установления и, следовательно, снижения погрешности, обусловленной некоторыми отклонениями полученных распределений от стационарного распределения. Существует еще один источник погрешностей, связанный с выбором начального распределения. Метод расщепления, описанный в гл. 6, особенно полезен для уменьшения такой погрешности. Значительные усилия были затрачены на разработку метода снижения дисперсии, применимого к проблемам критичности.

Одна из основных трудностей, сопряженных с вычислениями методом Монте-Карло — необходимость предотвращения слишком быстрого увеличения или уменьшения числа нейтронов. Для преодоления этой трудности широко используются два метода.

Идея первого метода состоит в следующем. Нейтрону приписывается вес, который можно менять от поколения к поколению в процессе слежения. Например, вес после каждого столкновения можно получить умножением имеющегося веса на математическое ожидание числа вторичных нейтронов, рожденных в результате столкновения. Таким образом, понижается погрешность выборочного обследования, обусловленная появлением различного числа нейтронов после столкновения.

Второй метод можно назвать циклическим. В течение короткого промежутка времени t_0 наблюдают за небольшим числом нейтронов. Если к концу указанного периода число нейтронов больше, чем в начальный момент, осуществляется выборка для следующего цикла, причем число нейтронов в выборке равно первоначальному. Если число нейтронов в конце рассматриваемого промежутка времени меньше начального, некоторые частицы приходится использовать более одного раза в качестве частиц источника.

Такая процедура осуществляется затем с повторением многих циклов [71].

Общий принцип, присущий всем вычислениям методом Монте-Карло, — выполнять максимально возможное число операций аналитически для улучшения точности. Например, если получено собственное распределение $N(\mathbf{x}, \omega, E)$, то можно сделать выборку из этого распределения, проследить за выбранными нейтронами и непосредственно определить вторичное число нейтронов. Однако лучше вычислить аналитически математическое ожидание вторичного числа нейтронов в каждой точке вдоль направления рассеянного нейтрона. Тогда математическое ожидание числа вторичных нейтронов, вычисленное для i -го набора столкновений, будет оценкой популяции нейтронов в $(i + 1)$ -м поколении. Дисперсия при этом может быть уменьшена с помощью антитетической процедуры (см. разд. 5.6.2 и [10]). Оценка числа вторичных нейтронов выполняется не только вдоль одного фиксированного направления ω , но для всех возможных направлений ω с использованием соответствующей функции распределения вероятности для рассеяния на различные углы.

В ряде задач могут быть использованы метод русской рулетки, метод расщепления и процедура выборки по важности. Однако при решении задач,

связанных с вопросами критичности, нельзя категорически утверждать преимущество одного метода перед другими, как в случае проблем защиты.

В работах [8, 10, 30, 69, 71—78] можно найти примеры применения метода Монте-Карло к решению вопросов критичности системы.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ПОЛУЧЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН

Основной и необходимый этап вычисления методом Монте-Карло — получение случайных величин из данного распределения вероятности. В настоящем разделе дается краткое описание некоторых методов получения случайных величин. Особое внимание обращается на распределения, фигурирующие в задачах теории переноса.

Имеет смысл остановиться сначала на обсуждении некоторых случайных величин для одного хорошо известного распределения. Имеется в виду случайная переменная ξ , равномерно распределенная на интервале (0, 1).

В общем случае неудобно пользоваться существующими таблицами случайных чисел. Желательно получать эти случайные числа или заменяющие их переменные с помощью имеющихся машинных программ. Поскольку все современные машины работают в детерминистском режиме, получаемые результаты не могут быть истинно случайными. Вопрос о формировании «псевдослучайных» чисел в машине не входит в наши задачи. Мы отсылаем интересующихся этим читателей к двум недавно опубликованным отчетам [73, 74].

Найдено, что можно образовать случайные числа, приводящие к правильному ответу для многих моделей, на основе следующей схемы:

$$X_n = X_{n+1} \cdot a \pmod{m}; \quad \xi_n = X_n/m.$$

Здесь m — наибольшее целое число, с которым может оперировать машина, плюс единица. Величину a можно выбрать, используя формализм теории чисел, из условия обеспечения большого числа разрядов и малой последовательной корреляции. Большую помощь при таком выборе оказывают интуиция и приобретенные навыки. Следует отметить, что величины ξ_n характеризуются периодичностью в последних разрядах, так что можно использовать не более половины цифрового машинного слова. Кроме того, в некоторых задачах возникает серьезные осложнения из-за конечной длины машинных слов.

Вернемся теперь к вопросу формирования других случайных величин, предполагая, что ξ_n при желании можно получить. Обсудим, во-первых, задачу выбора одного из конечных чисел дискретного распределения вероятности p_i . Прежде всего запишем соотношение

$$P_r(0 \leq q_1 \leq \xi \leq q_2 \leq 1) = \int_{q_1}^{q_2} d\xi = q_2 - q_1.$$

Зафиксируем m и, выбрав ξ , найдем из

$$P_m = \sum_{i=1}^m p_i \leq \xi < P_{m+1}$$

или

$$P_m \leq \xi < P_{m+1}, \quad P_m = \sum_{i=1}^m p_i,$$

что m появляется с вероятностью P_m . Такая техника применяется при выборе одной из нескольких возможных реакций. В процессе подобной процедуры можно либо выбирать (по очереди) соответствующий тип ядер и затем реакцию, либо каждая альтернатива может рассматриваться как отдельное событие.

Аналогично можно выбирать альтернативные реакции (например, возбуждения различных дискретных уровней при неупругом рассеянии нейтро-

нов). Вероятности (или, лучше, накопленные вероятности P_m) следует получать на основе данных по ядерным сечениям и, может быть, табулировать их.

Во многих случаях приходится иметь дело с непрерывными распределениями. Такие распределения часто формируют, отображая $p_\xi = 1$ в другую функцию, заданную на другом интервале, например в функцию

$$x = g(\xi), \quad (\text{ПА.1})$$

где $g(\xi)$ — монотонная функция. Тогда функция плотности вероятности для новой случайной величины x будет определяться соотношением

$$p_x(x) = p_\xi(\xi) \left| \frac{d\xi}{dx} \right| = \left| \frac{d\xi}{dx} \right|. \quad (\text{ПА.2})$$

Если g — линейная функция ξ , то величина x равномерно распределена на некотором новом интервале. (Выбирая две или три независимые переменные, мы можем образовать случайные величины, равномерно распределенные в прямоугольнике или параллелепипеде соответственно.) Интегрируя обе части уравнения (ПА.2) по x , получаем

$$\int_{-\infty}^x p_x(x') dx' = \xi, \quad (\text{ПА.3})$$

$$\int_x^{\infty} p_x(x') dx' = \xi \quad (\text{ПА.3'})$$

соответственно для случаев возрастания и убывания $g(\xi)$. Если функция p_x задана, а интеграл (ПА.3) или (ПА.3') берется аналитически, то, обращая результирующее соотношение и получая x как функцию ξ , можно построить удобный метод формирования случайной величины. Интегрирование и обращение полученного после интегрирования выражения можно, конечно, выполнять численно. Это, в частности, приходится делать при использовании эмпирических данных. В таких случаях рекомендуется осуществлять необходимые расчеты заранее.

Для распределения e^{-x} (см. разд. 5.3.2), фигурирующего при нахождении оптической длины между двумя последовательными соударениями, интегрирование соотношения (ПА.3) дает

$$x = -\ln \xi.$$

Заметим, что поскольку $e^{-x_1} e^{-x_2} = e^{-(x_1+x_2)}$, можно после пересечения любой фиксированной границы выбирать новую величину x на основании распределения e^{-x} и продолжать наблюдение. Такая операция не обязательно является эффективной, но иногда она удобна.

Целый класс более общих методов известен под единым названием метода исключения (отбраковки). Сюда относится метод образования случайных величин, с помощью которых строятся все остальные случайные величины, если выполняются определенные критерии. Если эти критерии не выполняются, исходные случайные величины «отбраковываются», после чего цикл повторяется. И так до тех пор, пока заданные критерии не окажутся удовлетворенными.

Например, можно взять два независимых случайных числа ξ_1 и ξ_2 и предположить, что

$$0 \leq f(\xi) \leq 1 \quad \text{для} \quad 0 < \xi \leq 1.$$

Тогда, если $\xi_1 \leq f(\xi_2)$, в качестве случайной переменной следует использовать ξ_2 . Если же $\xi_1 > f(\xi_2)$, испытание следует повторить с новой парой ξ_1 и ξ_2 . Величина

$$P_r[\xi_1 \leq f(\xi_2) \leq 1] = f(\xi_2)$$

есть вероятность того, что испытание прошло успешно и ξ_2 выбрана в качестве случайной переменной. Тогда «эффективность», дается соотношением

$$\varepsilon = \int_0^1 f(y) dy,$$

а плотность распределения переменной ξ_2 , прошедшей испытание, определяется условием

$$p_2(\xi_2) = f(\xi_2)/\varepsilon.$$

Эффективность есть мера полезного использования вычислительного времени. Лучшей мерой является ожидаемое время, необходимое для достижения успеха.

Наиболее удобный метод, применяемый при решении задач переноса, был предложен Нейманом [79] для нахождения синуса и косинуса случайной угловой переменной. Пусть

$$x = 2\xi_1 - 1; \quad y = \xi_2.$$

Если $x^2 + y^2 \leq 1$, то можно положить

$$\cos \varphi = \frac{y^2 - x^2}{x^2 + y^2}; \quad \sin \varphi = \frac{2xy}{x^2 + y^2}.$$

В силу первоначального выбора x и y определяют случайную точку внутри прямоугольника, одна сторона которого вдвое больше другой. Для тех пар x, y , для которых выполняется условие $x^2 + y^2 \leq 1$, справедливы соотношения

$$\cos \varphi/2 = y/\sqrt{x^2 + y^2};$$

$$\sin \varphi/2 = x/\sqrt{x^2 + y^2}; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

Этот результат получен из известных соотношений для тригонометрических функций половинного угла. Положим также

$$\omega_3 = 1 - 2\xi_1;$$

$$\omega_1 = 1 - \omega_3^2 \cos \varphi;$$

$$\omega_2 = 1 - \omega_3^2 \sin \varphi.$$

Рис. 5П.1. Формирование направляющих косинусов ($\omega_1, \omega_2, \omega_3$) изотропного единичного вектора.

Тогда, если φ имеет равномерное распределение на интервале $(0, 2\pi)$, $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ суть направляющие косинусы изотропного единичного вектора. Такие переменные могут оказаться удобными при задании направления для изотропного источника (или для распределения рассеянных частиц в лабораторной системе координат). Метод иллюстрируется схемой, представленной на рис. 5П.1.

Можно сконструировать метод исключения для формирования случайной величины, распределенной в соответствии с формулой Кранберга [80], для энергии мгновенных нейтронов деления. Пусть

$$x = -\ln \xi_1; \quad y = -\ln \xi_2.$$

Если

$$-ax + (y - bx - b)^2 \leq 0; \quad a = 4,57257; \quad b = 1,06918,$$

положим

$$E = 1,99675x \text{ (Мэв)}.$$

Если приведенное выше неравенство не выполняется, выбирается новая пара (x, y) и цикл повторяется. Плотность распределения $p_f(x)$ тех x , которые удовлетворяют указанному неравенству, пропорциональна

$$e^{-x} \int_{-\sqrt{ax+bx+b}}^{\sqrt{ax+bx+b}} e^{-y} dy = e^{-(1+b)x} \operatorname{sh} \sqrt{ax}.$$

Заданные параметры определяют функцию плотности для E :

$$N(E) = 0,453 \exp(-E/0,965) \operatorname{sh} \sqrt{2,29E}.$$

При выбранных параметрах получается максимальная эффективность, равная 0,74.

Аналогичным методом можно выбирать величины E из ограниченного интервала, заключенного между E_1 и E_2 . Образова x , следует использовать в качестве распределения надлежащим образом обрезанную экспоненту. Метод иллюстрируется схемой, приведенной на рис. 5П.2.

По-видимому, ясно, что метод исключения можно применять к самым различным задачам. Вообще говоря, степень удобства и полезности метода зависит от искусства его изобретателя. Среди наиболее остроумных и полезных методов исключения можно отметить метод фон Неймана [79], сконструированный для экспоненциального распределения, и метод Кана [2], предложенный для распределения фотонов, рассеянных на свободных электронах, — распределения Клейна—Нишины. В книге Кана изложено множество таких методов.

Наконец, следует упомянуть о различных комбинациях нескольких случайных величин, выраженных в виде суммы, произведения и т. п. Такие комбинации могут приводить к очень интересным результатам. Например, если

$$y = -\ln(\xi_1 \xi_2 \dots \xi_{n+1}),$$

то

$$p_y = y^n \exp(-y)/n!.$$

Плотность $(E/T^2) \exp(-E/T)$ (где T — заданная температура, а E — энергия) обычно используется для приближенного описания в рамках статистической модели распределения энергии нейтрона после неупругого рассеяния. Распределение xe^{-x} фигурирует в задачах термализации.

Метод исключения можно непосредственно применять при формировании многомерных распределений, т. е. распределений, зависящих от нескольких переменных. Например, из некоторого распределения выбирают две случайные переменные x и y . Затем проверяют, удовлетворяется ли условие, связывающее эти переменные с другими случайными величинами. Если да, то с помощью x и y строят остальные случайные величины, если нет — цикл повторяют.

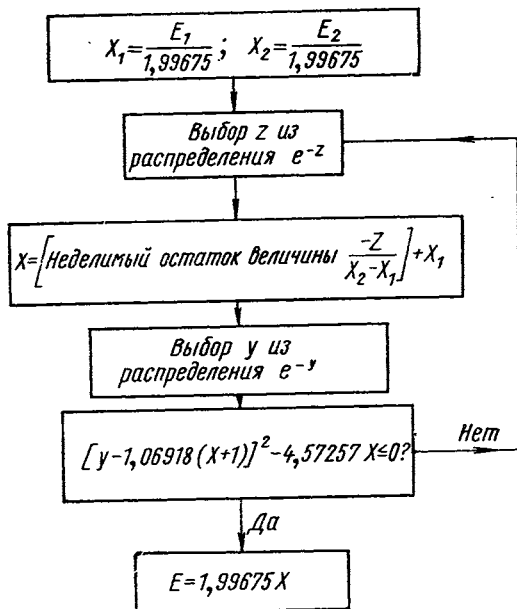


Рис. 5П.2. Формирование случайной величины E , распределенной в соответствии со спектром деления на интервале (E_1, E_2) .

Можно также многомерное распределение последовательно свести к одномерному. Запишем тождество

$$p(x, y) = \left[\int p(x, y) dy \right] \left[\frac{p(x, y)}{\int p(x, y) dy} \right]. \quad (\text{ПА.4})$$

Теперь можно выбрать x из безусловного распределения

$$m_x = \int p(x, y) dy,$$

а затем найти y из второго сомножителя в правой части (ПА.4), считая x фиксированным. Этот метод весьма удобен при наличии эмпирической информации о многомерных случайных величинах.

Существуют также другие методы образования случайных величин. Например, нетрудно сделать выборку из распределения

$$p(x, y) = \exp(-x^2 - y^2)/\pi \quad (-\infty < x, y < \infty),$$

положив

$$r = (-\ln \xi)^{1/2}; \quad x = r \cos \varphi; \quad y = r \sin \varphi.$$

Здесь величина φ равномерно распределенная на интервале $(0, 2\pi)$. Это удобный метод для выбора двух независимых случайных переменных из распределения Гаусса, с которым приходится иметь дело в задачах термализации нейтронов. Действительно, скорости атомов предполагаются случайными векторами с распределением

$$e^{-V^2} V^2 d(\cos \theta) d\varphi,$$

где $V \geq 0$ — скорость атома, углы θ и φ определяют направление скорости в сферических координатах ($-1 \leq \cos \theta \leq +1$), $0 \leq \varphi \leq 2\pi$). В декартовых координатах это распределение будет записываться в виде

$$e^{-(x^2 + y^2 + z^2)} dx dy dz.$$

Таким образом, x, y, z суть случайные переменные, выбранные из распределения Гаусса. Применяя описанный выше метод, можно выбрать сначала x и y , а затем z и x' . Величину x' оставляют в памяти на случай, если программу придется вызывать еще раз.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ

Как мы видели, для кусочно-однородной области определение места следующего столкновения сводится к решению уравнения

$$\sum_{j>0} \mu_j s_j = \lambda$$

для фиксированного значения λ . Индекс служит для обозначения номера области, через которую проходит трек частицы после последнего столкновения (или после вылета из источника); μ_j — коэффициент ослабления в области j ; s_j — длина трека в области j . Положим

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \omega s_n', \quad (\text{ПБ.1})$$

где \mathbf{r}_0 — радиус-вектор точки последнего столкновения, ω — направление полета после этого столкновения. Тогда s_n' — есть решение одновременно уравнения (ПБ.1) и уравнения

$$f_n(x, y, z) = 0,$$

являющегося уравнением n -й поверхности:

$$f_n(x_0 + \omega_1 s'_n, y_0 + \omega_2 s'_n, z_0 + \omega_3 s'_n) = 0, \quad (\text{ПБ.2})$$

причем

$$s_j = s'_j = s'_{j-1}, \quad s'_0 = 0.$$

Но можно уравнение (ПБ.2) записать в другом виде:

$$f_n(x_{n-1} + \omega_1 s_n, y_{n-1} + \omega_2 s_n, z_{n-1} + \omega_3 s_n) = 0. \quad (\text{ПБ.3})$$

Последним уравнением пользоваться удобнее, так как получается некоторая экономия числа расчетных операций. В этом случае необходимо только рассматривать точки пересечений трека с поверхностями, ограничивающими данную область.

Мы будем исходить в наших рассуждениях именно из уравнения (ПБ.3), хотя это отнюдь не является существенным условием. Итак, пусть все геометрические области пронумерованы и отдельно пронумерованы все поверхности. Желательно, чтобы каждая поверхность характеризовалась своими числовыми параметрами, затабулированными в соответствии с номером поверхности. Можно также задать топологические соотношения, приписав каждой области (объему) номера тех поверхностей, которые ее ограничивают, и, кроме того, связав с каждой областью и с ограничивающей ее поверхностью характеристики примыкающей к ней области. Такая информация будет, конечно, избыточной, но она помогает ускорить процесс блуждания. Для удобства при программировании можно также разделить этапы решения уравнения поверхности и перехода к следующей точке пересечения с поверхностью.

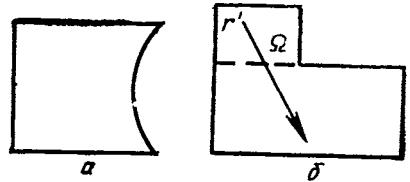


Рис. 5П.3. Линейчатая развертывающаяся на плоскость поверхность (а), нелинейчатая поверхность (б).

Составить такую общую программу нелегко (особенно если она предназначена для описания существенно различных конфигураций). Но если использовать вспомогательные программы, составленные для более простых частных случаев, можно построить все-таки достаточно полную геометрическую схему.

Если все области выпуклые (т. е. если прямая линия, соединяющая любую пару точек внутри области, целиком лежит в этой области), тогда искомая величина s_n есть наименьшее положительное (не нулевое) расстояние между точками пересечения с поверхностями, ограничивающими область.

Требование выпуклости можно опустить, когда соответствующая часть поверхности есть линейчатая развертывающаяся на плоскость поверхность (рис. 5П.3, а). Если это не так (рис. 5П.3, б), необходимо иметь дополнительные тесты для исключения лишних пересечений с продолжением поверхности (пунктирная линия на рис. 5П.3, б). Конечно, логически напрашивается мысль, что подобные конфигурации надо разбивать на более мелкие области, каждую из которых можно считать выпуклой.

Предположим, что все указанные условия выполнены и что все поверхности являются поверхностями второго порядка. Тогда уравнение

$$f_n(x_{n-1} + \omega_1 s_n, y_{n-1} + \omega_2 s_n, z_{n-1} + \omega_3 s_n) = 0 \quad (\text{ПБ.3})$$

есть квадратное уравнение относительно s_n , которое можно записать в виде

$$\alpha s_n^2 + 2\beta s_n + \gamma = 0. \quad (\text{ПБ.4})$$

Здесь α , β , γ зависят от параметров функции f_n и от точки $(x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1})$. Уравнение (ПБ.4) нетрудно решить. Однако стоит проанализировать, имеет ли оно вообще положительные корни, меньшие заданного $s' > 0$, не находя самого решения.

1. Если $\alpha\gamma < 0$, существует единственный положительный корень s_n , причем если $\gamma (\alpha s'^2 + 2\beta s' + \gamma) < 0$, то $s_n < s'$.

2. Если $\beta^2 > \alpha\gamma > 0$ и $\beta\alpha < 0$, существуют два положительных корня. Один из них меньше s' , если либо $\gamma (\alpha s'^2 + 2\beta s' + \gamma) < 0$, либо $\gamma (\alpha s'^2 + 2\beta s' + \gamma) > 0$, но $\beta (\beta + \alpha s') < 0$.

Можно положить сначала $s' = \lambda/\mu$, т. е. считать s' равным расстоянию, проходимому в гомогенной среде. Последовательно исследуя пересечения с поверхностями, можно найти $s_n < s'$ и в дальнейших испытаниях заменить s' найденной величиной s_n .

Поверхности с двумя ветвями (например, гиперболоиды и конусы) изучать труднее, если требуется выделить только одну ветвь. Нужны дополнительные исследования для исключения лишней ветви.

Отметим, наконец, что отлаживать такие программы, может быть, даже труднее, чем их писать, так как для отладки необходимы сложные логические тесты.

Помимо обычной внутренней проверки, нужной для такого рода вычислительных программ, можно составить более общую программу-тест. Предположим, что конфигурация разбита на области R_k . Пусть точка \mathbf{r}_i выбрана в области R_i , а точка \mathbf{r}_j — в области R_j . Можно положить для всех областей $\mu = 1$ и вычислить $\lambda = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $\omega = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/\lambda$, а затем начать следить за треком, берущим начало в точке \mathbf{r}_i и имеющим направление ω . Если в результате процесса исчерпывания λ координаты окажутся в непосредственной близости от точки \mathbf{r}_j (в области R_j), такой трек можно считать подходящим. После этого надо выбрать для теста другую пару $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ в различных областях. Если в каждой области R_i обследовано максимально возможное число точек \mathbf{r}_i (например, методом случайного выбора) и если такому обследованию подвергнуты все пары областей, то многие ошибки, допущенные при программировании и внесенные во входные данные, окажутся выявленными.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- a_i — постоянная спада мощности источника в области i ($S_i = C_i e^{-a_i r}$)
- $C(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega | \mathbf{r})$ — ядро столкновений
- E — энергия
- $F(E)$ — энергетическое распределение частиц источника
- $f(P)$ — вклад частицы в точке P в оцениваемую величину
- $\langle f \rangle$ — математическое ожидание оцениваемой величины
- $g(\Omega \rightarrow \Omega')$ — вероятность рассеяния с изменением направления Ω на Ω'
- $I(P)$ — функция ценности частицы в точке P
- $J(P)$ — функция, характеризующая плотность частиц, попавших после данного соударения в точку P и испытавших затем ряд последовательных столкновений вплоть до поглощения или утечки из системы
- $K(\mathbf{r}', E', \Omega' | \mathbf{r}, E, \Omega)$ — функция, характеризующая вероятность рассеяния из точки $P' = (\mathbf{r}', E', \Omega')$ в точку $P = (\mathbf{r}, E, \Omega)$
- $M(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ — математическое ожидание числа нейтронов деления, рожденных в единице объема около точки \mathbf{r} , обусловленных нейтроном деления, родившимся в точке \mathbf{r}'
- M_{ij} — оценка ожидаемого числа нейтронов деления, рожденных в области j , при условии, что в предыдущем поколении в области i родился один нейтрон
- N — общее число прослеженных историй
- N_A — ядерная концентрация вещества типа A
- $N(P)$ — полное число частиц, попавших после рассеяния частицы в точке P' фазового пространства в любую точку фазового пространства
- $N(E)$ — дифференциальный энергетический спектр
- $N(x, E, \omega, t)$ — собственное распределение плотности нейтронов в момент времени t
- $N_i(t)$ — число нейтронов в области i в момент времени t (имеющих любые энергии и летящих в любом направлении)
- $P(\mathbf{r}, E, \Omega)$ — точка фазового пространства с координатами (\mathbf{r}, E, Ω)
- $P_A(P)$ — вероятность поглощения в точке P

- p_s — вероятность рассеяния
 R_i — i -я область
 $\mathbf{r}(x, y, z)$ — радиус-вектор
 r — радиальная переменная в сферических координатах
 S_M — максимальное расстояние, которое может пройти частица своего пути пролета в данной области
 $S(\mathbf{r}, E, \Omega)$ — плотность источников
 S_0 — по определению $S_0 = \int I(P)S(P)dP$
 S_{ij} — доля плотности модифицированного источника нейтронов, соответствующая i -й области и j -й энергетической группе
 s — переменная расстояния
 $T(s)$ — функция плотности вероятности
 $T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}|E', \Omega')$ — транспортное ядро, характеризующее вероятность того, что частица испытает рассеяние в точке \mathbf{r} при условии, что после предыдущего рассеяния в точке \mathbf{r}' она имела энергию E' и двигалась в направлении Ω'
 T — абсолютная температура
 T_0 — комнатная температура (в градусах Кельвина)
 t — время
 V — объем
 v — скорость частицы
 $W(P)$ — весовая функция частицы в точке P
 ζ — фактор расщепления
 Λ — сумма средних длин свободного пробега в гетерогенной области
 λ — дополнительная длина свободного пробега на последнем отрезке траектории; число средних длин свободного пробега между точками столкновения в однородной области
 μ, μ_T — полный макроскопический коэффициент ослабления
 μ_0 — параметр, используемый в экспоненциальном преобразовании
 μ_{ij} — параметр, используемый в экспоненциальном преобразовании, для частицы в сферическом слое i в пределах j -й энергетической группы
 $\mu_i(E)$ — макроскопический коэффициент ослабления в сферическом слое i для частицы с энергией E
 μ_{tr} — эффективный макроскопический коэффициент ослабления
 $\underline{\mu}$ — средний косинус угла рассеяния
 μ_s, μ_a — макроскопические сечения рассеяния и поглощения соответственно
 $\mu_{s,H}(\Omega \rightarrow \Omega'|x)$ — дифференциальное сечение рассеяния на водороде в точке x с изменением направления Ω на Ω' для нейтронов j -й энергетической группы
 ν — коэффициент размножения нейтронов
 ξ — случайная величина, равномерно распределенная на интервале $(0, 1)$
 $\sigma_{iA}(E)$ — макроскопическое сечение реакции типа i в веществе A для нейтронов с энергией E
 σ — стандартное отклонение
 σ_H^j — микроскопическое сечение рассеяния на водороде для нейтронов j -й энергетической группы
 $\sigma(v, T_0)$ — микроскопическое сечение рассеяния частиц со скоростью v при комнатной температуре T_0
 τ — постоянная роста или спада нейтронной плотности:
 $N(x, \omega, E, t) = N_0(x, \omega, E)e^{t/\tau}$
 $\Phi_j(\mathbf{r})$ — поток частиц j -й энергетической группы в точке \mathbf{r}
 $\chi(\mathbf{r}, E, \Omega)$ — плотность столкновений
 $\Psi(P)$ — плотность частиц, претерпевающих столкновения в точке P
 $\Omega(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ — направляющий вектор
 ω — косинус угла между направлением полета и радиусом-вектором точки нового столкновения
 ω — направление

ЛИТЕРАТУРА

1. Мауэне А. J. Monte Carlo Methods for Solving Neutron Problems. AWRE-0-18/55 (July 1955).
2. Кахн Н. Applications of Monte Carlo. AECU—3259 (April 19, 1954).
3. Гоертзел Г., Калос М. Н. Monte Carlo Methods in Transport Problems. In

- «Physics and Mathematics», Vol. II of Progress in Nuclear Energy, Series I, p. 315, Pergamon Press, New York (1958).
4. Cashwell E. D., Everett C. J. Monte Carlo Method for Random Walk Problems. Pergamon Press, 1959.
 5. Meyer H. A. (ed.) Symposium of Monte Carlo Methods. John Wiley and Sons, March 1954.
 6. Spanier J. Monte Carlo Methods and Their Application to Neutron Transport Problems. WAPD—195 (July 1959).
 7. Kalos M. H. Monte Carlo Lectures, Part I to IV. Notes by J. Celnik, United Nuclear Corporation, Phys./Math. 1671, 1789, 1792, 1871 (1960).
 8. Parker J. B., Woodcock E. R. Monte Carlo Criticality Calculations. Progress in Nuclear Energy, Ser. 4, 4, 435 (1961).
 9. Spanier J. A Unified Approach to Monte Carlo Methods and an Application to a Multigroup Calculation of Absorptions of Absorption Rates. SIAM REVIEW, 4, No. 2, 115 (April 1962).
 10. Hammersley J. M., Handscomb D. C. Monte Carlo Methods. Methuen's Monographs on Applied Probability and Statistics. London, 1964.
 11. Wendel J. G. Lectures on Monte Carlo. University of Michigan.
 12. Eisenman B., Nakache F. R. UNC—SAM: A FORTRAN Monte Carlo System for the Evaluation of Neutron or Gamma Ray Transport in Three Dimensional Geometry. UNC 5093 (August 31, 1964).
 13. Irving D. C. et al. 05R, A General Purpose Monte Carlo Neutron Transport Code ORNL—3622 (February 1965).
 14. Goldstein H. Fundamental Aspects of Reactor Shielding. Addison—Wesley Publishing Co., 1959, p. 245.
 15. Preston M. A. Physics of the Nucleus. Wesley Publ. Co., 1962.
 16. Kalos M. H. Importance Sampling in Monte Carlo Shielding Calculations—Neutron Penetration through Thick Hydrogen Slabs. NSE, 16, 227—234 (June 1963).
 17. Beach L. A., Theus R. B. Stochastic Calculations of Gamma Ray Diffusion. Wiley, New York, 1956.
 18. Leimdörfer M. On the Transformation of the Transport Equation for Solving Deep Penetration by the Monte Carlo Method. Trans. of Chalmers Univ., Gothenburg, Sweden, No. 286 (1964).
 19. Leimdörfer M. On the Use of Monte Carlo Methods for Calculating the Deep Penetration of Neutrons in Shields. Trans. of Chalmers Univ., Gothenburg, Sweden, No. 287 (1964).
 20. Leimdörfer M. On the Use of Monte Carlo Methods for Solving Gamma Radiation Transport Problems. Nucleonik, Band 6, Heft 1 (Februar 1964).
 21. Leimdörfer M. A Monte Carlo Method for the Analysis of Gamma Radiation Transport from Distributed Sources in Laminated Shields. Nucleonik, Band 6, Heft 2 (März 1964).
 22. Liedtke R. A., Steinberg H. A. A Monte Carlo Code for Gamma Ray Transmission through Laminated Slab Shields. WADC—TR—58—80 (April 1958).
 23. Wells M. B. Monte Carlo Multilayer Slab Geometry Shielding Code C—18. FZK—134—3 (December 1961).
 24. Kalos M. H. A Monte Carlo Calculation of the Transport of Gamma Rays. NDA—56—7 (July 31, 1956).
 25. Allen F. J. A New Monte Carlo Method for Solving Neutron and Gamma Ray Transport Problem. BRL—MR—1135 (April 1958).
 26. Kalos M. H. On the Estimation of Flux at a Point by Monte Carlo. NSE, 16, 111 (1963).
 27. Steinberg H. A. Generalized Quota Sampling. NSE, 15, 142 (1963).
 28. Hammersley J. M., Morton K. W. A New Monte Carlo Technique: Antithetic Variates. Proc. Camb. Phil. Soc., 52, 449 (1956).
 29. Hammersley J. M., Mouldon J. G. General Principles of Antithetic Variates. Proc. Camb. Phil. Soc., 52, 476 (1956).
 30. Parker J. B. Monte Carlo Methods for Neutronic Problems. In «Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations» (edited by L. Fox). Pergamon Press, 1962.
 31. Nakache F. R. Variational Monte Carlo Calculations of Thermal Utilization Factors and Neutron Density Depressions in Foils. Thesis Columbia, 1962.
 32. Nakache F. R., Kalos M. H., Goldstein H. Variational Monte Carlo Calculations of Flux Depression in Foils. Trans. Amer. Nucl. Soc., 5, No. 1, 32.
 33. Cevoyou et al. Effect of Moderator Temperature upon Neutron Flux in Infinite Capturing Medium. ORNL—2081 (1958).
 34. Weinberg A., Wigner E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. The University of Chicago Press, 1958, p. 336. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
 35. Spanier J. et al. TUT—T5. A Two Dimensional Monte Carlo Calculation of Capture Probabilities for the IBM—704. WAPD—TM—125 (November 1959).
 36. Martino M. A., Stone W. W. A Monte Carlo Thermal Neutron Code for the IBM—704. KAPL—2039 (June 9, 1959).

37. Berwind H. J., Spanier J. TRAC—1 A Monte Carlo Philco—2000 Program for the Calculation of Neutron Capture Probabilities. WAPD—TM—229 (March 1961).
38. Maynard C. W. An Application of the Reciprocity Theorem to the Acceleration of Monte Carlo Calculations. Nucl. Sci. Engng, 10, 97 (1961).
39. Gelbard E. M. et al. MARC—A Multigroup Monte Carlo Program for the Calculations of Capture Probabilities. WAPD—TM—273 (May 1962).
40. Nelkin M. S. Scattering of Slow Neutrons by Water. Phys. Rev., 119, 741 (1960).
41. Goldman D. T. Inelastic Scattering of Thermal Neutrons. Naval Reactors Physics Handbook, Vol. 1, p. 289 (1964).
42. Nakache F. R., Kellman S. THERMOPILE—An Advanced Monte Carlo Program for the Evaluation of Thermal Assemblies. United Nuclear Corporation (Unpublished).
43. Nakache F. R., Kellman S. Operating Experience with UNC—THERMOPILE, An Advanced Monte Carlo Program for the Evaluation of Thermal Assemblies. Proceedings of the National Topical Meeting on Reactor Physics in the Resonance and Thermal Regions, San Diego, February 1966, Vol. I, p. 395, M.I.T. Press (1966).
44. Rotenberg A. et al. A Monte Carlo Calculation of Thermal Utilization. NYO—7976 (January 15, 1958).
45. Schaefer G. W., Parkyn D. M. A Monte Carlo Study of Thermal Utilization Factor and Diffusion Area: Gas Cooled Graphite Moderated Lattices. P/310, Geneva Conference, 1958.
46. Kubik R. N. Monte Carlo Calculation of Neutron Absorption in a Square Lattice BAW—154 (March 1961).
47. Brown H. D. A Monte Carlo Study of Neutron Thermalization. AECU—3758 (1957).
48. Högberg T. Monte Carlo Calculation of Neutron Thermalization in a Heterogeneous System. Actiebölaged Atomenergi, Stockholm, June 1959.
49. Richtmyer R. D. Monte Carlo Study of Resonance Escape in Hexagonal Reactor Lattices. NYO—6479 (May 1, 1955).
50. Richtmyer R. D. Proceeding of Brookhaven Conference on Absorption of Neutrons in Nuclear Reactors. Brookhaven National Laboratory, p. 82 (1956).
51. Morton K. W. Доклад P/19 на Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958.
52. Morton K. W. A Monte Carlo Study of the Resonance Absorption and its Temperature Variation in a Square Uranium—Graphite Lattice. AERE—R2929 (1959).
53. Rief M. An IBM—704 Monte Carlo Code to Calculate Fast Fission Effects in Homogeneous and Heterogeneous Systems. BNL 647 (T—206) (January 1, 1961).
54. Rief M. MOCA 2 — A Multipurpose Monte Carlo Code for Fast Effect Calculations. Trans. Amer. Nucl. Soc., 6, 12 (June 1963).
55. Candelore N. R., Gast R. C. RECAP 1 — A Monte Carlo Program for Estimating Epithermal Capture Rates in Slabs. WAPD—TM—407 (October 1963).
56. Candelore N. R., Gast R. C. RECAP 2—A Monte Carlo Program for Estimating Capture Rates in Rods Arrays. WAPD—TM—247 (April 1964).
57. Candelore N. R., Gast R. C. RECAP 3 — A Monte Carlo Program for Estimating Epithermal Capture Rates in Rectangular or 60° Parallelogram Geometry. WAPD—TM—437 (1964).
58. Schneider H. et al. A Monte Carlo Study of Resonance Escape Probability in Heterogeneous Slab Lattices Containing Resonant Absorbers and Scatterers. NASA TN D—1184 (April 1962).
59. Daniels R. A. REPLICA, A Monte Carlo Code to Calculate Resonance Capture in a Lattice of 19-Rod Hexagonal Clusters. CUNA—130 (May 1962).
60. Blaine R. A. TYCHE, A Monte Carlo Slowing Down Code. NAA—SR—7357 (June 30, 1962).
61. Blake J. P. J. Resonance Integral Calculations for High Temperature Reactors. AEEW—R—25 and ADD (February 1960).
62. Gelbard E., Spanier J. Use of the Superposition Principle in Monte Carlo Resonance Escape Calculations. Trans. Amer. Nucl. Soc., 7, 259 (November 1964).
63. Olhoeft J. E. The Doppler Effect for a Non-uniform Temperature Distribution in Reactor Fuel Elements. WCAP—2048 (July 1962).
64. Matthes W. Monte Carlo Calculations of the Nuclear Temperature Coefficient in Fast Reactors. Third Symposium on Reactor Theory, CONF—139—1; EUR—309e (April 1963).
65. Beele J. R. Monte Carlo Research Series. Two Experiments on Void Gap Effects in a One Dimensional Heterogeneous System. DC—58—5—97 (1958).
66. Cocchi M., Di Cola G. Effect of Measurements Errors on the Extrapolated Radius and Height Calculations for a Cylindrical Reactor. EUR—1624e (1964).
67. Fillmore F. L. Applications of Monte Carlo Calculations of SGR Reactors. Amer. Nucl. Soc. Topical Meeting Nuclear Performance Power Reactor Cores, San Francisco, September 1963 (CONE—360—7).
68. Curlee N. J., Jr., Ondis L. A. The Use of Correlated Sampling in Monte Carlo Calculations of Changes in Thermal Absorption. Trans. Amer. Nucl. Soc., 7, 288 (November 1964).

69. Morton K. W. Criticality Calculations by Monte Carlo Methods. AERE T/R 1903, Harwell, 1956.
70. Kaplan E. L. Monte Carlo Methods for Equilibrium Problems in Neutron Multiplication. UCLR 5275—T (1958).
71. Davis D. H. Criticality-size Calculations for Neutron Systems by the Monte Carlo Method. UCLR 6707 (December 12, 1961).
72. Kinney W. E. et al. Application of Monte Carlo Computational Techniques to the Study of Fast Critical Assemblies. ORNL—3499, Vol. 1, p. 77 (1964).
73. Frank - Каменетский A. D. Application of the Monte Carlo Method of Multigroup Reactor Calculations. Atom. Energy. (USSR), **16**, 119 (February 1964) (in Russian). (См. на русском языке: Франк - Каменецкий А. Д. Применение метода Монте-Карло для многогруппового расчета реактора. «Атомная энергия», **16**, 119, 1964.)
74. Bouquet G. et al. Use of the Monte Carlo Method for the Determination of the Critical Volumes of a Cylinder. Academie des Sciences, Comptes Rendus, **246**, 1382 (1958) (in French).
75. Davis D. H. A Monte Carlo Calculation of Equilibrium Neutron Distributions and Multiplication Rates. UCRL—5530 (April 1959).
76. Goad W., Johnston R. A Monte Carlo Method for Criticality Problems. Nucl. Sci. Engng., **5**, 371 (1959).
77. Hull T. E., Dobell A. R. SIAM REVIEW, **4**, 230 (1962).
78. Allard, Dobell, Hull. JACM, **10**, 131 (1963).
79. Householder A. S., Forsythe G. E., Germond H. H. eds. Monte Carlo Method. NBS Applied Mathematics Series, **12**, 6 (1951).
80. Cranberg et al. Fission Neutron Spectrum in U^{235} . Phys. Rev., **103**, 662 (1956).
81. Spielberg D. ATHENA — A System of FORTRAN Programs for Radiation Transport and Heating Calculations in Complex Reactor Geometries. UNC Report, NASA CR—54905 (1966).

Глава 6

РАСЧЕТЫ КИНЕТИКИ РЕАКТОРА

Г. Флэтт

(Корпорация по производству вычислительных машин I.B.M.)

§ 6.1. ВВЕДЕНИЕ

Под расчетами кинетики подразумеваются такие расчеты, с помощью которых описываются переходные процессы в ядерном реакторе. Эти процессы изменения плотности нейтронов возникают вследствие возмущений, связанных, например, с неисправностями в органах регулирования или с обесточиванием в системе охлаждения. В любом из этих случаев имеет место изменение коэффициента размножения или реактивности. Мы будем рассматривать процессы длительностью от нескольких миллисекунд до нескольких минут.

Если изменение пространственного распределения потока за рассматриваемый промежуток времени незначительно, то реактор может быть наиболее просто описан с помощью модели, в которой он предполагается однородным. Использование такой модели приводит к так называемым «стандартным» уравнениям кинетики, которые являются системой нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. При первом знакомстве создается впечатление, что эти уравнения могут быть легко решены с помощью обычных вычислительных приемов. Однако при попытке получить решение с помощью вычислительной машины возникают определенные трудности. Основной трудностью является необходимость использовать очень мелкий шаг по времени.

В некоторых реакторных системах нельзя пренебречь пространственными эффектами. В подобных случаях задача становится значительно более сложной. Математическая модель описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных. Эти уравнения содержат все проблемы численного решения более простой модели и, кроме того, появляется значительное количество новых проблем, связанных с более сложным характером задачи.

Первоочередная цель данной главы состоит в обсуждении численных способов, используемых в настоящее время как для решения пространственно-независимой, так и для решения пространственно-зависимой задачи.

Мы подробно обсудим природу обычно возникающих трудностей и укажем способы борьбы с ними. Будут также обсуждены некоторые практические задачи, связанные с применением таких способов при проведении расчетов на ЭВМ.

§ 6.2. ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕЗАВИСИМАЯ КИНЕТИКА

6.2.1. Вывод уравнений. Вывод простейших уравнений, описывающих поведение реактора во времени, основан на предположении о том, что реактор является однородным и что все нейтроны составляют одну энергетическую группу. Запишем уравнения баланса для плотности нейтронов и для концентрации изотопов, излучающих запаздывающие нейтроны (предшественников запаздывающих нейтронов) [1]:

$$\frac{dN}{dt} = v [\nu \Sigma_f - \Sigma_a - DB^2] N - v\beta \nu \Sigma_f N + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i + S_0; \quad (6.1)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = v\beta_i \nu \Sigma_f N - \lambda_i C_i \quad (i = 1, 2, \dots, G); \quad (6.2)$$

$$\beta = \sum_{i=1}^G \beta_i. \quad (6.3)$$

Здесь v — среднегрупповая скорость нейтронов; G — число групп запаздывающих нейтронов; β_i — доля запаздывающих нейтронов i -й группы; λ_i — константа распада предшественника запаздывающих нейтронов i -й группы; N — плотность нейтронов; C_i — концентрация ядер предшественника запаздывающих нейтронов i -й группы; S_0 — плотность внешних источников нейтронов; β — суммарная доля запаздывающих нейтронов; ν — среднее число нейтронов, возникающих в одном акте деления; Σ_f — сечение деления; Σ_a — сечение поглощения; D — коэффициент диффузии; B^2 — геометрический параметр.

Записанные выше уравнения можно также вывести, исходя непосредственно из уравнения Больцмана и не делая предположения об однородности реактора [10]. Независимо от вывода из написанных выше уравнений можно получить две эквивалентные системы уравнений (выбор системы уравнений в каждом конкретном случае зависит от способа управления):

$$k_{eff} = \frac{\nu v \Sigma_f}{v (\Sigma_a + DB^2)}, \quad (6.4)$$

$$k_{ex} = \frac{v (\nu \Sigma_f - \Sigma_a - DB^2)}{v (\Sigma_a + DB^2)}, \quad (6.5)$$

$$l = \frac{1}{v (\Sigma_a + DB^2)}. \quad (6.6)$$

Здесь k_{eff} — эффективный коэффициент размножения; k_{ex} — избыточный коэффициент размножения ($k_{eff} = 1 + k_{ex}$) и l — эффективное время жизни нейтрона. Подставив эти выражения в уравнения (6.1) и (6.2), можно написать

$$\frac{dN}{dt} = \frac{k_{ex} N}{l} - \frac{k_{eff} \beta N}{l} + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i + S_0$$

или

$$\frac{dN}{dt} = \frac{[k_{ex}(1-\beta)-1]}{l} N + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i + S_0 \quad (6.7)$$

и

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{\beta_i}{l} (1 + k_{ex}) N - \lambda_i C_i \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.8)$$

Несколько иной подход основан на следующих определениях:

$$\rho = \frac{v (\nu \Sigma_f - \Sigma_a - DB^2)}{v \nu \Sigma_f}, \quad (6.9)$$

$$\beta_i = \frac{v \beta_i \nu \Sigma_f}{v \nu \Sigma_f}, \quad (6.10)$$

$$\Lambda = \frac{1}{v \nu \Sigma_f}. \quad (6.11)$$

Через ρ обозначена реактивность. Уравнения (6.1) и (6.2) принимают вид

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} N + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i + S_0, \quad (6.12)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{\beta_i N}{\Lambda} - \lambda_i C_i \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.13)$$

В основе большинства программ по кинетике реакторов, написанных к настоящему моменту, лежит либо система (6.7)—(6.8), либо система (6.12)—(6.13). В таких программах либо l , либо Λ считаются обычно постоянными. Если управление реактором производится с помощью перемещения топлива без изменения поглощения, то l фиксированно, а Λ меняется. В этом случае первая группа уравнений предпочтительнее.

При численном решении обеих систем возникают весьма сходные проблемы. В первом случае k_{ex} является обычно функцией времени, а также иногда функцией так называемых переменных обратной связи. Во втором случае функцией аналогичных переменных является ρ . Первая система уравнений несколько сложнее, так как содержит переменные коэффициенты в уравнении для предшественников (хотя это и не вызывает каких-то серьезных трудностей). Поэтому мы будем использовать в дальнейшем вторую систему уравнений. Правда, в примере, приведенном в отчете о программе AIROS [2], обращено внимание на существенные трудности, которые могут встретиться, если модель, описываемая уравнениями (6.12) и (6.13), рассматривается безотносительно к какой-либо определенной задаче.

В этом примере рассматривается переход подкритического реактора с одного уровня на другой при ступенчатом изменении реактивности. Согласно уравнениям (6.12) и (6.13) отношение потоков нейтронов до и после изменения реактивности равно

$$\rho_{до}/\rho_{после}$$

в то время как правильный результат

$$(k_{ex})_{до}/(k_{ex})_{после}$$

Так как

$$\rho = k_{ex}/k_{eff},$$

то ошибка в отношении потоков определяется множителем

$$(k_{eff})_{после}/(k_{eff})_{до}$$

Если, например, $\rho_{до} = -10$ долл, а $\rho_{после} = -0,5$ долл, то [см. (6.15) при $\beta = 0,007$] получается относительная ошибка, равная 1,07; соответствующая ошибка в величине мощности равна 7%.

Введем следующие определения:

$$f_i = \beta_i/\beta \sum_{i=1}^G f_i = 1, \quad (6.14)$$

$$r = \rho/\beta, \quad (6.15)$$

$$C_i = \frac{\beta_i}{\Lambda \lambda_i} W_i. \quad (6.16)$$

Здесь r — полная реактивность, измеренная в долларах; W_i — нормированная концентрация запаздывающих нейтронов. Уравнения (6.12) и (6.13) можно переписать теперь следующим образом:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} \left[(r-1)N + \sum_{i=1}^G f_i W_i \right] + S_0, \quad (6.17)$$

$$\frac{dW_i}{dt} = \lambda_i (N - W_i) \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.18)$$

Уравнения (6.17) и (6.18) будут положены в основу всех последующих рассуждений.

Предположим, что при $t = t_0$ известны величины $N [= N(t_0) = N_0]$ и $W_i [= W_i(t_0) = W_{i0}]$. Полную реактивность будем обычно записывать в виде r или $r(t)$, вместо того чтобы записывать ее точно как функцию N или переменных обратной связи (таких, как температура, объем пустот и пр.).

6.2.2. Аналитические методы. Точное решение уравнений кинетики найдено только для сравнительно простых зависимостей реактивности от времени. Практическая польза от этих расчетов весьма ограничена, однако некоторые результаты могут быть использованы при анализе точности численных расчетов.

Мгновенное изменение реактивности. При постоянном значении реактивности решение может быть легко найдено классическими методами. Мы детально обсудим это частное решение, так как оно составляет основу большинства расчетных программ. Некоторые из полученных результатов будут затем использоваться в разделах по численным методам. Примером программ может служить программа SNACK [3], основанная на более ранней программе Аргонской лаборатории [4]. Хотя влияние запаздывающих фотонейтронов [5] было принято во внимание, мы не станем в дальнейшем обсуждать этот вопрос, так как он не вносит существенных усложнений. Итак, имеем систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} \left[(r_0 - 1)N + \sum_{i=1}^G f_i W_i \right] + S_0, \quad (6.19)$$

$$\frac{dW_i}{dt} = \lambda_i (N - W_i) \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.20)$$

Будем решать эту систему с помощью преобразования Лапласа. Пусть $\mathcal{L}\{N(t)\} = n(s)$ и $\mathcal{L}\{W_i(t)\} = w_i(s)$. Тогда из уравнений (6.19) и (6.20) получим

$$sn(s) - N_0 = (\beta/\Lambda) \left[(r_0 - 1)n(s) + \sum_{i=1}^G f_i w_i(s) \right] + S_0/s, \quad (6.21)$$

$$sw_i(s) - W_{i0} = \lambda_i [n(s) - w_i(s)], \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.22)$$

Комбинируя эти уравнения, можно написать

$$n(s)g(s) = p(s) + S_0/s, \quad (6.23)$$

где

$$g(s) = s - (\beta/\Lambda) \left\{ (r_0 - 1) + \sum_{i=1}^G \frac{f_i \lambda_i}{s + \lambda_i} \right\}, \quad (6.24)$$

$$p(s) = N_0 + (\beta/\Lambda) \sum_{i=1}^G \frac{f_i W_{i0}}{s + \lambda_i}. \quad (6.25)$$

Особенно важную роль играют корни уравнения $g(s) = 0$. Всего имеется $G + 1$ корней, и ввиду того что производная

$$g'(s) = 1 + (\beta/\Lambda) \sum_{i=1}^G \frac{f_i \lambda_i}{(s + \lambda_i)^2}$$

не может обратиться в нуль ни при каком значении s , совпадающем с корнем функции $g(s)$, все корни $g(s)$ различны.

Корни $g(s)$ можно найти графически, рассматривая пересечение графика функции

$$H(s) = s \left[\frac{\Lambda}{\beta} + \sum_{i=1}^G \frac{f_i}{s + \lambda_i} \right]$$

и прямой $r = r_0$. На рис. 6.1 качественно изображено соотношение между корнями. Всего имеется G отрицательных корней, близких к значениям λ_i . Если величина r_0 положительна, то наибольший корень положителен, а если отрицательна, то наибольший корень отрицателен.

Решение уравнения (6.19) имеет вид

$$N(t) = \sum_{j=1}^{G+1} (A_j + B_j) e^{s_j t} + C, \quad (6.26)$$

где

$$A_j = p(s_j)/g'(s_j), \quad (6.27)$$

$$B_j = S_0/(s_j g'(s_j)), \quad (6.28)$$

$$C = - \sum_{j=1}^{G+1} B_j. \quad (6.29)$$

В наиболее простом случае, когда источники отсутствуют ($S_0 = 0$), через небольшой промежуток времени (около $1/\lambda_1$ сек)

$$N(t) \approx A_1 e^{s_1 t}.$$

Если величина r_0 положительна, то $s_1 > 0$ и поток нейтронов возрастает в «е» раз за время, равное $1/s_1$ сек. Этот промежуток времени называется установив-

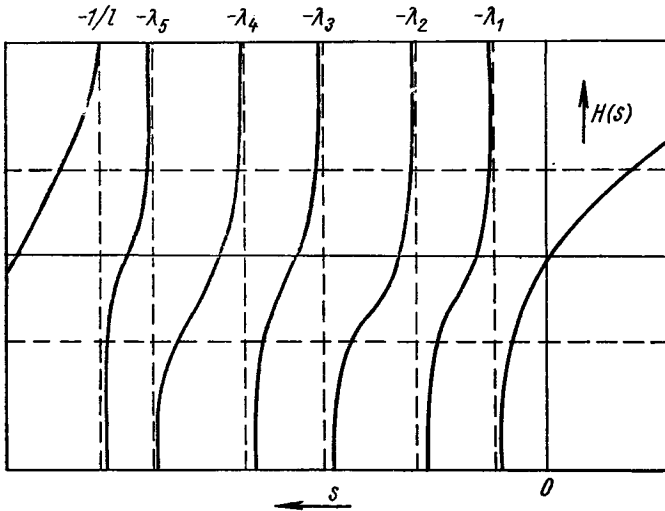


Рис. 6.1. Качественная зависимость H от s .

шимся периодом реактора. Подобным же образом при $r_0 < 0$ поток нейтронов убывает в «е» раз за тот же самый промежуток времени.

При расчетах существенные трудности встречаются только при определении корней. В программе SNACK был использован метод Ньютона—Рафсона [6]. Определенные трудности возникали там только в том случае, если нуль функции $g(s)$ был близок к полюсу этой функции. Значения корней, полученные в контрольных расчетах, совпадали со значениями, полученными с помощью программы SNACK, с точностью до пяти значащих цифр. Однако необходимо также убедиться, что и окончательные результаты вычислены с нужной точностью. Правильность расчетов удобно проверять с помощью соотношения

$$\sum_{j=1}^{G+1} A_j = N_0, \quad (6.30)$$

которое обеспечивает сохранение равновесия концентрации предшественников для каждой группы запаздывающих нейтронов, т. е.

$$\frac{dW_i}{dt} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.31)$$

Вывод соотношения (6.30) сам по себе является интересным упражнением.

С помощью программы SNACK могут быть проделаны различные вспомогательные расчеты для описания поведения реактора, который в течение некоторого времени имеет неизменную мощность. При этом прежде всего необходимо определить начальные условия для уравнений, описывающих группы запаздывающих нейтронов. С помощью этой программы может быть вычислено время, необходимое для перехода с данного уровня мощности на более низкий, а также проделаны некоторые аналогичные расчеты.

Расчетные программы, основанные на выписанных выше уравнениях, могут быть весьма удобными и требовать небольших затрат времени, так как значения $N(t)$ вычисляются только в требуемые моменты времени. В большинстве случаев совершенно необоснованным ограничением является требование изменения реактивности через постоянные временные промежутки.

Другие временные зависимости изменения реактивности. Сметс [7] рассмотрел решение уравнений кинетики реактора с помощью преобразования Лапласа для более общих форм изменения реактивности:

$$k_{ex} = k_0 + \gamma t, \quad (6.32)$$

$$k_{ex} = k_0 - k_2 \exp(-\gamma t), \quad (6.33)$$

$$k_{ex} = k_0 - 1/\gamma t \quad (\gamma > 0). \quad (6.34)$$

Эта работа явилась продолжением и завершением более ранних трудов Уоллача [8], Уилкинса [9] и других [10]. Следуя подходу Сметса, можно проинтегрировать уравнения кинетики для любых кусочно-аналитических функций, составленных из выписанных выше функций. Однако нахождение численного решения сопряжено с трудностями, так как оно выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию даже в случае одной группы запаздывающих нейтронов. В случае нескольких групп решение еще более сложно.

6.2.3. Численные методы. Аналоговые машины. Выше мы видели, что при решении уравнений кинетики определенные трудности встречаются даже тогда, когда реактивность r является простой функцией времени. В энергетических реакторах выделение тепла вызывает изменения в замедлителе и, следовательно, в реактивности. Реактивность обычно зависит от таких переменных обратной связи, как температура, объем пустот и пр. Эти величины, в свою очередь, описываются системой линейных и нелинейных дифференциальных уравнений, для решения которых требуются численные методы. Для получения приближенных решений таких уравнений обычно используются аналоговые машины. Однако в последнее время для анализа кинетики реакторов, так же как и во многих других задачах, где прежде были незаменимы аналоговые машины, с возрастающим успехом используются цифровые машины. В одной из недавних работ [11] был проведен анализ основных преимуществ цифровых машин, связанных с автоматизацией программирования, увеличением скорости счета, автоматизацией графического изображения результатов. Эти преимущества охватывают такие аспекты, как стоимость программирования и отладки, продолжительность и стоимость полного анализа, легкость изменения входных параметров и форма вывода результатов. Интересные обсуждения привели к заключению, что цифровые машины лучше отвечают перечисленным требованиям, чем аналоговые.

Возможно, что наиболее важным доводом против исключительного использования аналоговых машин является увеличение сложности используемых моделей. Модель реактора с двумя каналами (каждый из которых состоит из трех аксиальных и трех или четырех радиальных частей) и с шестью группами запаздывающих нейтронов, в которой рассматриваются спад потока и температура, а также изменение коэффициента плечочной теплопроводности, требует аналоговой машины, содержащей около 200 усилителей [12]. Такая модель еще сравнительно груба, и может оказаться необходимым дальнейшее увеличение числа усилителей, функциональных генераторов и пр. Следует добавить, что если бы даже в распоряжении имелось все необходимое оборудо-

вание, то получение с его помощью решения было бы чрезвычайно трудным делом ввиду сложности электронно-механических схем. Для цифровых машин, использующих численные методы, развитые в последние годы, подобных ограничений не существует.

С другой стороны, наиболее важные возражения против использования цифровых машин связаны с трудностью выполнения расчетов за разумные промежутки времени, в то время как узкая специализация аналоговых машин позволяет проводить расчеты за приемлемое время. Использование цифрового метода часто не позволяло в прошлом рассчитать весь переходный процесс за разумное время, однако теперь эти трудности преодолены по крайней мере для пространственно-независимых расчетов кинетики.

Устойчивость. Чтобы понять природу вычислительных трудностей и причины того, почему прежние методы либо оказывались непригодными, либо требовали чрезвычайно больших затрат расчетного времени, полезно детально рассмотреть простой пример. Некоторое упрощенное представление о расчете системы управления реактора можно получить, рассмотрев следующую простую задачу.

Будем искать численное решение системы

$$\frac{1}{v} \cdot \frac{dN}{dt} = -N + 2, \quad (6.35)$$

$$N(0) = 1. \quad (6.36)$$

Аналитическое решение этой системы имеет вид

$$N(t) = 2 - e^{-vt}. \quad (6.37)$$

Мы видим, что это решение имеет асимптотическое значение, равное 2, и что величина v определяет скорость убывания переходного члена в выражении (6.37). В некоторых системах v может быть порядка от 10^3 до 10^6 . В таких системах $N(t)$ принимает значения, близкие к асимптотическому, почти мгновенно.

Вообще можно ожидать, что при применении любой численной схемы интегрирования до окончания переходного периода следует пользоваться возможно более мелкими шагами, а затем резко увеличивать шаги интегрирования. Рассмотрим этот вопрос несколько подробнее не только для того, чтобы убедиться в ошибочности сделанного предположения, но также и для того, чтобы на простом примере продемонстрировать два типа встречающихся трудностей.

Предположим, что при $t = t_n$ с помощью некоторого метода получено точное значение $N(t_n)$:

$$N(t_n) = 2 - \varepsilon, \quad (6.38)$$

где ε — некоторая положительная величина. За время между $t = t_n$ и некоторым значением $t > t_n$ величина решения изменится менее чем на ε . Представляется поэтому разумным использовать такую простую схему, как метод Эйлера [13], т. е.

$$\bar{N}(t_{n+1}) = \bar{N}(t_n) + \Delta t N'(t_n), \quad (6.39)$$

где $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ и $\bar{N}(t_n)$ — приближенное значение $N(t_n)$. В этом методе новое значение плотности нейтронов при t_{n+1} определяется с помощью уже известного значения функций при t_n и наклона кривой в этой точке. Согласно уравнению (6.35) соотношение (6.39) может быть записано в следующем виде:

$$\bar{N}(t_{n+1}) = \bar{N}(t_n) + v\Delta t [2 - \bar{N}(t_n)]. \quad (6.40)$$

Если выбрать $v = 10^3$ и $\Delta t = 1$, то будем иметь

$$\left. \begin{aligned} \bar{N}(t_{n+1}) &= 2 - \varepsilon + 10^3 \varepsilon; \\ \bar{N}(t_{n+2}) &= 2 - \varepsilon + 10^3 \varepsilon + 10^3 (\varepsilon - 10^3 \varepsilon) = \\ &= 2 - \varepsilon (1 - 2 \cdot 10^3 + 10^6); \\ \bar{N}(t_{n+3}) &= 2 - \varepsilon (1 - 2 \cdot 10^3 + 10^6) + 10^3 \varepsilon (1 - 2 \cdot 10^3 + 10^6) = \\ &= 2 - \varepsilon (1 - 3 \cdot 10^3 + 3 \cdot 10^6 - 10^9). \end{aligned} \right\} \quad (6.41)$$

Выбор $\Delta t = 1$ был сделан исходя из того, что решение медленно меняется и фактически является монотонным. Тем не менее мы видим, что ошибка была внесена уже на первом шаге и затем увеличивалась на каждом последующем шаге. Легче понять источник этой ошибки, если преобразовать уравнения (6.37) и (6.40). Соотношение (6.37) запишем для $t = t_{n+1}$:

$$N(t_{n+1}) = 2 - e^{-v t_{n+1}} = 2 - e^{-v t_n} e^{-v \Delta t} = 2 - [2 - N(t_n)] e^{-v \Delta t}. \quad (6.42)$$

Уравнение (6.40) может быть переписано в виде

$$\bar{N}(t_{n+1}) = 2 - [2 - \bar{N}(t_n)] (1 - v \Delta t). \quad (6.43)$$

Сравнение уравнений (6.42) и (6.43) показывает, что сделанное нами численное приближение заключается в аппроксимации $e^{-v \Delta t}$ выражением $(1 - v \Delta t)$. Мы и рассчитывали, разумеется, получить лишь приближенный результат, однако при выбранных значениях Δt и v мы получили уж слишком плохое приближение. Более того, если $|1 - v \Delta t| > 1$, то на каждом шаге ошибка меняет знак и увеличивается по абсолютной величине. Таким образом, для устойчивости численного счета необходимо потребовать, чтобы $\Delta t < 2/v$. С другой стороны, этого условия недостаточно для получения точного решения. Чтобы достаточно точно аппроксимировать $e^{-v \Delta t}$ выражением $(1 - v \Delta t)$ (т. е. чтобы погрешность обрезания была мала), необходимо выбрать величину Δt малой по сравнению с $1/v$. Это ограничение весьма существенно, ибо требует чрезвычайно большого числа шагов интегрирования.

Метод Эйлера является по-существу простейшим среди так называемых «явных» методов, в которых значение функции в некоторой точке однозначно определяется ее значениями в предыдущих точках. Известны и более точные методы этого рода; одним из самых типичных является метод Рунге—Кутты [14]. Формулы метода четвертого порядка для решения уравнения $dy/dt = f(t, y)$ имеют вид

$$\bar{y}(t + \Delta t) = \bar{y}(t) + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (6.44)$$

где

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= \Delta t f(t, y), \\ k_2 &= \Delta t f(t + \Delta t/2, y + k_1 \Delta t/2), \\ k_3 &= \Delta t f(t + \Delta t/2, y + k_2 \Delta t/2), \\ k_4 &= \Delta t f(t + \Delta t, y + k_3 \Delta t). \end{aligned} \right\} \quad (6.45)$$

Легко показать, что для частного случая уравнения (6.35) имеет место следующее соотношение:

$$\bar{N}(t_{n+1}) = 2 - [1 - v \Delta t + (v \Delta t)^2/2 - (v \Delta t)^3/6 + (v \Delta t)^4/24] [2 - \bar{N}(t_n)]. \quad (6.46)$$

В этом методе ошибка вследствие обрезания ряда меньше, но значение полинома, аппроксимирующего $e^{-v \Delta t}$, при достаточно больших $v \Delta t$ (при $v \Delta t > 2,8$) может оказаться больше единицы. При этих значениях метод неустойчив.

Рассмотрим другую простую схему:

$$\bar{N}(t_{n+1}) = \bar{N}(t_n) + \Delta t [\bar{N}'(t_{n+1}) + \bar{N}'(t_n)]/2. \quad (6.47)$$

При использовании этого метода сначала вычисляют приближенное значение $\bar{N}(t_{n+1})$, затем с помощью уравнения (6.35) получают $\bar{N}'(t_{n+1})$ и, наконец, с помощью (6.47) — исправленное значение $\bar{N}(t_{n+1})$. Далее процесс повторяется столько раз, сколько это необходимо, чтобы удовлетворить некоторому критерию сходимости. Таким образом, уравнение (6.47) определяет $\bar{N}(t_{n+1})$ неявно: оно определяет простейший «неявный» метод, так называемый метод трапеций. В рассматриваемом конкретном случае можно выразить $\bar{N}'(t_{n+1})$ в уравнении (6.47) через $\bar{N}(t_n)$ и затем разрешить его относительно $\bar{N}(t_{n+1})$. Такой прием эквивалентен бесконечному числу итераций и, разумеется, предполагает сходимость, которая при слишком большом Δt не всегда имеет место. Мы получим следующий результат:

$$\bar{N}(t_{n+1}) = \bar{N}(t_n) + \frac{v\Delta t}{2} [2 - \bar{N}(t_{n+1}) + 2 - \bar{N}(t_n)]$$

или

$$\bar{N}(t_{n+1}) = 2 - \frac{1 - v\Delta t/2}{1 + v\Delta t/2} [2 - \bar{N}(t_n)]. \quad (6.48)$$

Согласно соотношению (6.48) уравнение (6.47) приводит к замене $e^{-v\Delta t}$ аппроксимационным выражением

$$\frac{1 - v\Delta t/2}{1 + v\Delta t/2}. \quad (6.49)$$

Ясно, что для любых положительных v и Δt справедливо неравенство

$$|(1 - v\Delta t/2)/(1 + v\Delta t/2)| < 1$$

и, следовательно, никакая ошибка не может привести при последующем интегрировании к расходящемуся колебательному процессу. Таким образом, этот метод устойчив для всех положительных Δt и v , в то время как в первом методе необходимо выполнение неравенства $\Delta t < 2$.

Из устойчивости метода отнюдь не следует, что можно получить достаточно точное решение при любом значении Δt . При $\Delta t = 1$ и $v = 10^3$ использование уравнения (6.47) предполагает замену величины e^{-1000} величиной $(-499/501)$. Использование в нашем примере такой большой величины Δt приводит к абсурдному значению решения. Чтобы получить правильный знак аппроксимационного значения для $e^{-v\Delta t}$ необходимо потребовать, чтобы Δt было меньше $2/v$. При таком ограничении удастся получить лишь весьма скудную информацию о поведении решения.

Рассмотрение простых примеров показывает, что основные трудности являются следствием экспоненциальной природы решения и что хотя вклад переходного члена сам по себе может быть незначительным, для него необходимо получить весьма точное приближение. Использование устойчивого метода отнюдь не исключает трудности получения достаточно точного решения.

Вернемся теперь к анализу уравнений кинетики реактора. Положим $S_0 = 0$. Обозначим (115, 161)

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} N(t) \\ W_1(t) \\ \vdots \\ W_G(t) \end{pmatrix} \quad (6.50)$$

и

$$A(t) = \begin{bmatrix} \frac{\beta}{\Lambda}(r-1) & \frac{\beta}{\Lambda}f_1 & \frac{\beta}{\Lambda}f_2 & \dots & \frac{\beta}{\Lambda}f_G \\ \lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \lambda_2 & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_G & & & & -\lambda_G \end{bmatrix}. \quad (6.51)$$

Основное уравнение принимает вид

$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = A(t) \Psi(t). \quad (6.52)$$

Его формальное решение

$$\Psi(t) = \Psi(0) \exp \int_0^t A(t') dt'. \quad (6.53)$$

Обозначив $\Psi(t_n) = \Psi_n$, получим, согласно соотношению (6.53),

$$\Psi_{n+1} = \Psi_n \exp \int_0^{\Delta t} A(t') dt' \quad (6.54)$$

или в случае постоянной реактивности

$$\Psi_{n+1} = e^{A\Delta t} \Psi_n. \quad (6.55)$$

Упомянутые выше методы Рунге—Кутты и Эйлера являются примерами методов, основанных на аппроксимации функции отрезком ряда Фурье. Используя для решения матричного уравнения (6.55) приближение m -го порядка, получим

$$\Psi_{n+1} = [I + \Delta t A + \dots + (\Delta t A)^m/m!] \Psi_n. \quad (6.56)$$

Напишем соотношение между собственным вектором u_k оператора A и соответствующим собственным значением ω_k :

$$A u_k = \omega_k u_k. \quad (6.57)$$

Величины ω_k являются корнями этого уравнения. Так как ω_k различны, то собственные векторы u_k образуют полную систему. Обозначим максимальный корень через ω_0 . Тогда при $k > 0$ $\omega_k < 0$ и все компоненты собственного вектора u_0 будут положительными.

Вектор Ψ_j с помощью уравнения (6.55) может быть выражен через векторы u_k . Из уравнения (6.56) следует, что собственный вектор u_k должен быть умножен на полином

$$P_m(\omega_k) = 1 + \omega_k \Delta t + \dots + (\omega_k \Delta t)^m/m!.$$

Выше на частном примере мы убедились, что этот полином может оказаться очень плохим приближением для $e^{\omega_k \Delta t}$, причем величина $P_m(\omega_k)$ может оказаться больше единицы. Метод является, таким образом, неустойчивым. Чтобы гарантировать устойчивость, необходимо потребовать для $k > 0$ выполнения условия

$$|P_m(\omega_k)| \leq 1.$$

Проиллюстрируем это на частном примере. Предположим, что величина r постоянна и что имеется только одна группа запаздывающих нейтронов, т. е. $G = 1$. Характеристическое уравнение будет иметь вид

$$[(\beta/\Lambda)(r-1) - \omega](-\lambda - \omega) - \lambda\beta/\Lambda = 0,$$

откуда для собственных значений получим

$$\omega = \frac{\beta(r-1) - \lambda\Lambda}{2\Lambda} \pm \sqrt{\left[\frac{\beta(r-1) - \lambda\Lambda}{2\Lambda}\right]^2 + \frac{\lambda\beta r}{\Lambda}}.$$

Для реактора с кипящей водой $\Lambda = 10^{-4}$ сек, $\beta = 0,008$ и $\lambda = 0,08$ сек $^{-1}$. Таким образом, если величина r не слишком близка к единице, т. е. r не больше 0,9 долл, произведение $\lambda\Lambda$ пренебрежимо мало. Для $r = 0,1$ долл $\omega_1 = -72$ сек $^{-1}$ и $\omega_0 = 10^{-2}$ сек $^{-1}$. Даже при значении r , равном 0,9 долл, $|\omega_1| > |\omega_0|$.

Определив собственные векторы $u_k(t)$, запишем $N(t)$ в следующем виде:

$$N(t) = u_0^{(0)}(0) e^{\omega_0 t} + u_1^{(0)}(0) e^{\omega_1 t^*}.$$

Таким образом, по истечении начального переходного периода, определяемого величиной ω_1 , решение будет возрастать экспоненциально с периодом, приблизительно равным $(1-r)/\lambda r$. При использовании метода Рунге—Кутта 4-го порядка приближение

$$P_4(\omega_k) = 1 + \Delta t \omega_k + \dots + (\omega_k \Delta t)^4/4!$$

является достаточно хорошим только в том случае, если $|\Delta t \omega_k| \ll 1$. Для нашего примера это означает, что необходимо выполнение условия.

$$\left| \frac{\beta(1-r)\Delta t}{\Lambda} \right| \ll 1.$$

Это весьма жесткое ограничение, так как нейтронный поток характеризуется временем изменения u_0 [которое определяется величиной $\omega_0 = \lambda r/(1-r)$], а не временем изменения u_1 . Если это ограничение будет нарушено, то согласно простому расчету при $|\Delta t \omega_1| > 2,7853$ (для метода Рунге—Кутта 4-го порядка) любая ошибка в u_1 приведет к колебаниям с изменением знака этой функции на каждом шаге.

Для метода 5-го порядка колебания возникают при $|\Delta t \omega_1| > 2,1806$; при $|\Delta t \omega_1| > 3,21705$ они становятся расходящимися. Как мы видели выше, такая неустойчивость характерна не только для метода Рунге—Кутта. Аналогичные ограничения имеют место для любой схемы численного интегрирования, основанной на разложении в ряд Тейлора.

Итак, мы имеем решение кинетического уравнения, зависящее от времени приблизительно как $e^{-\frac{\beta t}{\Lambda}}$. Характерный период Λ/β может быть очень коротким ($\sim 10^{-2}$ сек для теплового реактора и $\sim 10^{-5}$ сек для быстрого). С другой стороны, если состояние реактора близко к критическому, то его поведение определяется запаздывающими нейтронами и, следовательно, характерный период составляет несколько секунд или даже еще больше. Необходимо поэтому использовать, может быть, тысячу точек, чтобы получить незначительное изменение в мощности реактора. За исключением начального переходного периода, связанного со ступенчатым характером изменения реактивности, величина потока плавно меняется от точки к точке, так что в полученных числах содержится очень мало информации. Следовательно, ввиду больших затрат машинного времени такие расчеты неэффективны. Более того, в большинстве конкретных расчетов возникают дополнительные неприятности, связанные с округлением и другими погрешностями расчета.

Решение этих проблем состоит в переходе от дифференциальной формы уравнений кинетики к интегральной.

Переход от дифференциальных уравнений кинетики реактора к интегральным (равно как и решение интегральных уравнений) может быть осуществлен многими способами. Используя уравнение (6.19), мы можем формально записать

$$N(t+h) = N(t) e^{Q(t)} + \int_0^h \left\{ \frac{\beta}{\Lambda} \sum_{i=1}^G f_i W_i(t+\xi) + S_0 \right\} e^{Q(\xi)} d\xi, \quad [(6.58)]$$

где

$$Q(\xi) = \frac{\beta}{\Lambda} \int_{t+\xi}^{t+h} [r(\tau) - 1] d\tau. \quad (6.59)$$

Необходимо отметить трудности, возникающие в тех случаях, когда функция $r(t)$ не является постоянной. Хотя вычисление $Q(\xi)$ в этих случаях до-

* Через $u_k^{(0)}$ обозначены первые компоненты собственных векторов u_k .

вольно просто, точное интегрирование функции, содержащей в качестве множителя $e^{Q(\xi)}$, может оказаться весьма сложным. В связи с этим были рассмотрены два специальных случая и составлены соответствующие программы для ЭВМ. Используемые при этом методы обсуждаются в последующих разделах.

AIREK-метод. Мы видели, что основная трудность, возникающая при выполнении численного интегрирования уравнений кинетики реактора, состоит в подборе достаточно хорошей аппроксимации для экспоненциального поведения решения. Судак предложил [18] определенным образом преобразовать уравнения кинетики, что привело к весьма полезным результатам. Предположим, что известно значение $N(t)$ при $t = t_0$, и мы хотим рассчитать $N(t_0 + h)$. Согласно уравнениям кинетики можно написать

$$\frac{dN}{dt} - \alpha N = R(N, \dots, t), \quad (6.60)$$

где

$$\alpha = \frac{\beta}{\Lambda} [r(t_0) - 1], \quad (6.61)$$

$$R(N, \dots, t) = \frac{\beta}{\Lambda} \left[\{r(t) - r(t_0)\} N(t) + \sum_{i=1}^G f_i W_i(t) + S_0 \right]. \quad (6.62)$$

Очевидно, что уравнение (6.60) получено путем вычитания $\frac{\beta}{\Lambda} r(t_0) N(t)$ из обеих частей уравнения (6.17).

Умножив далее обе части уравнения (6.60) на $e^{-\alpha t}$ и произведя интегрирование, получим следующее уравнение:

$$N(t_0 + h) = N(t_0) e^{\alpha h} + \int_0^h R(N, \dots, t_0 + \xi) e^{\alpha(h-\xi)} d\xi, \quad (6.63)$$

которое представляет частный случай уравнения (6.58).

Исходя из такой формулировки задачи, Коэн [19] разработал метод, использованный в программе AIREK [20], а также в некоторых более поздних программах [21—23]. Так как уравнения для различных групп запаздывающих нейтронов уже содержатся в уравнении (6.60), то остается лишь рассмотреть задачу численного интегрирования уравнения вида

$$\frac{dV}{dt} = \alpha V + R(V, t). \quad (6.64)$$

Эта методика может быть легко распространена на систему уравнений вида, который мы рассматриваем (т. е. на систему, в которой матрица коэффициентов есть матрица с диагональным преобладанием). Существуют, правда, некоторые трудности для системы уравнений более общего вида; этот вопрос будет обсуждаться ниже. Уравнение, соответствующее уравнению (6.63), имеет вид

$$V(t_0 + \tau) = V(t_0) e^{\alpha \tau} + \int_0^{\tau} R(V(t_0 + \xi), t_0 + \xi) e^{\alpha(\tau-\xi)} d\xi. \quad (6.65)$$

Интегрирование от t_0 до $t_0 + h$ производится в несколько этапов. Обозначим $V_0 = V(t_0)$ и $R_0 = R(V_0, t_0)$. Положив приблизительно $R(V, t_0 + \xi) = R_0$ при $0 \leq \xi \leq h/2$ и подставив в уравнение (6.65) $\tau = h/2$, получим

$$V(t_0 + h/2) \approx V_1 = V_0 e^{\alpha h/2} + \int_0^{h/2} R_0 e^{\alpha(h/2-\xi)} d\xi \quad (6.66)$$

или

$$V_1 = V_0 + \delta_1, \quad (6.67)$$

где

$$\delta_1 = (h/2) C_1 (\alpha h/2) [R_0 + \alpha V_0]. \quad (6.68)$$

Фигурирующая здесь функция $C_1(x)$ определяется соотношением

$$C_1(x) = (e^x - 1)/x; \quad (6.69)$$

$C_1(x)$ является первой в группе функций, определяемых рекуррентными соотношениями

$$C_{n+1}(x) = [nC_n(x) - 1]/x. \quad (6.70)$$

Эти функции подробно обсуждаются в приложении к данной главе. Введем обозначение

$$R_1 = R(V_1, t_0 + h/2). \quad (6.71)$$

Предположим, что R на интервале $[t_0, t_0 + h/2]$ изменяется линейно и проходит через точки (t_0, R_0) и $(t_0 + h/2, R_1)$. Подставив линейное выражение для R в уравнение (6.65), найдем, что

$$V(t_0 + h/2) \approx V_2 = V_1 + \delta_2, \quad (6.72)$$

где

$$\delta_2 = (h/2) C_2(\alpha h/2) [R_1 - R_0]. \quad (6.73)$$

После этого вычислим

$$R_2 = R(V_2, t_0 + h/2) \quad (6.74)$$

и, предположив, что R меняется линейно на интервале $[t_0, t_0 + h]$, получим первое приближение для $V(t_0 + h)$:

$$V(t_0 + h) \approx V_3 = V_0 + \delta_3, \quad (6.75)$$

где

$$\delta_3 = h C_1(\alpha h) [R_0 + \alpha V_0] + 2h C_2(\alpha h) [R_2 - R_0]. \quad (6.76)$$

Вычислим

$$R_3 = R(V_3, t_0 + h) \quad (6.77)$$

и, предположив теперь, что R изменяется квадратично, проходя через точки (t_0, R_0) , $(t_0 + h/2, R_2)$ и $(t_0 + h, R_3)$, получим второе приближение для $V(t_0 + h)$:

$$V(t_0 + h) \approx V_4 = V_3 + \delta_4, \quad (6.78)$$

где

$$\delta_4 = h \{2C_3(\alpha h) - C_2(\alpha h)\} [R_0 - 2R_2 + R_3]. \quad (6.79)$$

В более ранних вариантах программы AIREK на основе V_4 получили еще одно (окончательное) приближение для $V(t_0 + h)$, предполагая при этом, что R меняется квадратично. Практика, однако, показала, что ввиду незначительного увеличения точности дополнительные расчеты не оправданы, и в настоящее время V_4 принимается в качестве окончательного приближения для $V(t_0 + h)$.

Изменение величины шага интегрирования. В любой расчетной программе, связанной с интегрированием дифференциальных уравнений, весьма желательно иметь автоматическое изменение величины шага интегрирования. Например, при интегрировании уравнений кинетики реактора может оказаться желательным использовать вблизи пика мощности сравнительно небольшой шаг интегрирования, а после прохождения пика использовать шаги большей величины.

В идеальном случае желательно иметь такой критерий, в соответствии с которым величина шага изменялась бы автоматически так, чтобы численное решение $\tilde{N}(t)$ всюду в достаточной степени было близко к $N(t)$. Часто в качестве критерия может быть использована относительная погрешность. При этом h изменяется так, что в пределах интересующего нас периода выполняется неравенство

$$|N(t) - \tilde{N}(t)| < \varepsilon N(t), \quad (6.80)$$

где ε — заданная величина.

Вообще говоря, это неплохой способ определения погрешности, однако он приводит к дополнительным (обычно неоправданным) расчетам в тех случаях, когда функция $N(t)$ очень мала и изменяется в сравнительно широких пределах. Поскольку в большинстве случаев функция $N(t)$ неизвестна, величина шага изменяется обычно следующим способом. Сначала с помощью выбранного численного метода определяют $\bar{N}(t_0 + h)$. Используя полученный результат, рассчитывают положительную функцию $T(\bar{N}(t_0 + h), \bar{N}(t_0), h, \dots)$. Выбор функции T зависит от используемого метода расчета. Задав две положительные величины ε_1 и ε_2 и два множителя D_1 и D_2 , выбирают новую величину шага согласно следующим условиям:

- 1) если $0 < T \leq \varepsilon_1$, то $h' = D_1 h (> h)$;
- 2) если $\varepsilon_1 < T < \varepsilon_2$, то $h' = h$;
- 3) если $T \geq \varepsilon_2$, то $h' = D_2 h (< h)$.

Здесь через h' обозначена новая величина шага для интегрирования на следующем промежутке. Обычно условия выбора шага формулируются так, что $h_{min} \leq h' \leq h_{max}$, где h_{min} и h_{max} определяются характером задачи. Если $h' < h_{min}$, то процесс численного решения может быть прекращен или продолжен с этим минимальным значением.

Обычно D_1 и D_2 выбираются равными 2 и 1/2 соответственно. Но при таком выборе может оказаться выгодным потребовать, чтобы данная величина шага использовалась некоторое определенное число раз, прежде чем она будет удвоена, так как при использовании некоторых численных методов слишком частая смена шага может вызывать осцилляции.

Величины ε_1 и ε_2 связаны с величиной ε , введенной выше. Однако до тех пор, пока функция $N(t)$ неизвестна, точных соотношений получить не удастся и приходится использовать приближенные соотношения, основанные на анализе экспериментальных результатов. Если имеется возможность оценить погрешность, связанную с обрезанием, то может быть получено полезное соотношение. Чтобы проиллюстрировать этот прием, рассмотрим использование одного из таких методов [24] для решения уравнения

$$y' = f(x, y).$$

В качестве «предиктора» используем

$$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2}) + \frac{28}{90} h^5 y^{(5)}, \quad (6.81)$$

где $y^{(5)}$ — пятая производная от y , вычисленная в соответствующей точке. Для получения «корректора» используем метод Симпсона:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3} (y'_{n+1} + 4y'_n + y'_{n-1}) - \frac{1}{90} h^5 y^{(5)}. \quad (6.82)$$

Легко видеть, что если E_1 — погрешность выражения (6.81), а E_2 — погрешность, которая получается при использовании (6.82), то E_1 приблизительно в 28 раз больше, чем E_2 , и имеет противоположный знак. Пусть $D = E_2 - E_1$, тогда $E_2 = D/29$. Разность между первоначальным и окончательным значениями y_{n+1} получена здесь весьма легким способом. Таким образом, в этом методе изменение шага зависит от величины E_2 , равной $D/29$. Когда значение E_2 становится слишком маленьким, h увеличивается, а когда слишком большим, уменьшается. Существуют и более совершенные способы, разработанные как для «предиктор-корректор»-методов [25], так и для метода Рунге—Кутта [26].

Поскольку погрешность, связанная с обрезанием ряда в методе AIREK, не может быть оценена достаточно точно, получение удовлетворительного кри-

терия для автоматического изменения шага весьма затруднительно. В ранних модификациях программы AIREK рассчитывались следующие величины:

$$\begin{aligned}\bar{\omega} &= \frac{1}{h} \ln \left[\frac{\bar{N}(t_0+h)}{\bar{N}(t_0)} \right], \\ \omega_0 &= \frac{1}{\bar{N}(t_0)} \left(\frac{d\bar{N}}{dt} \right)_{t=t_0}, \\ \omega_1 &= \frac{1}{\bar{N}(t_0+h)} \left(\frac{d\bar{N}}{dt} \right)_{t=t_0+h}, \\ Q &= \frac{hC_2(\alpha h)}{1+C_1(\alpha h)} [|\omega_0 - 2\bar{\omega} + \omega_1|].\end{aligned}$$

Величина Q является специальным образом аппроксимированной производной периода реактора; она определяет скорость изменения $N(t)$; Q соответствует функции T , которая была введена выше. С ее помощью происходит изменение величины шага тем способом, который был описан выше. Легко понять, однако, что если период реактора не меняется, то в пределах точности расчета $Q = 0$. Тогда, возможно, изменение величины шага будет определяться погрешностью округления. Во всяком случае, весьма трудно найти экспериментально или теоретически соотношение между Q и ϵ . В программе AIROS [27] этот критерий заменен другим, основанным на вычислении разности между $\bar{N}(t_0+h)$ и $N^*(t_0+h)$, где $N^*(t_0+h)$ — первоначальное значение $N(t_0+h)$, вычисленное с помощью $\bar{N}(t_0-h^*)$ и $\bar{N}(t_0)$. Здесь через h^* обозначена величина h на предыдущем шаге интегрирования. Подробнее с этим вопросом можно познакомиться в цитированной работе.

Успех указанного метода должен быть выяснен при его практическом использовании. Во всяком случае основная трудность метода AIREK остается, и до тех пор пока не будет достаточно удовлетворительной оценки погрешности вследствие обрезания ряда, некоторые аспекты метода будут оставаться под сомнением. Хотя в настоящее время метод широко и успешно используется в практических расчетах, применение его к системам уравнений сопряжено с определенными трудностями [28]. По существу эти трудности вызваны наличием больших недиагональных элементов матрицы. В таких случаях метод AIREK не имеет преимуществ перед методом Рунге—Кутты, так как мы получаем неадекватную аппроксимацию для экспоненциальных членов. Поэтому в настоящее время делаются попытки создать численный метод столь же эффективный, как и AIREK, и вместе с тем в большей степени поддающийся аналитическому рассмотрению.

Некоторые родственные методы. Период реактора $\omega^{-1}(t)$, определяемый соотношением

$$\omega(t) = \frac{1}{N(t)} \cdot \frac{dN}{dt}, \quad (6.83)$$

является более гладкой функцией, чем $N(t)$. Кроме того, он представляет интерес сам по себе. Естественно надеяться, что при интегрировании дифференциального уравнения для $\omega(t)$ вместо уравнения для $N(t)$ можно пользоваться значительно большей величиной шага. Этот вопрос исследовался Блу [29].

Определим функции $g_i(t)$ с помощью соотношений

$$g_i(t) = \frac{1}{N(t)} \cdot \frac{dW_i}{dt}. \quad (6.84)$$

Такие преобразования использовались Акаску [30] при изучении аналитических решений кинетических уравнений. Подставив эти соотношения в урав-

нения кинетики (6.17), найдем, что

$$\omega(t) = \frac{\Lambda}{\beta} \left[r - \sum_{i=1}^G \frac{f_i}{\lambda_i} g_i \right] + \frac{S_0}{N}. \quad (6.85)$$

После дифференцирования получим

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} \left[(r-1)\omega(t) + \sum_{i=1}^G f_i g_i \right] + \frac{\beta}{\Lambda} \cdot \frac{dr}{dt} - \omega^2 \quad (6.86)$$

и

$$\frac{dg_i}{dt} = -\lambda_i g_i + (\omega \lambda_i - \omega g_i). \quad (6.87)$$

Эти уравнения имеют столь же общий вид, как и исходные уравнения кинетики. Поэтому к ним непосредственно может быть применен метод AIREK. После того как величина $\omega(t)$ будет определена, $N(t)$ можно вычислить с помощью квадратуры

$$N(t) = \exp \int_0^t \omega(t') dt'. \quad (6.88)$$

Основная трудность, которая встречается при использовании этого метода, состоит в том, что погрешность в $\omega(t)$ может вызывать значительно большую погрешность в $N(t)$. По этой причине метод, который с первого взгляда представляется естественным подходом к решению проблемы, практически не используется.

Удачный метод, основанный на уравнении (6.58), используется в программе WITCHCRAFT [31]. В этом методе реактивность аппроксимируется кусочно-линейной функцией времени, т. е. для $0 \leq \xi \leq h$

$$r(t_0 + \xi) = \alpha + \beta \xi.$$

Тогда, согласно уравнению (6.59), $Q(\xi)$ зависит от ξ квадратично. Величины $W_i(t)$, определяющие вклад отдельных групп запаздывающих нейтронов, вычисляются предварительно с помощью квадратичной экстраполяции предыдущих значений. Величина шага регулируется путем согласования между первоначальными и окончательными значениями величин.

Трудность этого метода заключается в вычислении интегралов вида

$$\int x^n \exp[a(x+b)^2] dx.$$

В программе WITCHCRAFT такие интегралы вычисляются с помощью разложения экспоненты подынтегрального выражения в ряд. Сходимость ряда в некоторых случаях может быть медленной, однако ее можно ускорить с помощью различных приемов, зависящих от значений величин a и b .

Метод, использованный в программе WITCHCRAFT, весьма эффективен при уменьшении необходимого числа шагов. Линейная аппроксимация $r(t)$ может быть с успехом использована для широкого класса задач, однако программа пока не получила достаточно широкого распространения.

6.2.4. Метод коллокации. Вводные замечания. Обратимся теперь к рассмотрению иного, весьма перспективного подхода.

Решение уравнений для запаздывающих нейтронов может быть легко выражено через величину мощности

$$W_i(t_0 + \tau) = W_{i0} e^{-\lambda_i \tau} + \lambda_i \int_0^{\tau} e^{-\lambda_i(\tau - \xi)} N(t_0 + \xi) d\xi. \quad (6.89)$$

Аналогичным образом, используя исходное дифференциальное уравнение, можно написать

$$W_i = N - \frac{1}{\lambda_i} \cdot \frac{dW_i}{dt} \quad (6.90)$$

и, следовательно,

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} \left[rN - \sum_{i=1}^G \frac{f_i}{\lambda_i} \cdot \frac{dW_i}{dt} \right] + S_0. \quad (6.91)$$

Таким образом,

$$N(t_0 + \tau) = N_0 + \frac{\beta}{\Lambda} \int_0^\tau r(t_0 + \xi) N(t_0 + \xi) d\xi - \\ - \frac{\beta}{\Lambda} \sum_{i=1}^G f_i \int_0^\tau e^{-\lambda_i(\tau-\xi)} N(t_0 + \xi) d\xi + \frac{\beta\tau}{\Lambda} \sum_{i=1}^G f_i W_{i0} C_1(-\lambda_i \tau) + S_0 \tau. \quad (6.92)$$

Общий метод решения уравнений этого типа был предложен Бриттэном [32] и успешно использован в программе RE-29, созданной в Аргоннской национальной лаборатории. При $0 \leq \xi \leq h$ предполагается, что

$$N(t_0 + \xi) = N_0 + N_1 \xi/h, \quad (6.93)$$

где N_1 — постоянная, определяемая из условия, что при $\xi = h$ уравнение (6.92) в точности удовлетворяется выражением (6.93). После подстановки найдем, что

$$N_1 = \frac{\frac{\beta}{\Lambda} \left[N_0 \int_0^h r(t_0 + \xi) d\xi - N_0 h \sum_{i=1}^G f_i C_1(-\lambda_i h) + h \sum_{i=1}^G f_i W_{i0} C_1(-\lambda_i h) \right] + S_0 h}{1 - \frac{1}{h} \frac{\beta}{\Lambda} \int_0^h r(t_0 + \xi) \xi d\xi + \frac{\beta}{\Lambda} h \sum_{i=1}^G f_i C_2(-\lambda_i h)}. \quad (6.94)$$

Таким образом,

$$N(t_0 + h) = N_0 + N_1 \quad (6.95)$$

и

$$W_i(t_0 + h) = W_{i0} e^{-\lambda_i h} + \lambda_i h [N_0 C_1(-\lambda_i h) + \\ + N_1 C_2(-\lambda_i h)] \quad (i = 1, 2, \dots, G). \quad (6.96)$$

Зависимость r от других переменных может быть получена таким же образом, причем величина шага интегрирования может легко изменяться автоматически.

Каганов [33] рассмотрел несколько ограничений, связанных с использованием программы RE-29. Основные ограничения, проанализированные в его работе, сводятся к следующему.

1. Если реактивность близка к величине, обусловленной мгновенными нейтронами, то рассматриваемый метод не имеет преимуществ перед методами Рунге—Кутты.

2. В окрестности острых пиков плотности нейтронов, где велика вторая производная, при недостаточно малой величине шага возникает неустойчивость.

3. Попытки использовать программу RE-29 для решения задач, связанных с эксплуатацией, в которых N меняется очень медленно, показали, что существует верхняя граница величины интервала, не зависящая от времени жизни мгновенных нейтронов.

Исходя из полученных результатов, Каганов предложил использовать для $N(t_0 + \xi)$ (в интервале $0 \leq \xi \leq h$) квадратичную аппроксимацию. Однако каждый из описанных подходов является частной формой стандартного метода решения интегральных уравнений. Хотя интересующие нас интегральные уравнения относятся к типу Вольтерра, метод, используемый обычно для решения уравнений типа Фредгольма, в нашем случае может быть успешно использован. Этот метод называется «методом коллокации».

Метод коллокации. Мы видели, что уравнения кинетики реактора могут быть преобразованы в интегральное уравнение следующего вида:

$$N(t_0 + h) = \int_0^h K_i(h, N(t_0 + \xi); \xi) d\xi + f(t_0; h). \quad (6.97)$$

Чтобы продемонстрировать итерационную технику, можно упростить задачу, рассмотрев уравнение

$$N(t_0 + h) = \int_0^h K(h; \xi) N(t_0 + \xi) d\xi + f(t_0; h). \quad (6.98)$$

Одним из методов нахождения приближенного решения интегрального уравнения является метод коллокации [34]. В этом методе предполагается, что при $0 \leq \tau \leq h$

$$N(t_0 + \tau) \approx \omega(\tau) = \sum_{i=0}^M N_i \varphi_i(\tau), \quad (6.99)$$

где пробные функции $\varphi_i(\tau)$ известны, а N_i — постоянные, подлежащие определению.

При $0 \leq \tau \leq h$ можно также написать

$$N(t_0 + \tau) = \int_0^\tau K(\tau; \xi) N(t_0 + \xi) d\xi + f(t_0, \tau) \quad (6.100)$$

и, подставив выражение (6.99) в уравнение (6.100), получить

$$\sum_{i=0}^M N_i \varphi_i(\tau) = \sum_{i=0}^M N_i \int_0^\tau K(\tau, \xi) \varphi_i(\xi) d\xi + f(t_0; \tau) + E_M(\tau; N_1, \dots, N_M), \quad (6.101)$$

где E_M — мера возможной погрешности, возникающей из-за замены точного решения рядом $\omega(\tau)$. $M + 1$ постоянных N_i определяются требованием обращения E_M в нуль в $M + 1$ точках τ_j . Хотя это и не так существенно, мы будем предполагать, что все эти точки τ_j расположены в интервале $[0, h]$. В этих точках

$$\sum_{i=0}^M N_i \left\{ \varphi_i(\tau_j) - \int_0^{\tau_j} K(\tau_j; \xi) \varphi_i(\xi) d\xi \right\} = f(t_0; \tau_j) \quad (j=0, 1, \dots, M). \quad (6.102)$$

Таким образом, получена система линейных уравнений для определения N_i . Разумеется, необходимо, чтобы детерминант не обращался в нуль.

Определив коэффициенты N_i , получим приближенное решение в следующем виде:

$$\omega(h) = \sum_{i=0}^M N_i \varphi_i(h). \quad (6.103)$$

Желательно, конечно, чтобы число M было как можно меньше, так как рассмотренная процедура должна использоваться на каждом шаге. Это может быть достигнуто путем удачного выбора пробных функций на каждом интервале, а также использования не слишком большой величины h . Необходимо также отметить, что обращение E_M в нуль в точках τ_j отнюдь не означает, что $N(t_0 + \tau_j) = \omega(\tau_j)$ или что функция E_M мала на всем интервале.

В дальнейшем будет показано, что, несмотря на эти недостатки, методы, основанные на только что описанном приеме, могут быть довольно простыми и эффективными при решении уравнений кинетики реактора.

Метод коллокации — пробная функция квадратичного вида. Используем в качестве пробной функции квадратичное выражение [35]

$$N(t_0 + \xi) = N_0 \left[1 + \frac{N_1 \xi}{h} + N_2 \left(\frac{\xi}{h} \right)^2 \right]. \quad (6.104)$$

Опустив все промежуточные выкладки, приведем результат:

$$A(\tau) N_1 + B(\tau) N_2 = C(\tau), \quad (6.105)$$

где

$$A(\tau) = \frac{\tau}{h} + \frac{\beta}{\Lambda} \frac{\tau^2}{h} \sum f_i C_2(-\lambda_i \tau) - \frac{\beta}{\Lambda} \frac{1}{h} \int_0^\tau r(t_0 + \xi) \xi d\xi, \quad (6.106)$$

$$B(\tau) = \frac{\tau^2}{h^2} + \frac{\beta}{\Lambda} \cdot \frac{\tau^3}{h^2} \sum f_i C_3(-\lambda_i \tau) - \frac{\beta}{\Lambda} \cdot \frac{1}{h^2} \int_0^\tau r(t_0 + \xi) \xi^2 d\xi, \quad (6.107)$$

$$C(\tau) = \frac{\beta}{\Lambda} \int_0^\tau r(t_0 + \xi) d\xi + \frac{\beta}{\Lambda} \tau \sum f_i C_1(-\lambda_i \tau) \left(\frac{W_{i0}}{N_0} - 1 \right) + S_0 \tau / N_0. \quad (6.108)$$

Теперь нужно решить систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} A\left(\frac{h}{2}\right) N_1 + B\left(\frac{h}{2}\right) N_2 &= C\left(\frac{h}{2}\right), \\ A(h) N_1 + B(h) N_2 &= C(h) \end{aligned} \right\} \quad (6.109)$$

относительно N_1 и N_2 . Предполагается, что реактивность изменяется по закону

$$r(t_0 + \xi) = r_0 + r_1 \xi/h + r_2 \xi^2/h^2 \quad (0 \leq \xi \leq h), \quad (6.110)$$

где $r_0 = r(t_0)$, а r_1 и r_2 выбираются так, чтобы квадратичное выражение согласовывалось с заданным выражением в конечной и средней точках интервала. Если r зависит от N , а также, может быть, от каких-нибудь переменных обратной связи, то необходимо использовать итерационный процесс.

Величина интервала может изменяться автоматически после интегрирования на интервале $0 \leq \xi \leq h/2$ и сравнения результатов двух расчетов при $\xi = h/2$. В зависимости от результатов сравнения величина интервала может быть уменьшена, оставлена без изменения или увеличена. Второй расчет состоит, по существу, только из вычисления $A(h/4)$, $B(h/4)$ и $C(h/4)$, причем использование формулы удвоения приводит лишь к незначительным затратам труда, если не производится полного расчета r .

Было проведено несколько контрольных расчетов [36], после чего метод был использован в ряде производственных программ в различных лабораториях. Сравнение с методом AIREK показало, что только что рассмотренный метод является вполне конкурентоспособным.

Метод коллокации — экспоненциальное приближение. На некоторых участках переходного процесса мощность может расти или падать почти экспоненциально [37]. Выбор квадратичного приближения на этих участках может оказаться неудачным, в связи с чем мы рассмотрим экспоненциальное приближение.

Возвращаясь к основной системе уравнений и интегрируя уравнения для запаздывающих нейтронов, найдем

$$\begin{aligned} N(t_0 + \tau) &= N_0 e^{\alpha \tau} + \frac{\beta}{\Lambda} \int_0^\tau e^{\alpha(\tau - \xi)} R(t_0 + \xi) N(t_0 + \xi) d\xi + \\ &+ \frac{\beta}{\Lambda} \sum_{i=1}^M f_i \int_0^\tau e^{\alpha(\tau - \xi)} \left\{ W_{i0} e^{-\lambda_i \xi} + \lambda_i \int_0^\xi e^{-\lambda_i(\xi - \zeta)} N(t_0 + \zeta) d\zeta \right\} d\xi + \\ &+ S_0 \tau C_1(\alpha \tau), \end{aligned} \quad (6.111)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{\beta}{\Lambda} [r(t_0) - 1], \\ R(t_0 + \xi) &= r(t_0 + \xi) - r(t_0). \end{aligned} \right\} \quad (6.112)$$

Предположим, теперь, что при $0 \leq \xi \leq h$

$$N(t_0 + \xi) = N_0 e^{\alpha \xi} \left(1 + \frac{N_1}{h} \xi + \frac{N_2}{h^2} \xi^2 \right). \quad (6.113)$$

Как и выше, подставим (6.113) в (6.111). Вычисление определенных интегралов дает следующие результаты:

$$\int_0^{\tau} e^{\alpha(\tau-\xi)} e^{-\lambda_i \xi} d\xi = e^{\alpha \tau} \tau C_1 [-(\alpha + \lambda_i) \tau], \quad (6.114)$$

$$\int_0^{\tau} e^{\alpha(\tau-\xi)} d\xi \int_0^{\xi} e^{-\lambda_i(\xi-\zeta)} e^{\alpha \zeta} d\zeta = e^{\alpha \tau} \tau^2 C_2 [-(\alpha + \lambda_i) \tau], \quad (6.115)$$

$$\int_0^{\tau} e^{\alpha(\tau-\xi)} d\xi \int_0^{\xi} e^{-\lambda_i(\xi-\zeta)} e^{\alpha \zeta} \zeta d\zeta = e^{\alpha \tau} \frac{\tau^3}{2} C_3 [-(\alpha + \lambda_i) \tau], \quad (6.116)$$

$$\int_0^{\tau} e^{\alpha(\tau-\xi)} d\xi \int_0^{\xi} e^{-\lambda_i(\xi-\zeta)} e^{\alpha \zeta} \zeta^2 d\zeta = e^{\alpha \tau} \frac{\tau^4}{3} C_4 [-(\alpha + \lambda_i) \tau]. \quad (6.117)$$

Теперь можно получить уравнение

$$A(\tau) N_1 + B(\tau) N_2 = C(\tau), \quad (6.118)$$

где

$$A(\tau) = \frac{\Lambda}{\beta} \cdot \frac{\tau}{h} - \frac{\tau^3}{2h} \sum f_i \lambda_i C_3 [-(\alpha + \lambda_i) \tau] - H_1(\tau), \quad (6.119)$$

$$B(\tau) = \frac{\Lambda}{\beta} \cdot \frac{\tau^2}{h^2} - \frac{\tau^4}{3h^2} \sum f_i \lambda_i C_4 [-(\alpha + \lambda_i) \tau] - H_2(\tau), \quad (6.120)$$

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \frac{\tau}{N} \sum f_i W_{i0} C_1 [-(\alpha + \lambda_i) \tau] + \frac{S_0}{N_0} \frac{\lambda}{\beta} \tau C_1(-\alpha \tau) + \\ &+ \tau^2 \sum f_i \lambda_i C_2 [-(\alpha + \lambda_i) \tau] + H_0(\tau) \end{aligned} \quad (6.121)$$

и

$$H_j(\tau) = \frac{1}{h^j} \int_0^{\tau} R(t_0 + \xi) \xi^j d\xi. \quad (6.122)$$

Используя значения $\tau = h/2$ и $\tau = h$, получим уравнения для определения N_1 и N_2 :

$$\left. \begin{aligned} A(h/2) N_1 + B(h/2) N_2 &= C(h/2), \\ A(h) N_1 + B(h) N_2 &= C(h). \end{aligned} \right\} \quad (6.123)$$

После определения N_1 и N_2 окончательные результаты могут быть получены с помощью выражений

$$N(t_0 + h) = N_0 e^{\alpha h} (1 + N_1 + N_2), \quad (6.124)$$

$$\begin{aligned} W_i(t_0 + h) &= W_{i0} e^{-\lambda_i h} + h N_0 e^{\alpha h} \lambda_i [C_i [-(\alpha + \lambda_i) h] + \\ &+ N_1 C_2 [-(\alpha + \lambda_i) h] + N_2 C_3 [-(\alpha + \lambda_i) h]]. \end{aligned} \quad (6.125)$$

Этот метод проверялся численно. Он оказался наиболее эффективным для тех случаев, когда критичность обеспечивается мгновенными нейтронами, что разумеется, не слишком удивительно, если иметь в виду принятую форму ре-

шения. Однако, если с помощью одних мгновенных нейтронов критичность не достигается, то предположение об экспоненциальной форме решения требует использования более мелких шагов по времени, чем потребовалось бы при квадратичной аппроксимации. Так как метод, использующий экспоненциальную форму аппроксимации, требует больших затрат машинного времени при расчете одного шага, то он не может быть рекомендован для расчета состояний ниже «мгновенной критичности». Хотя можно было бы использовать этот метод для ранней стадии переходного процесса, а затем применять квадратичную аппроксимацию, дополнительные усилия, затраченные на программирование, не представляются оправданными.

6.2.5. Анализ ошибок. Способ, который мы применим для анализа ошибок [38], не зависит от того, как определяются коэффициенты N_i в аппроксимационном выражении

$$\bar{N}(t_0 + \tau) = \sum_{i=1}^M N_i \varphi_i(\tau). \quad (6.126)$$

В частных случаях для определения коэффициентов может быть использован метод коллокации.

Запишем

$$N(t_0 + \tau) = \bar{N}(t_0 + \tau) + \varepsilon(\tau), \quad (6.127)$$

где $\bar{N}(t_0 + \tau)$ — решение интегрального уравнения.

$$\begin{aligned} \bar{N}(t_0 + \tau) = N(t_0) + \int_0^\tau K(\tau, \xi) \bar{N}(t_0 + \xi) d\xi + \\ + f(\tau) + E_M(\tau; N_1, \dots, N_M). \end{aligned} \quad (6.128)$$

Функция $E_M(\tau; N_1, \dots, N_M) = E_M(\tau)$ является мерой погрешности, возникающей вследствие использования $\bar{N}(t_0 + \tau)$ вместо точного решения. Функция $E_M(\tau)$ отнюдь не совпадает с $\varepsilon(\tau)$. Ниже мы найдем соотношение между ними. Важно отметить, что функцию $E_M(\tau)$ можно определить только после того, как определены коэффициенты N_i . Например, в методе коллокации коэффициенты N_i определяют, исходя из требования равенства функции $E_M(\tau)$ нулю в том же самом числе точек на некотором интервале, что и число определяемых коэффициентов. Таким образом, мы не можем знать функцию $E_M(\tau)$ на рассматриваемой стадии расчета; ее можно определить, лишь подставив $\bar{N}(t_0 + \tau)$ в первоначальное интегральное уравнение и вычислив возникающее расхождение.

Полезно также отметить еще одно обстоятельство, прежде чем попытаться найти $\varepsilon(\tau)$. После определения $\bar{N}(t_0 + \tau)$ можно вычислить $\bar{W}_i(t_0 + \tau)$ — приближенное значение $W_i(t_0 + \tau)$ — с помощью соотношения

$$\bar{W}_i(t_0 + \tau) = W_i(t_0) e^{-\lambda_i \tau} + \lambda_i \int_0^\tau e^{-\lambda_i(\tau - \xi)} \bar{N}(t_0 + \xi) d\xi. \quad (6.129)$$

Пусть

$$W_i(t_0 + \tau) = \bar{W}_i(t_0 + \tau) + \varepsilon_i(\tau).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \varepsilon_i(\tau) = W_i(t_0 + \tau) - \bar{W}_i(t_0 + \tau) = \\ = \lambda_i \int_0^\tau e^{-\lambda_i(\tau - \xi)} \{N(t_0 + \xi) - \bar{N}(t_0 + \xi)\} d\xi \end{aligned}$$

или

$$\varepsilon_i(\tau) = \lambda_i \int_0^\tau e^{-\lambda_i(\tau - \xi)} \varepsilon(\xi) d\xi. \quad (6.130)$$

Если обозначить

$$A_\tau = \max |\varepsilon(\xi)| \quad (0 \leq \xi \leq \tau), \quad (6.131)$$

то

$$|\varepsilon_i(\tau)| \leq \lambda_i A_\tau \int_0^\tau e^{-\lambda_i(\tau-\xi)} d\xi = (1 - e^{-\lambda_i \tau}) A_\tau. \quad (6.132)$$

Так как $\lambda_i > 0$ для всех i , то при $0 \leq \tau \leq h < \infty$

$$|\varepsilon_i(\tau)| < A_\tau. \quad (6.133)$$

Таким образом, необходимо лишь определить A_τ . Из соотношения (6.127) имеем

$$\varepsilon(\tau) = N(t_0 + \tau) - \bar{N}(t_0 + \tau)$$

и, следовательно,

$$\varepsilon(\tau) = \int_0^\tau K(\tau, \xi) \varepsilon(\xi) d\xi - E_M(\tau). \quad (6.134)$$

Используя резольвенту, можно формально написать [39]

$$-\varepsilon(\tau) = E_M(\tau) + \int_0^\tau S(\tau, \xi) E_M(\xi) d\xi.$$

Если бы мы смогли определить $S(\tau, \xi)$, то имели бы явное выражение для $\varepsilon(\tau)$ и тем самым наша первоначальная задача была бы решена. Во всяком случае, в написанном выше соотношении погрешность $\varepsilon(\tau)$ выражена через «известные» величины и ее оценка сводится к оценке $S(\tau, \xi)$. Мы не станем обсуждать здесь этой задачи, а приведем лишь один простой результат. Можно показать [40], что если

$$|K(\tau, \xi)| \leq M, \quad (6.135)$$

то

$$|S(\tau, \xi)| \leq M e^{M(\tau-\xi)}. \quad (6.136)$$

Фактически можно утверждать, что если

$$K(\tau, \xi) = M > 0,$$

то

$$S(\tau, \xi) = M e^{M(\tau-\xi)}. \quad (6.137)$$

Это соответствует постоянной реактивности без учета запаздывающих нейтронов. Следовательно, вряд ли можно получить лучший результат, пригодный для всех случаев. Поэтому основное внимание следует уделить более детальному исследованию важных частных случаев. Тем не менее для рассмотренного выше случая можно написать

$$|\varepsilon(\tau)| \leq |E_M(\tau)| + \int_0^\tau |S(\tau, \xi)| |E_M(\xi)| d\xi \quad (6.138)$$

или, если обозначить

$$B_\tau = \max |E_M(\xi)|, \quad 0 \leq \xi \leq \tau, \quad (6.139)$$

то

$$A_\tau \leq B_\tau \left(1 + \int_0^\tau M e^{M(\tau-\xi)} d\xi \right) \quad (6.140)$$

и, следовательно,

$$A_\tau \leq B_\tau e^{M\tau}. \quad (6.141)$$

Мы могли бы получить такой же результат непосредственно из уравнения (6.134), применяя лемму Гронуолля [41], однако нам кажется, что использованный подход дает иногда больше информации.

6.2.6. Уравнения обратной связи. Хотя мы все время имели в виду, что реактивность может зависеть не только от времени, но и от других переменных, мы в явном виде не обсуждали вопросов, связанных с вычислением реактивности и уравнениями обратной связи. Разумеется, эти уравнения могут изменяться при переходе от одного реактора к другому, в связи с чем невозможно создать единой программы для расчета кинетики реактора, пригодной для всех случаев. Поэтому обычная программа по кинетике состоит из некоторой группы подпрограмм, которые используются во всех расчетах, и из другой группы подпрограмм, которые могут меняться от реактора к реактору. Обычно программы, связанные с вычислением реактивности и уравнениями обратной связи, попадают во вторую группу.

Однако в некоторых программах сделана попытка свести к минимуму объем программирования, выполняемого потребителем. Это достигается путем создания некоторых общих подпрограмм, которые могут быть использованы при конкретных расчетах, если в качестве входных данных задать значения параметров, используемых в подпрограмме. Например, в программе AIROS [2] имеется подпрограмма, которая может быть использована, если задать закон изменения реактивности в следующем виде:

$$r(t) = r(0) + \gamma_1 t + \sum_{j=1}^m A_j [F_j(t) - F_j(0)], \quad t \leq (t_s + \tau_D). \quad (6.142)$$

Здесь $r(0)$ — начальное значение реактивности, задаваемое на входе или определяемое путем решения уравнения обратных часов при постоянном обратном периоде, *долл*; γ_1 — скорость линейного включения реактивности, *долл/сек*; A_j — коэффициент реактивности для j -й обратной связи; F_j — j -й параметр обратной связи; t_s — момент аварийной остановки; τ_D — сдвиг по времени между аварийной остановкой и началом движения управляющего стержня (определяется из τ_{j_s}); j_s — число обратных связей, способных вызывать аварийную остановку реактора; m — число параметров обратной связи.

Таким образом, записанное выше выражение для реактивности состоит из ступенчатого члена, включенного при $t = 0$, линейного члена, исчезающего в момент аварийной остановки, и компонент реактивности, пропорциональных отклонениям переменных обратной связи от их начальных значений.

Момент аварийной остановки определяется путем сравнения каждой из переменных обратной связи, способных вызвать остановку, со значением, определяемым начальными данными. В программе AIROS принят иной вид изменения реактивности после остановки.

Образцы подобных общих подпрограмм содержатся также в программах TRIP [42] и AIREK-MOD [43].

Вычисление переменных обратной связи требует более детального обсуждения. Как уже отмечалось выше, уравнения, описывающие эти переменные, могут изменяться от реактора к реактору. Однако и здесь имеются попытки использовать общие формы уравнений. В большинстве таких программ в качестве основной формы уравнения берется следующая:

$$\frac{dF_j(t)}{dt} = P_j N(t) + U_j N(0) + Y_j F_j(t) = \sum_{i=1}^m \alpha_{ij}(t) F_i(t), \quad (6.143)$$

где коэффициентами α_{ij} определяется связь между i -й и j -й переменными обратной связи. Коэффициенты P_j , U_j и Y_j могут быть введены как часть входных данных. Эти переменные могут быть использованы для описания различных видов теплопередачи (включая обычную теплопроводность и конвекцию),

энергии, давления и других переменных. Если, например, $U_j = Y_j = \alpha_{ij} = 0$, то

$$\frac{dF_j}{dt} = P_j N(t), \quad (6.144)$$

где P_j — начальная мощность реактора, $M\text{см}$; $F_j(t)$ — энергия, выделяемая за время t . Не каждое из уравнений обратной связи можно считать линейным, поэтому требуется приложить определенные усилия при составлении расчетной программы, чтобы решить такие уравнения.

Из последних двух уравнений видно, как осуществляется обратная связь. Ясно, что реактор может рассматриваться как типичная система с обратной связью. Изменение реактивности вызывает изменение $N(t)$, которое, в свою очередь, вызывает изменение $F_j(t)$. Эти последние изменения ведут к изменению реактивности и т. д. Проблема устойчивости является, конечно, центральной проблемой при изучении любой системы с обратной связью. Мы не будем обсуждать эту проблему, однако интересующемуся читателю можно рекомендовать работу Сметса [44], в которой содержится детальное обсуждение вопроса и приведена обширная библиография.

Полезно отметить, что временные постоянные, связанные с линейными и нелинейными уравнениями обратной связи, обычно на несколько порядков превышают временные постоянные, связанные с уравнениями кинетики реакторов. Мы также видели, что методы решения таких уравнений (с небольшими значениями временных постоянных) значительно сложнее «стандартных» методов, которые могут быть использованы при решении почти всех других уравнений обратной связи. Однако, до тех пор пока значения переменных обратной связи могут быть рассчитаны с необходимой точностью в произвольной точке, нет объективных причин не использовать более простые способы интегрирования, чтобы сократить расчетное время.

Необходимо также отметить, что если при интегрировании тепловых уравнений (характеризующихся обычно большой постоянной времени) используется величина шага, соответствующая временной постоянной кинетики реактора, то изменения в тепловых переменных могут оказаться сравнимыми с погрешностью округления. В таком случае разумно использовать большую величину шага для тепловых уравнений, а не для уравнений кинетики. В программе, составленной таким образом, величина шага, относящегося к тепловому уравнению, является произведением некоторого интеграла на величину шага, используемого при решении уравнений кинетики.

Например, в программе BOOMER [45] для интегрирования используется метод Эйлера. Основное предположение этого метода состоит в том, что на шаге интегрирования переменные изменяются линейно. Для простоты предположим, что кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{dN}{dt} = f(N, T), \quad N(t_0) = N_0, \quad (6.145)$$

а тепловое уравнение имеет вид

$$\frac{dT}{dt} = g(N, T), \quad T(t_0) = T_0. \quad (6.146)$$

Если теперь для решения уравнения (6.145) используется шаг по времени Δt , а для решения уравнения (6.146) — шаг $n\Delta t$, то для расчета T в промежуточных точках, необходимых для вычисления $N(t)$, воспользуемся выражением

$$T(t_0 + j\Delta t) = T_0 + j\Delta t g(N_0, T_0) \quad (j = 1, 2, \dots, n), \quad (6.147)$$

т. е. будем применять интерполяционную схему. Более детальные схемы, связанные с использованием метода Рунге—Кутты, развиты Райсом [46],

а для методов «предиктор — корректор» — Форрингтоном [47]. Интерполяционные схемы, соответствующие методам, обсуждавшимся в этой главе, еще не созданы, однако они должны быть особенно полезны при решении многогрупповых уравнений кинетики.

§ 6.3. ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАВИСИМАЯ КИНЕТИКА

6.3.1. Введение. Для любого энергетического реактора экономически выгодно иметь как можно более высокую температуру. Однако по соображениям безопасности необходимо работать в определенных температурных пределах, зависящих от свойств материалов, принимая во внимание конструктивные допуски. Некоторый запас реактивности необходим для компенсации эффектов при переходных процессах как при нормальной работе, так и при авариях. Излишняя простота моделей может легко привести к неоправданно консервативным конструкциям и условиям управления. Следовательно, нужно изучать более сложные модели. Однако если многогрупповые расчеты для стационарных условий в одномерном и двухмерном приближениях являются вполне обычным делом, то вследствие вычислительных трудностей, рассмотренных в предыдущих разделах, расчеты пространственно-зависимой кинетики находятся еще в стадии экспериментирования, как этой было в прошлом с трехмерными стационарными расчетами.

Проводя пространственно-независимые расчеты, мы вычисляем зависимость амплитуды потока от времени, предполагая, что пространственное распределение потока остается неизменным. Разумеется, это эквивалентно методу, используемому для решения дифференциальных уравнений в частных производных с помощью разделения переменных. Однако использование такого метода не всегда возможно. Например, в реакторе с кипящей водой плотность воды может весьма существенно меняться по объему активной зоны, вызывая тем самым пространственные изменения в различных ядерных параметрах. При переходных процессах плотность воды может меняться также и во времени. В таком случае метод разделения переменных непригоден, и для решения соответствующих задач должны быть разработаны иные методы.

Пространственные эффекты важны также и для других типов реакторов. Пикеринг [48] сравнил расчетные значения изменения температуры и потока, вызванные небольшим движением стержней управления в Колдер-холлском реакторе. Сравнение было проведено с помощью многомерной одногрупповой кинетической программы STAB [49] и программы SIP [50], в которой используется точечная модель.

Таблица 6.1

Сравнение результатов расчетов изменений температуры и потока при небольшом перемещении управляющего стержня

| Время, мин | Изменение температуры топлива, °C | | | | | | Среднее изменение потока, % | |
|---------------|-----------------------------------|-----|-----|-----|------------------|-----|-----------------------------|-----|
| | STAB | | | | | SIP | STAB | SIP |
| | a | b | c | d | средние значения | | | |
| 2 | 9,2 | 6,6 | 5,9 | 4,3 | 7,8 | 7,3 | 4,0 | 3,9 |
| 4 | 9,4 | 8,2 | 5,5 | 4,5 | 8,0 | 8,2 | 3,3 | 3,5 |
| 10 | 9,5 | 8,3 | 5,5 | 4,5 | 8,0 | 8,0 | 3,2 | 3,3 |
| 20 | 9,7 | 8,5 | 5,5 | 4,5 | 8,1 | 7,6 | 3,2 | 3,1 |

Расчеты проводились в различных точках реактора:

а) вблизи оси на расстоянии одной четверти высоты активной зоны от верхней границы активной зоны;

б) вблизи боковой поверхности на расстоянии одной четверти высоты активной зоны от верхней границы активной зоны;

в) вблизи оси на расстоянии одной четверти высоты активной зоны от нижней границы активной зоны;

г) вблизи боковой поверхности на расстоянии одной четверти активной зоны от нижней границы активной зоны.

Из таблицы видно, что, несмотря на значительную пространственную неоднородность, программа SIP дает достаточно точную оценку как средней температуры, так и изменений потока. Язински и Генри [51] проделали расчеты,

показавшие, что на результаты, получаемые с помощью точечной модели, нельзя полагаться даже при оценке порядка вычисляемых величин.

Они рассмотрели очень простую активную зону в виде плоского слоя с составом, типичным для легководного энергетического реактора. Ее можно было трактовать как большой слабо связанный реактор.

На рис. 6.2 приведена зависимость реактивности от времени, полученная с помощью точечной модели и «точной» модели (программа WIGLE, использующая конечно-разностную технику [52]). Расхождение возникает вследствие смещения кривой потока в область увеличения сечения деления. На рис. 6.3 показаны результаты расчетов изменения температуры реактора, критического на мгновенных нейтронах, для двух различных моделей. Мы видим, что использование точечной модели приводит к ошибке порядка 10^4 . Аналогичные расчеты проведены для небольшой «жестко» связанной активной зоны. Даже здесь точечная модель дает оценку пика мощности с ошибкой в четыре раза.

Таким образом, мы видим, насколько важно иметь возможность выполнять пространственно-зависимые расчеты. Все вычислительные трудности, встречающиеся при использовании точечной модели, могут встретиться и в более сложной модели. К тому же теперь следует рассматривать не систему обыкновенных уравнений, а систему уравнений в частных производных. При этом имеют место не только обычные осложнения, связанные с введением новых пространственных

переменных, но и осложнения, связанные с необходимостью выполнения многогрупповых расчетов для лучшего учета пространственных эффектов. Методы таких расчетов в настоящее время разработаны еще недостаточно хорошо и являются темой интенсивных исследований. В следующих разделах мы рассмотрим некоторые методы, которые были использованы в программах экспериментального характера.

6.3.2. Конечно-разностные методы. Формулировка уравнений пространственно-зависимой кинетики приводит к системе квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Возможности решения таких уравнений с помощью конечно-разностных методов весьма интенсивно изучались [53—57]. Доказательства эффективности этих методов прак-

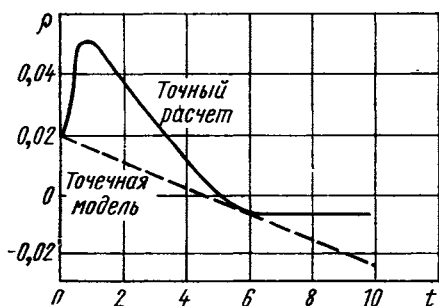


Рис. 6.2. Зависимость реактивности от времени [51].

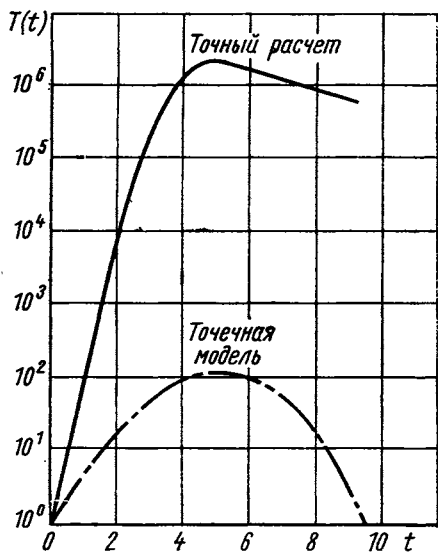


Рис. 6.3. Зависимость температуры от времени для реактора, критического на мгновенных нейтронах.

тически уже получены при решении задач теплопроводности газодинамики и т. п. В этом разделе мы будем исследовать пригодность подобных методов к решению задач кинетики реактора. Проиллюстрируем эти методы, рассмотрев некоторые конкретные программы.

Простейшее обобщение точечной модели заключается в учете пространственных эффектов только в одном измерении [52, 58, 59]. Мы рассмотрим такую модель, использованную в программе COSTANZA [58, 60] (Испра, ЕВРАТОМ). Эта программа предназначена для описания переходов в реакторе TESI, который предназначен для изучения процесса разрушения топливных элементов для другого реактора при резком увеличении нейтронного поля. Реактор и его работа описаны следующим образом [58].

«Из критического состояния при очень низкой мощности реактор переходит в состояние мгновенной критичности. Нейтронный поток очень быстро растет, и поскольку в течение переходного периода реактор не охлаждается, то соответственно возрастает и температура активной зоны. Активная зона обладает большим отрицательным температурным коэффициентом реактивности и, следовательно, при достижении определенного уровня потока реактор становится подкритическим, и после весьма непродолжительного всплеска поток падает.

С помощью системы охлаждения температура реактора может быть снижена до своего первоначального значения в течение двух или трех часов. Таким образом, будут созданы условия для нового всплеска. Однако система охлаждения не оказывает воздействия на протяжении переходного периода (т. е. в течение нескольких секунд), который здесь излучается. Температура растет как интеграл от потока и стремится к своей конечной максимальной величине.

Активная зона реактора TESI имеет форму вертикального цилиндра высотой 145 см и состоит из однородной смеси топлива и графита. Имеется радиальный, а также два торцевых отражателя толщиной 60 см. Реактор содержит два типа стержней управления. Стержни первого типа расположены в промежутке между активной зоной и радиальным отражателем. При их полном введении они отделяют активную зону от отражателя. Стержни второго типа опускаются сверху в активную зону. Мы будем рассматривать их одновременное перемещение в осевом направлении при одинаковой глубине погружения. При этом стержни мы заменим однородно распределенным отражателем.

Так как мы располагаем программой, в которой учитывается только одно измерение (в вертикальном направлении Z), то вместо цилиндрической активной зоны конечных размеров будет рассматриваться бесконечная в горизонтальном направлении пластина с толщиной, равной высоте активной зоны, и с верхним и нижним отражателями. В случае цилиндра существует утечка нейтронов в горизонтальном направлении. Отсутствие утечки в случае бесконечной пластины мы компенсируем увеличением сечения захвата на величину $B_r^2 D$.

Для правильного описания источников тепловых нейтронов, возникающих в отражателе в процессе замедления быстрых нейтронов, используется двухгрупповое приближение. Предполагается, что имеется только одна группа запаздывающих нейтронов, а постоянная распада λ усредняется с соответствующими весами по шести основным группам [61]. Уравнение теплового баланса содержит только члены, соответствующие выделению и поглощению тепла, которые должны быть равны, так как на протяжении переходного процесса тепло не отводится.

Уравнения, описывающие такую систему, можно взять в следующем виде:

$$D_1 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial z^2} - \left(\frac{D_1}{\tau} + D_1 B_r^2 \right) \varphi_1 + k(1-\beta) \Sigma_a \varphi_2 + \lambda C = \frac{1}{V_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial t}, \quad (6.148)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial z^2} - (\Sigma_a^c + D_2 B_r^2 + \Sigma_p) \varphi_2 + \frac{D_1}{\tau} \varphi_1 = \frac{1}{V_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial t}, \quad (6.149)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = k \Sigma_a \beta \varphi_2 - \lambda C, \quad (6.150)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{F}{c} \cdot \frac{k}{v} \Sigma_a \varphi_2. \quad (6.151)$$

Здесь D_i — коэффициент диффузии нейтронов i -й группы; φ_i — поток нейтронов i -й группы; k — коэффициент размножения для бесконечной среды; τ , τ_r — возраст нейтронов в активной зоне и отражателе; B_r — радиальный геометрический параметр; V_i — скорость нейтронов i -й группы; ν — среднее число вторичных нейтронов, рождающихся в одном акте деления; Σ_a^c , Σ_a^r — сечение захвата в активной зоне и отражателе; Σ_p — сечение захвата эффективного отравителя; c — удельная теплоемкость, $\text{кал/см}^3 \text{ } ^\circ\text{C}$; F — тепло, выделяемое в одном акте деления ($7,66 \cdot 10^{-12}$ кал).

Первые два уравнения справедливы для точек активной зоны. В отражателе используются следующие уравнения:

$$D_1 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial z^2} - \left(\frac{D_1}{\tau_r} + D_1 B_r^2 \right) \varphi_1 = \frac{1}{V_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial t}, \quad (6.152)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial z^2} - (\Sigma_a^r + \Sigma_p + D_2 B_r^2) \varphi_2 + \frac{D_1}{\tau_r} \varphi_1 = \frac{1}{V_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial t}. \quad (6.153)$$

Коэффициенты уравнений могут меняться от одной области к другой, все очевидные индексы опущены. Граничные условия имеют вид

$$\varphi_1(0, t) = \varphi_2(0, t) = \varphi_1(H, t) = \varphi_2(H, t) = 0.$$

Здесь H — высота реактора. Начальные условия [значения $\varphi_1(z, 0)$ и $\varphi_2(z, 0)$] должны быть либо заданы, либо рассчитаны при помощи специальной программы с учетом начального распределения отравления.

Начальную температуру реактора обозначим T_0 . Некоторые коэффициенты зависят от температуры, а следовательно, и от потока. В программе используются следующие соотношения:

$$\Sigma_a^c(z, t) = \Sigma_{a0}^c \sqrt{\frac{T_0}{T(z, t)}}; \quad \Sigma_p(z, t) = \Sigma_{p0} \sqrt{\frac{T_0}{T(z, t)}};$$

$$V_1(z, t) = V_{10} \sqrt{\frac{T(z, t)}{T_0}}; \quad V_2(z, t) = V_{20} \sqrt{\frac{T(z, t)}{T_0}}.$$

Величины Σ_{a0}^c , Σ_{p0} , V_{10} и V_{20} соответствуют начальной температуре. Величины k , τ и c вычисляются с помощью линейной интерполяции по таблицам, задаваемым на входе. При расчетах исходят из предположения, что различные коэффициенты и зависимые переменные известны в некоторый момент времени t_n и что все величины должны быть вычислены в момент времени $t_n + \Delta t$. Как легко заметить, задача является нелинейной. Ее можно линеаризовать, либо предположив, что Δt настолько мало, что коэффициенты не меняются на этом интервале, либо используя итерационный прием, при котором значения коэффициентов заменяются новыми, основанными на вновь получаемых значениях переменных.

Уравнения заменяются конечно-разностными уравнениями. Предполагается, что в каждой области используется равномерная пространственная сетка и что внутри каждой области имеется по крайней мере одна узловая точка z_i , в то время как граница между двумя областями обязательно является узловой точкой. Конечно-разностное приближение для вычисления пространственных производных мы обсудим подробно в следующем разделе. Здесь лишь отметим, что в программе COSTANZA используется простой метод (обратного вычитания), который устойчив при любых значениях Δt . Этот метод заключается в решении (на каждом временном шаге) системы уравнений, которые по виду подобны конечно-разностным уравнениям, используемым при решении одномерного диффузионного уравнения.

При проведении расчетов перемещение регулирующих стержней может быть задано как функция времени. Расчет температуры выполняется просто в каждой узловой точке сетки z_i с помощью формулы

$$\frac{T_i(t_n + \Delta t) - T_i(t_n)}{\Delta t} = \frac{F}{c_i} \cdot \frac{k_i}{v} \sum_{ai} \varphi_{2i}(t_n + \Delta t). \quad (6.154)$$

Значения коэффициентов определяются затем с помощью нового значения $T(t)$, и по существу, эти значения являются «запаздывающими» по сравнению с истинными, так как для их вычислений используется значение $T(t)$, соответствующее предшествующему шагу по времени. Является ли подобная аппроксимация достаточно точной или нет, зависит от многих факторов, таких, как величина Δt , скорость изменения коэффициентов и т. д. Разумеется, в сомнительных случаях расчеты могут быть выполнены с помощью итерационного процесса, описанного выше.

Аппроксимация производной по времени. Для упрощения рассуждений в этом разделе мы рассмотрим простой аналог уравнения (6.148). Уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6.155)$$

является дифференциальным уравнением параболического типа, так же как и уравнение (6.148). Методы численного решения уравнения теплопроводности изучены достаточно полно, и качественные свойства решения обоих уравнений весьма сходны. Используя простое уравнение, мы хотим подчеркнуть определенные трудности получения численного решения пространственно-зависимого уравнения кинетики реактора.

Предположим, что необходимо получить численное решение уравнения (6.155) в некоторой области $R: 0 \leq x \leq 1, t \leq 0$. Используем прямоугольную сетку на R с узловыми точками (x_i, t_n) такими, что $x_0 = 0, x_N = 1, x_i = x_{i-1} + \Delta x$ ($i = 1, 2, \dots, N - 1$), $t_n = t_{n-1} + \Delta t$ для $n \geq 0, t_0 = 0$. В дальнейшем величину a будем предполагать постоянной.

Один из простейших методов нахождения численного решения уравнения (6.155) — «явный» метод, заключающийся в вычислении решения в момент t_{n+1} непосредственно через известное решение в момент t_n с помощью следующего соотношения:

$$\frac{w(x_i, t_{n+1}) - w(x_i, t_n)}{\Delta t} = \frac{a [w(x_{i+1}, t_n) - 2w(x_i, t_n) + w(x_{i-1}, t_n)]}{(\Delta x)^2}. \quad (6.156)$$

Через $w(x_i, t_n)$ в уравнении (6.156) обозначено приближенное значение для $u(x_i, t_n)$. Предыдущее уравнение перепишем в виде $[w_{i,n} = w(x_i, t_n)]$

$$w_{i,n+1} - w_{i,n} = ar [w_{i+1,n} - 2w_{i,n} + w_{i-1,n}], \quad (6.157)$$

где $r = \Delta t / (\Delta x)^2$. При $ar \leq 1/2$, т. е. при

$$\Delta t \leq (\Delta x)^2 / 2a, \quad (6.158)$$

процесс численного решения уравнения (6.157) неустойчив [57]. В реакторных расчетах значение a может изменяться по порядку величины от 10^3 до 10^6 , и в таком случае шаг по времени должен быть очень малым по сравнению с обычной продолжительностью переходного процесса. Но этот прямой разностный метод очень прост для программирования и используется в ряде программ [59, 69]. Совершенно очевидна связь между этим методом и методом Эйлера при пространственно независимых расчетах.

Чтобы обойти ограничение в величине шага, были сделаны попытки использовать иные способы получения численного решения теплового уравнения. Были развиты такие неявные методы, как возвратный разностный метод [55] и метод Крэнка—Николсона [53], которые являются устойчивыми независимо

от величины шага по времени. Подробное обсуждение этих методов можно найти в нескольких работах [56, 57].

В программе COSTANZA используется возвратный разностный метод. Если мы применим этот метод к уравнению (6.155), то мы найдем, положив $a \equiv 1$, что

$$\frac{\omega_{i, n+1} - \omega_{i, n}}{\Delta t} = \frac{\omega_{i-1, n+1} - 2\omega_{i, n+1} + \omega_{i+1, n+1}}{(\Delta x)^2} \quad (6.159)$$

или

$$-\omega_{i-1, n+1} + (2 + 1/r)\omega_{i, n+1} - \omega_{i+1, n+1} = \omega_{i, n}/r. \quad (6.160)$$

Таким образом, необходимо решить систему линейных уравнений, так как в каждой из узловых точек справедливы аналогичные уравнения. В методе Крэнка—Николсона производится усреднение приближенного значения второй производной на каждом шаге по времени и значения на предыдущем шаге. Получается следующий результат:

$$\frac{\omega_{i, n+1} - \omega_{i, n}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\frac{\omega_{i-1, n+1} - 2\omega_{i, n+1} + \omega_{i+1, n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\omega_{i-1, n} - 2\omega_{i, n} + \omega_{i+1, n}}{(\Delta x)^2} \right] \quad (6.161)$$

или

$$\begin{aligned} -\omega_{i-1, n+1} + 2(1 + 1/r)\omega_{i, n+1} - \omega_{i+1, n+1} = \\ = \omega_{i-1, n} - 2(1 - 1/r)\omega_{i, n} + \omega_{i+1, n}. \end{aligned} \quad (6.162)$$

Возвратное разностное уравнение может быть получено путем разложения функции $u(x, t)$ в ряд Тейлора вблизи точки $x = i\Delta x$, $t = (n + 1)\Delta t$, в то время как уравнение Крэнка—Николсона может быть получено путем разложения $u(x, t)$ вблизи точки $x = i\Delta x$, $t = (n + \frac{1}{2})\Delta t$. Однако различные способы вывода позволяют нам понять природу трудностей, ожидающих нас при использовании этих методов для получения решения уравнений кинетики реактора.

Пусть надо аппроксимировать решение уравнения (6.155) в точке x_i решением системы уравнений

$$\frac{dV_i}{dt} = \frac{V_{i-1}(t) - 2V_i(t) + V_{i+1}(t)}{(\Delta x)^2} \quad (i = 1, 2, \dots, N - 1), \quad (6.163)$$

где $V_i(t)$ — приближенное значение $u(x_i, t)$. Тогда можно написать для $i = 1, 2, \dots, N - 1$

$$V_i(t_n + \tau) = V_i(t_n) + \frac{1}{(\Delta x)^2} \int_0^\tau \Delta^2 V_i(t_n + \xi) d\xi, \quad (6.164)$$

где

$$\Delta^2 V_i(t_n + \xi) = V_{i-1}(t_n + \xi) - 2V_i(t_n + \xi) + V_{i+1}(t_n + \xi). \quad (6.165)$$

Используем для решения системы (6.164) метод коллокации. Предположим, что на некотором интервале времени

$$V_i(t_n + \xi) \approx \omega_i(t_n + \xi) = V_i(t_n)(1 + A_i \xi/\Delta t), \quad (6.166)$$

где постоянные A_i подлежат определению. Функции $\omega_i(t_n + \xi)$ не обязательно должны быть решениями уравнений (6.164), однако они должны удовлетворять уравнению

$$\begin{aligned} \omega_i(t_n + \tau) = V_i(t_n) + \frac{1}{(\Delta x)^2} \int_0^\tau \left\{ \Delta^2 V_i(t_n) + \right. \\ \left. + \frac{\xi}{\Delta t} [A_{i-1} \omega_{i-1}(t_n) - 2A_i V_i(t_n) + A_{i+1} V_{i+1}(t_n)] \right\} d\xi + \\ + E_i(\tau_i, A_1, \dots, A_{N-1}). \end{aligned} \quad (6.167)$$

Определим неизвестные коэффициенты A_i , потребовав, чтобы $E_i(\Delta t/p; A_1, \dots, A_{N-1}) = E_i(\Delta t/p)$ обращались в нуль для всех значений i и некоторых значений p . Итак,

$$V_i(t_n)(1 + A_i/p) = V_i(t_n) + \frac{r}{p} \Delta^2 \omega_i(t_n) + \frac{r}{2p^2} [A_{i-1} V_{i-1}(t_n) - 2A_i V_i(t_n) + A_{i+1} V_{i+1}(t_n)]. \quad (6.168)$$

Следовательно,

$$-\frac{r}{2p^2} A_{i-1} V_{i-1}(t_n) + \frac{1}{p} \left(1 + \frac{r}{p}\right) A_i V_i(t_n) - \frac{r}{2p^2} A_{i+1} V_{i+1}(t_n) = \frac{r}{p} \Delta^2 \omega_i(t_n) \quad (6.169)$$

или

$$-A_{i-1} V_{i-1}(t_n) + 2p \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{p}\right) A_i V_i(t_n) - A_{i+1} V_{i+1}(t_n) = 2p \Delta^2 \omega_i(t_n) \quad (i = 1, 2, \dots, N-1). \quad (6.170)$$

После решения системы уравнений (6.170) надо вычислить $\omega_i(t_n + \Delta t)$. Добавим к обеим частям уравнения (6.170) выражение

$$-V_i(t_n) + 2p(1/r + 1/p) V_i(t_n) - V_{i+1}(t_n). \quad (6.171)$$

Тогда получим новое уравнение

$$-V_{i-1}(t_n)(1 - A_{i-1}) + 2p(1/r + 1/p) V_i(t_n)(1 + A_i) - V_{i+1}(t_n)(1 + A_{i+1}) = (2p - 1) V_{i-1}(t_n) + [2p(1/r + 1/p) - 4p] V_i(t_n) + (2p - 1) V_{i+1}(t_n). \quad (6.172)$$

Выберем теперь для p определенное значение. Если $p = 1$, то получим уравнение

$$-V_{i-1}(t_n + \Delta t) + 2(1 + 1/r) V_i(t_n + \Delta t) - V_{i+1}(t_n + \Delta t) = V_{i-1}(t_n) - 2(1 - 1/r) V_i(t_n) + V_{i+1}(t_n), \quad (6.173)$$

которое совпадает с уравнением Крэнка—Николсона (6.162). При $p = 1$ погрешность $E_i(\Delta t)$ обращается в нуль на конце интервала. Если $p = 1/2$, то имеем уравнение

$$-V_{i-1}(t_n + \Delta t) + (1/r + 2) V_i(t_n + \Delta t) - V_{i+1}(t_n + \Delta t) = V_i(t_n) r, \quad (6.174)$$

совпадающее с возвратным разностным уравнением (6.160). Оно соответствует обращению в нуль погрешности в точке, находящейся вне рассматриваемого интервала.

Следовательно, метод Крэнка—Николсона и возвратный разностный метод являются частными случаями метода коллокации. Пространственно-зависимая модель реактора содержит в себе все сложности пространственно-независимой модели плюс некоторые дополнительные. Отсюда следует, что мы не должны ожидать исчезновения трудностей, аналогичных тем, которые отмечены Каганов в связи с программой RE-29 и обсуждались в разд. 6.2.4.

Программа STAB. Ниже будет проведено краткое обсуждение некоторых свойств программы STAB. Программа STAB была создана для описания некоторых деталей, представляющих интерес в случае графитового реактора с газовым охлаждением: особенностей работы органов управления, эффектов отравления ксеноном и тепловых эффектов. Программа написана для задач с цилиндрической геометрией (r, θ, Z). Учтены эффекты обратной связи между реактивностью, с одной стороны, и изменением температуры топлива и замедлителя, концентрацией ксенона и положением стержней управления — с другой. Отсюда видно, что без введения каких-либо ухищрений программа потребует значительных затрат расчетного времени.

Один из возможных способов заключается в таком упрощении задачи, чтобы при работе на ЭВМ, оперативная память которой составляет примерно 32 000 слов, можно было бы не пользоваться внешним запоминающим устройством для хранения констант, промежуточных данных и пр. Предполагается, что можно ограничиться только одной группой мгновенных нейтронов и, следовательно, должна рассматриваться только активная зона реактора. Подробный вывод и обоснование однокрупповой модели даны в цитированной выше работе Нахаванди и фон Холлена [59]. В модели используются однородные граничные условия.

При таких ограничениях пространственная сетка активной зоны может иметь не более 1500 точек. На каждом шаге по времени конечно-разностные уравнения решаются с помощью экстраполяционного метода Либмана. Для (r, θ, Z) -сетки интегрирование с помощью точек (10, 8, 17) на одном шаге по времени занимает на IBM 704 около 15 мин. При использовании возвратного конечно-разностного метода по оси времени найдено, что для получения достаточной точности в быстрой части переходного процесса величина шага не должна превышать нескольких секунд, в то время как в медленной части вполне безопасно использовать шаги в 5 или 10 мин. В современных ЭВМ имеется большой объем памяти, и, конечно, большее число расчетных точек может быть использовано для той же модели. Кроме того, имеются ЭВМ, обладающие значительно большей скоростью счета. Тем не менее ясно, что время счета одного шага по времени еще слишком велико.

6.3.3. Вариационные методы. Использование конечно-разностных методов для отыскания приближенного решения уравнения кинетики реактора продиктовано тем обстоятельством, что мы имеем дело с краевой задачей для уравнений в частных производных. Однако задача может быть переформулирована таким образом, что появится возможность использовать иные методы. С математической точки зрения краевая задача для дифференциального уравнения эквивалентна задаче вариационного исчисления по минимизации интеграла, для которого данное дифференциальное уравнение является уравнением Эйлера—Лагранжа. Эта эквивалентность очень важна, так как она позволяет заменить отыскание приближенного решения первоначальной задачи отысканием приближенного решения вариационной задачи. В качестве примера рассмотрим интеграл

$$F\{u\} = \iint_R \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + 2f(x, y)u \right] dx dy, \quad (6.175)$$

в котором интегрирование распространено на область R , ограниченную кривой Γ . Надо найти функцию $u(x, y)$, непрерывную в области R , вместе с ее первыми и вторыми частными производными, принимающую на границе Γ определенные значения

$$u = g(s) \text{ на } \Gamma \quad (6.176)$$

и соответствующему минимуму интеграла F .

Найдем необходимые условия для того, чтобы функция отвечала минимуму интеграла. Предположим, что $u(x, y)$ минимизирует интеграл, и рассмотрим функцию $v(x, y) = u(x, y) + \varepsilon \eta(x, y)$, где $\eta(x, y)$ удовлетворяет тем же условиям регулярности, что и $u(x, y)$, и обращается в нуль на Γ . Будем рассматривать ε как параметр, величина которого определяет близость функций $v(x, y)$ и $u(x, y)$. Итак, $v(x, y)$ принимает на Γ те же значения, что и $u(x, y)$. Так как $u(x, y)$ соответствует минимальному значению F , то для достаточно малого значения ε

$$F\{v(x, y)\} \geq F\{u(x, y)\}. \quad (6.177)$$

Интеграл F , рассматриваемый как функция ε , имеет минимум при $\varepsilon = 0$ и, следовательно,

$$\left. \frac{d}{d\varepsilon} F\{u(x, y) + \varepsilon \eta(x, y)\} \right|_{\varepsilon=0} = 0. \quad (6.178)$$

Это выражение называется вариацией F и обозначается обычно символом δF . Таким образом, необходимое условие того, что F примет минимальное значение, состоит в следующем:

$$\delta F = \frac{d}{d\varepsilon} F \{u(x, y) + \varepsilon \eta(x, y)\} \Big|_{\varepsilon=0} = 0. \quad (6.179)$$

Для частного случая задачи, которую мы изучаем, имеем

$$\delta F = \iint_R \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + 2f\eta \right] dx dy = 0. \quad (6.180)$$

Требуемый результат может быть получен путем преобразования первых двух членов интегрального выражения с помощью формулы Грина

$$\begin{aligned} \iint_R \left[\frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + f\eta \right] dx dy &= \iint_R \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] dx dy - \\ &- \iint_R \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - f \right) \eta dx dy = \\ &= \iint_F \left(\frac{\partial u}{\partial x} \eta dy - \frac{\partial u}{\partial y} \eta dx \right) - \iint_R (\Delta u - f) \eta dx dy. \end{aligned} \quad (6.181)$$

Так как $\eta(x, y) = 0$ на Γ , то первый интеграл равен нулю, и мы получаем следующий результат:

$$\delta F = -2 \iint_R (\Delta u - f) \eta dx dy. \quad (6.182)$$

Условие $\delta F = 0$ должно выполняться при произвольной функции $\eta(x, y)$ вследствие чего имеем уравнение

$$\Delta u = (\partial^2 u / \partial x^2) + (\partial^2 u / \partial y^2) = f(x, y). \quad (6.183)$$

Можно показать, что полученное необходимое условие является также и достаточным. Это можно сделать, если предварительно доказать неравенство

$$\Delta F = F \{u(x, y) + \eta(x, y)\} - F \{u(x, y)\} > 0,$$

где $\eta(x, y) = 0$ на Γ и удовлетворяет условиям регулярности, сформулированным выше.

Полученное выше дифференциальное уравнение есть известное уравнение Пуассона. Если же $f(x, y) = 0$ в \bar{R} , то получается уравнение Лапласа. Это уравнение является уравнением Эйлера—Лагранжа, соответствующим интегралу F . В более общем случае, если мы рассмотрим задачу отыскания минимума двойного интеграла

$$F = \iint_R G(x, y, u, u'_x, u'_y) dx dy, \quad (6.184)$$

то получим уравнение Эйлера—Лагранжа в следующей форме:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial G}{\partial u'_x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial G}{\partial u'_y} \right) - \frac{\partial G}{\partial u} = 0. \quad (6.185)$$

Так как наша задача сформулирована в форме дифференциального уравнения, подобного выписанному выше, то следует подобрать выражение для G , т. е. найти такой вариационный принцип, который бы соответствовал заданному дифференциальному уравнению.

Затем можно воспользоваться для получения приближенного решения методом Канторовича [61]. Основная идея этого метода состоит в предположе-

нии, что решение задачи может быть представлено в виде совокупности функций, каждая из которых зависит только от одной переменной. Таким образом, часть решения известна заранее, в то время как остальная часть определяется затем исходя из условий конкретной задачи. С помощью такого приема можно свести задачу кинетики реактора, записанную в форме уравнений, зависящих от одной или более пространственных переменных, к задаче решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащих в качестве независимой переменной время t . Такая вычислительная задача аналогична задачам, связанным с однородными реакторами.

Вариационный принцип. При выводе подходящего вариационного принципа мы будем следовать в основном рассуждениям Доугерти и Шена [62]. Полученный результат мы используем в качестве отправной точки для применения метода Канторовича в форме, предложенной Галлидани [63]. Для удобства ограничимся рассмотрением случая двух групп мгновенных нейтронов и используем при построении вариационного принципа только одну пространственную переменную. Однако вскоре будет видно, что такие ограничения не являются существенными.

Многогрупповые уравнения кинетики в однородной форме могут быть записаны следующим образом:

$$P\varphi = 0, \quad (6.186)$$

где $P = (L - V^{-1} \partial/\partial t)$. Пренебрегая захватом быстрых нейтронов и полагая, что деление ядер осуществляется только тепловыми нейтронами, запишем в двухгрупповом приближении

$$L = \begin{bmatrix} \nabla D_1 \nabla & -A_{11} A_{12} + S_D \\ A_{21} & \nabla D_2 \nabla - A_{22} \end{bmatrix}; \quad (6.187)$$

$$V^{-1} = \begin{bmatrix} V_1^{-1} & 0 \\ 0 & V_2^{-1} \end{bmatrix}; \quad \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}; \quad (6.188)$$

$$S_D \varphi_2 = \nu \beta \sum_{p=1}^G \lambda_p f_p \int_{-\infty}^t dt (\Sigma_{j2} \varphi_2 e^{-\lambda_p (t-\tau)}). \quad (6.189)$$

Определенный таким образом оператор S_D описывает запаздывающие нейтроны; постоянные A_{ij} ($i, j = 1; 2$) зависят от ν , β и различных сечений. Явный вид для нас несуществен.

Сопряженный оператор P^* определяется уравнением

$$\int_0^\tau \int_R dt d\bar{R} \{ \varphi^* P \varphi - \varphi P^* \varphi^* \} = 0,$$

где R — рассматриваемая область изменения переменных. Потребовав, чтобы

$$\int_R d\bar{R} \{ \varphi^* L \varphi - \varphi L^* \varphi^* \} = 0,$$

найдем после интегрирования по частям, что на открытом интервале $0 < t < \tau$ сопряженное уравнение имеет вид

$$L^* \varphi^* = -V \frac{\partial \varphi^*}{\partial t}, \quad (6.190)$$

где

$$\varphi^* = [\varphi_1^*, \varphi_2^*]. \quad (6.191)$$

Вариационный принцип, который мы теперь сформулируем, включает не только уравнения кинетики реактора, но и выписанные выше сопряженные уравнения.

Будем считать, что реактор ограничен плоскостями $x = x_0$ и $x = x_N$ и что на этих границах функции φ_1 и φ_2 обращаются в нуль. Рассмотрим функционал

$$F_0\{\varphi^*, \varphi\} = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \varphi^* \left[V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial}{\partial x} \right) - H \right] \varphi \right\}, \quad (6.192)$$

предполагая, что в одномерном случае оператор L может быть записан в следующем виде:

$$L = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial}{\partial x} \right) + H. \quad (6.193)$$

Прежде всего вычислим $\delta F_0\{\varphi^*, \varphi\}$:

$$\begin{aligned} \delta F_0\{\varphi^*, \varphi\} &= \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta\varphi^* \left[V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial}{\partial x} \right) - H \right] \varphi \right\} + \\ &+ \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \varphi^* \left[V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial}{\partial x} \right) - H \right] \delta\varphi \right\}. \end{aligned} \quad (6.194)$$

Выполнив интегрирование по частям, найдем

$$\begin{aligned} \delta F_0\{\varphi^*, \varphi\} &= \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta\varphi^* \left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi \right\} - \\ &- \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta\varphi \left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + L^* \right) \varphi^* \right\} - \\ &- \sum_{j=1}^{N-1} \int_0^\tau dt \left\{ \left(\varphi^* D \frac{\partial \delta\varphi}{\partial x} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} \right) - \left(\delta\varphi D \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.195)$$

Через x_j ($j = 1, 2, \dots, N-1$) обозначены точки (их число конечно), в которых подынтегральное выражение может иметь разрывы. Иными словами, подынтегральная функция предполагается кусочно-непрерывной. Далее, если φ и φ^* (а также соответствующие им токи) непрерывны в пространстве и во времени при $x_0 < x < x_N$ и $0 < t < \tau$ и обращаются в нуль в конечных точках x_0 и x_N , то выписанные выше граничные члены обращаются в нуль. Наконец, вследствие того что вариации $\delta\varphi$ и $\delta\varphi^*$ выбираются независимо, для выполнения условия $\delta F_0 = 0$ необходимо, чтобы удовлетворялись уравнения

$$\left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi = 0; \quad \left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + L^* \right) \varphi^* = 0.$$

Эти уравнения вместе с граничными условиями полностью эквивалентны первоначальной задаче.

Итак, получаем вариационный принцип для рассматриваемой задачи. Теперь надо найти приближенное решение. Согласно подходу, который мы собираемся использовать, запишем:

$$\varphi_i(x, t) = \sum_{n=1}^M C_n^i(t) W_n(x); \quad (6.196)$$

$$\varphi_i^*(x, t) = \sum_{n=1}^M C_n^{*i}(t) W_n(x) \quad (i = 1; 2), \quad (6.197)$$

где W_n предполагаются известными функциями, а $C_n^i(t)$ и $C_n^{*i}(t)$ подлежат определению. Следует заметить, что во многих представляющих интерес задачах коэффициенты диффузии меняются как во времени, так и в пространстве,

вследствие чего удобно разбить реактор на области, в которых поперечные сечения непрерывны. На границе между этими областями необходимо потребовать непрерывность пробных функций φ и φ^* и соответствующих им токов. Однако, учитывая зависимость от времени коэффициента диффузии, весьма трудно подобрать такую группу функций $W_n(x)$ в выражении для пробных функций, которая позволила бы удовлетворить условиям непрерывности тока. Поэтому полезно модифицировать вариационный принцип таким образом, чтобы решение задачи удовлетворяло не только уравнениям кинетики, но и условиям непрерывности тока на внутренних границах.

Рассмотрим функционал

$$F_1 \{ \varphi^*, \varphi \} = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \varphi^* V^{-1} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \right) D \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varphi^* H \varphi \right\}. \quad (6.198)$$

Легко показать, что

$$\delta F_1 (\varphi^*, \varphi) = I + J,$$

где

$$I = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta \varphi^* V^{-1} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \delta \varphi^*}{\partial x} \right) D \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \delta \varphi^* H \varphi \right\}, \quad (6.199)$$

$$J = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \varphi^* V^{-1} \delta \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \right) D \delta \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varphi^* H \delta \varphi \right\}. \quad (6.200)$$

Тогда, выполняя интегрирование по частям, получим

$$I = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta \varphi^* \left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi \right\} + \int_0^\tau dt \left\{ \sum_{i=1}^N \delta \varphi^* D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} \right\},$$

где функция $D(x, t)$ предполагается кусочно-непрерывной, имеющей разрывы не более чем в конечном числе точек x_j .

Если класс вариаций ограничен таким образом, что $\delta \varphi^*(x_0) = \delta \varphi^*(x_N) = 0$ и $\delta \varphi^*(x_j^-) = \delta \varphi^*(x_j^+)$ при $j = 1, 2, \dots, N-1$, то

$$I = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta \varphi^* \left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi \right\} + \int_0^\tau dt \left\{ \sum_{j=1}^{N-1} \delta \varphi^*(x_j) \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-} \right) \right\}$$

или

$$I = \int_0^\tau \int_{x_0}^{x_N} dt dx \left\{ \delta \varphi^* \left[\left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi + \sum_{j=1}^{N-1} \delta(x - x_j) \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-} \right) \right] \right\}. \quad (6.201)$$

В уравнении (6.201) $\delta(x - x_j)$ — обычная дельта-функция.

Для выполнения условия $\delta F_1 = 0$ интегралы I и J должны обращаться в нуль при произвольных вариациях, равных нулю на внешних границах областей и непрерывных в пространственных точках x_j , так как вариации $\delta \varphi^*$ и $\delta \varphi$ предполагаются независимыми. Отсюда следует, что функционал $F_1(\varphi^*, \varphi)$ стационарен в окрестности функции φ , удовлетворяющей уравнению

$$\left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L \right) \varphi + \sum_{j=1}^{N-1} \delta(x - x_j) \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-} \right) = 0. \quad (6.202)$$

Аналогично $F_1(\varphi^*, \varphi)$ стационарен в окрестности функции φ^* , удовлетворяющей уравнению

$$\left(V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + L^*\right) \varphi^* - \sum_{j=1}^{N-1} \delta(x-x_j) \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-}\right) = 0. \quad (6.203)$$

Эти уравнения могут быть сведены к совокупности однородных уравнений с соответствующими граничными условиями. Из (6.202) следует, что

$$\left\{V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} - L\right\} \varphi = 0 \quad \text{и} \quad D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-} = 0,$$

а из (6.203)

$$\left\{V^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + L^*\right\} \varphi^* = 0 \quad \text{и} \quad D \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Big|_{x_j^+}^{x_j^-} = 0.$$

Таким образом, мы получили требуемый вариационный принцип.

Метод Канторовича. Используя определенные математические условия, Галлидани обобщил полученный выше принцип [63], рассмотрев функционал

$$\begin{aligned} F_2(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_1^*, \varphi_2^*) = & \int_0^{t^*} dt \left\{ \sum_{k=1}^r \int_{R_k} d\delta \left(\varphi_1^* \left[\frac{1}{V_1} \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} \right] + \text{grad } \varphi_1^* [D_1 \text{grad } \varphi_1] + \right. \right. \\ & + \varphi_1^* [A_{11} \varphi_1 - A_{12} \varphi_2 - S_D \varphi_2] + \varphi_2^* \left[\frac{1}{V_2} \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + \text{grad } \varphi_2^* [D_2 \text{grad } \varphi_2] + \right. \\ & \left. \left. + \varphi_2^* [-A_{21} \varphi_1 + A_{22} \varphi_2] \right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.204)$$

Начальные и граничные условия имеют следующий вид ($i = 1; 2$):

$$\begin{aligned} \varphi_i(x, t) = \varphi_i^*(x, t) = 0 & \quad \text{при } x \in R, \\ \varphi_i(x, t) = \varphi_i^*(x, t) = 0 & \quad \text{при } x \in \Gamma_1 \text{ и } 0 \leq t \leq t^*, \\ \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial \eta} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} = 0 & \quad \text{при } x \in \Gamma_2 \text{ и } 0 \leq t \leq t^*, \end{aligned}$$

где Γ — граница R ; $\Gamma_2 = \Gamma - \Gamma_1$, а Γ_1 имеет ненулевую длину. Функции $V_i(x, t)$ и $D_i(x, t)$ предполагаются положительными, а A_{ij} ($i, j = 1; 2$) — неотрицательными. Основные уравнения совпадают с (6.186)—(6.189), а сопряженные уравнения в отличие от (6.190) должны быть записаны в виде

$$L^* \varphi^* = -\partial \left(V^{-1} \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right), \quad (6.205)$$

так как функция V не предполагается постоянной.

Галлидани устанавливает эквивалентность решений двух задач, одна из которых заключается в решении дифференциальных уравнений, а вторая связана с вариационным исчислением. Он делает еще предположение о медленном изменении $S_D \varphi_2$. Это произведение должно меняться настолько слабо, что если интервал $[0, t^*]$ разбить на l интервалов одинаковой длины Δt , то с достаточной точностью вместо $\varphi_2(x, t)$ можно брать $\varphi_2(x, t - \Delta t)$. Таким образом, $S_D \varphi_2$ можно записать как $S(x, t)$, т. е. как неоднородный член уравнения.

Далее, как уже обсуждалось выше, в методе Канторовича поток $\varphi_i(x, t)$ и сопряженный поток $\varphi_i^*(x, t)$ должны быть представлены в виде сумм линейно независимых пробных функций $W_n(x)$ с зависящими от времени коэффициентами C_n^i и C_n^{i*} , т. е.

$$\left. \begin{aligned} \varphi_i(x, t) = \sum_{n=1}^N C_n^i(t) W_n(x) \quad (i = 1; 2); \\ \varphi_i^*(x, t) = \sum_{n=1}^N C_n^{i*}(t) W_n(x). \end{aligned} \right\} \quad (6.206)$$

Будем предполагать, что $W_n(x)$ обладает необходимыми свойствами регулярности внутри \bar{R}_k и что

$$f_i(x) = \sum_{n=1}^N \gamma_n^i W_n(x). \quad (6.207)$$

Подставим теперь выражения (6.206) для $\varphi_i(x, t)$ и $\varphi_i^*(x, t)$ в уравнение (6.204). Чтобы записать результат более компактно, введем следующие обозначения:

$$Z_i(t) = (Z_{m,n}^i(t))_{m,n=1}^N, \quad R_{ij}(t) = r_{m,n}^{ij} = (r_{m,n}^{ij}(t))_{m,n=1}^N, \quad (6.208)$$

$$C_i(t) = \begin{pmatrix} C_1^i(t) \\ C_2^i(t) \\ \vdots \\ C_N^i(t) \end{pmatrix}, \quad C_i^*(t) = (C_1^{*i}(t), C_2^{*i}(t), \dots, C_N^{*i}(t)),$$

$$Q_1(t) = \begin{pmatrix} q_1(t) \\ q_2(t) \\ \vdots \\ q_N(t) \end{pmatrix}, \quad (6.209)$$

где

$$Z_{m,n}^i(t) = \sum_{k=1}^r \int_{R_k} d\sigma \left[\frac{1}{V_1(x,t)} W_m(x) W_n(x) \right], \quad (6.210)$$

$$r_{m,n}^{ij}(t) = \sum_{k=1}^r \int_{R_k} d\sigma \{ \delta_{ij} [D_i(x,t) \text{grad } W_m(x) \text{grad } W_n(x)] + A_{ij}(x,t) W_m(x) W_n(x) \}, \quad (6.211)$$

$$q_m(t) = \sum_{k=1}^r \int_{R_k} d\sigma W_m(x) S(x,t). \quad (6.212)$$

В уравнении (6.211) δ_{ij} —дельта-символ Кронекера. Теперь можно записать

$$\begin{aligned} & F_2 \{ C_1(t), C_2(t), C_1^*(t), C_2^*(t) \} = \\ & = \int_0^{t^*} dt \left(C_1^*(t) \left[Z_1(t) \frac{dC_1(t)}{dt} + R_{11}(t) C_1(t) - R_{12}(t) C_2(t) - Q_1(t) \right] + \right. \\ & \left. + C_2^*(t) \left[Z_2(t) \frac{dC_2(t)}{dt} - R_{21}(t) C_1(t) + R_{22}(t) C_2(t) \right] \right). \end{aligned} \quad (6.213)$$

Уравнения Эйлера—Лагранжа, соответствующие уравнению (6.213), запишутся следующим образом:

$$\begin{bmatrix} Z_1(t) & 0 \\ 0 & Z_2(t) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dC_1}{dt} \\ \frac{dC_2}{dt} \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} R_{11}(t) & -R_{12}(t) \\ -R_{21}(t) & R_{22}(t) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1(t) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.214)$$

Кроме того, $C_n^i(0) = \gamma_n^i$ ($i = 1, 2$ и $n = 1, 2, \dots, N$). Легко показать, что $Z_i(t)$ и $R_{ii}(t)$ — положительно определенные матрицы, так как $V_i(x, t)$ и $D_i(x, t)$ положительны, а $A_{ij}(x, t)$ по крайней мере не отрицательна.

В качестве пробных функций Галлидани использует собственные функции (соответствующие основным собственным значениям) следующей задачи:

$$\left. \begin{aligned} \Delta W(x) &= \mu W(x) = 0 && \text{для } x \in R, \\ W(x) &= 0 && \text{для } x \in \Gamma_1, \\ \frac{\partial W(x)}{\partial \eta} &= 0 && \text{для } x \in \Gamma_2. \end{aligned} \right\} \quad (6.215)$$

Здесь важно отметить, что задача сведена теперь к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащих t в качестве независимой переменной, и что этот результат справедлив для любого числа пространственных переменных. Галлидани решает полученную систему, используя простой разностный метод, эквивалентный методу Эйлера,

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{cc} \frac{1}{\Delta t} Z_1(t) + R_{11}(t) & -R_{12}(t) \\ -R_{21}(t) & \frac{1}{\Delta t} Z_2(t) + R_{22}(t) \end{array} \right] \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta t} Z_1(t) C_1(t - \Delta t) + Q_1(t) \\ \frac{1}{\Delta t} Z_2(t) C_2(t - \Delta t) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.216)$$

Такой подход является наиболее прямым способом получения приближенного решения уравнения (6.214), однако известно, что он не самый эффективный.

В дальнейшем необходимо изучить возможность использования других способов решения уравнения (6.214).

6.3.4. Заключение. Мы коротко обрисовали лишь некоторые из большого числа возможных методов решения задач пространственно-зависимой кинетики. В настоящее время не существует метода, который имел бы очевидные преимущества перед другими. Методы еще только развиваются. Например, в работе Язински и Генри [51] обсуждаются и сравниваются такие методы, как адиабатическое приближение [64], многомодовый «синтетический» метод [65] и два «узловых» метода [66, 67]. Рассмотрение отдельных примеров показывает, что наилучшим является «синтетический метод» и что на практике можно ограничиться лишь несколькими пробными функциями. Однако, поскольку не рассматривается явление обратной связи, пока трудно получить адекватный вывод даже этих методов. Тем не менее Гарабедианом и Линчем [68], а также Генри были предложены другие методы,

Таким образом, остается еще очень много работы по совершенствованию и оценке численных приемов решения уравнений. Необходимость такой работы настолько очевидна, что существенного прогресса можно ожидать уже в течение нескольких ближайших лет.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ФУНКЦИИ $C_n(x)$

§ П.1. ВВЕДЕНИЕ

Функции $C_n(x)$, определяемые соотношением

$$C_n(x) = \int_0^1 u^{n-1} e^{x(1-u)} du \quad (n \geq 1), \quad (\text{П.1})$$

были введены в (6.69) и (6.70). Эти функции в форме

$$I_n(ah) = \int_0^h e^{a(h-t)} t^{n-1} dt \quad (\text{П.2})$$

появляются во многих формулах численного интегрирования уравнений кинетики реактора. Если положить $x = ah$ и $t = uh$, то

$$I_n(x) = h^n C_n(x). \quad (\text{П.3})$$

Вычисление величин $C_n(x)$ для фиксированных значений x и n занимает весьма существенную часть расчетного времени на каждом временном шаге интегрирования, возможно, превосходящую время расчета самой реактивности. Вообще говоря, необходимо вычислить $C_n(x)$ для нескольких значений n и для двух или более значений x из интервала интегрирования. Поэтому весьма полезно исследовать задачу о вычислении указанных функций более подробно.

§ П.2. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

Выполняя интегрирование по частям, нетрудно показать, что

$$C_{n+1}(x) = [nC_n(x) - 1]/x, \quad (\text{П.4})$$

и так как

$$C_1(x) = (e^x - 1)/x, \quad (\text{П.5})$$

то

$$C_2(x) = (e^x - 1 - x)/x^2;$$

$$C_3(x) = 2(e^x - 1 - x - x^2/2)/x^3.$$

Отметим, что согласно (П.1) $C_n(x) > 0$ для всех конечных значений x и что $C_n(0) = 1/n$. Кроме того, при фиксированном значении x функция $C_n(x)$ является монотонно убывающей функцией n , так как

$$C_n(x) - C_{n+1}(x) = \int_0^1 u^{n-1} (1-u) e^{x(1-u)} du > 0. \quad (\text{П.6})$$

Кроме того,

$$C'_n(x) = \int_0^1 u^{n-1} (1-u) e^{x(1-u)} du \quad (\text{П.7})$$

и, следовательно,

$$C'_n(x) = C_n(x) - C_{n+1}(x). \quad (\text{П.8})$$

Очевидно, что $C'_n(x) > 0$, т. е. производные $C_n(x)$ положительны.

§ П.3. ФОРМУЛА УДВОЕНИЯ

Во многих случаях необходимо вычислять как $C_n(x)$, так и $C_n(2x)$. Это соответствует вычислениям в средней и конечной точках интервала интегрирования. Поскольку $C_n(x)$ содержит e^x , то можно надеяться получить весьма простое соотношение между $C_n(x)$ и $C_n(2x)$. Из (П.5) следует, что

$$C_1(2x) = C_1(x) \{1 + x C_1(x)/2\}. \quad (\text{П.9})$$

Так как для всех конечных x справедливо неравенство $x C_1(x)/2 > -1/2$, то эта формула дает прекрасный способ расчета $C_1(2x)$, и число арифметических операций, необходимое для расчета $C_1(2x)$, существенно сокращается.

Рассматривая функцию $C_2(2x)$ [выраженную через $C_1(2x)$], найдем, что

$$C_2(2x) = [C_1^2(x) + 2C_2(x)]/4. \quad (\text{П.10})$$

Рассматривая произведение $C_1(x) C_2(x)$, можно показать, что

$$C_3(2x) = [C_1(x) C_2(x) + C_2(x) + C_3(x)]/4. \quad (\text{П.11})$$

Выразив $C_4(2x)$ через $C_3(2x)$, получим

$$C_4(2x) = [3C_2^2(x) + 3C_3(x) + C_4(x)]/8 \quad (\text{П.12})$$

и аналогично

$$C_5(2x) = [6C_2(x)C_3(x) + 3C_3(x) + 4C_4(x) + C_5(x)]/16. \quad (\text{П.13})$$

Рассматривая также произведение $C_1(x)C_3(x)$, найдем

$$C_5(2x) = [2(C_1(x)C_4(x) + C_4(x) + C_2(x)) + 3C_3(x) + C_5(x)]/16. \quad (\text{П.14})$$

Вообще говоря, формула (П.14) предпочтительнее формулы (П.13). Формулы (П.10), (П.12) и (П.13) были получены Коэнном.

Выписанных выше формул вполне достаточно для приложений, однако, если окажется необходимым, формулы для больших значений n могут быть получены аналогичным образом. При возрастании n формулы становятся более сложными, поэтому, может быть, для достаточно больших значений n прямое вычисление $C_n(2x)$ потребует меньше расчетного времени.

§ П.4. РЕКУРРЕНТНОЕ СООТНОШЕНИЕ

Очевидно, что при значениях x , близких к нулю, использование рекуррентных соотношений (П.4) для вычисления $C_2(x)$, $C_3(x)$ и т. д. по известным значениям $C_1(x)$ связано с определенными трудностями, которые могут быть проиллюстрированы с помощью следующей таблицы:

| $C_n(-0,1)$ | | |
|-------------|---------|------------|
| 1 | 0,95163 | 0,95162582 |
| 2 | 0,4837 | 0,4837418 |
| 3 | 0,326 | 0,325164 |
| 4 | 0,22 | 0,24508 |
| 5 | 1,2 | 0,1968 |

Результаты, выписанные во второй и третьей колонках, получены с помощью указанного числа значащих цифр. Если же для малого x вычислить предварительно значение C_5 , то остальные величины могут быть легко вычислены с помощью соотношения

$$C_n(x) = [1 + xC_{n+1}(x)]/n, \quad (\text{П.15})$$

следующего из (П.4). С помощью метода, аналогичного использованному Гаучи, можно показать, что по крайней мере для $n \leq 5$ имеет место следующее правило:

- при $x \leq 1$ следует использовать обратную рекуррентную формулу (П.15);
- при $x > 1$ — прямую формулу (П.4).

§ П.5. НЕПОСРЕДСТВЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ

Согласно сформулированному выше правилу при $x \leq 1$ приходится использовать обратную рекуррентную формулу и, следовательно, в этом случае необходимо вычислять $C_n(x)$ непосредственно. Легко показать, что

$$C_n(x) = \frac{1}{n} \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n!}{(n+m)!} x^m \right\} \quad (\text{П.16})$$

или

$$C_n(x) = \frac{1}{n} \Phi(1, n+1; x), \quad (\text{П.17})$$

где

$$\Phi(1; n+1; x) = \frac{1}{1 - \frac{x}{n+1} + \frac{x}{n+2} - \frac{(n+1)x}{n+3} + \frac{2x}{n+4} - \frac{(n+2)x}{n+5} + \dots} \quad (\text{П.18})$$

Используя эту цепную дробь, можно получить несколько приближений для $C_n(x)$. Запишем

$$C_n(x) \approx \frac{1}{n} R_m(x), \quad (\text{П.19})$$

где $R_m(x)$ — m -е приближение для $\Phi(1, n+1, x)$. Хорошо известно, что функция $R_m(x)$ может быть выражена в виде отношения двух полиномов, т. е.

$$R_m(x) = P_m(x)/Q_m(x). \quad (\text{П.20})$$

Вычисления показывают, что приближение

$$C_4(x) \approx \frac{1}{4} \cdot \frac{P_3(x)}{Q_3(x)}, \quad (\text{П.21})$$

$$\frac{1}{4} P_3(x) = 0,25 - 0,025x + 0,0016666667x^2 + 0,0000099206449x^3, \quad (\text{П.22})$$

$$Q_3(x) = 1 - 0,3x + 0,033333333x^2 - 0,0013888889x^3, \quad (\text{П.23})$$

дает на интервале $[-1, +1]$ восемь правильных значащих цифр. Эта аппроксимация требует меньшего числа арифметических операций, чем аппроксимация с помощью ряда Тейлора на том же интервале и с той же точностью.

Как формула удвоения, так и аппроксимационное выражение (П.21) многократно проверялись при использовании в расчетных программах и признаны вполне удовлетворительными. Их использование может быть рекомендовано всюду, где необходимо экономить расчетное время.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- α — определяется соотношением (6.61)
- B^2 — геометрический параметр
- β — суммарная доля запаздывающих нейтронов
- β_i — доля запаздывающих нейтронов i -й группы
- C_i — концентрация предшественников запаздывающих нейтронов i -й группы
- $C_n(x)$ — вспомогательные функции, определенные в Приложении
- D — коэффициент диффузии
- $E_M(\tau)$ — мера погрешности, вносимой заменой точного решения на $\bar{N}(t_0 + \tau)$ [см. (6.128)]
- ϵ — малое положительное число, фигурирующее в анализе погрешностей
- f_i — отношение β_i/β
- Φ — поток нейтронов
- Φ^* — функция, сопряженная потоку нейтронов
- G — число групп запаздывающих нейтронов
- h — величина шага при численном интегрировании
- k_{eff} — эффективный коэффициент размножения
- k_{ex} — избыточный коэффициент размножения
- l — эффективное время жизни нейтрона
- λ_i — постоянная распада предшественника запаздывающих нейтронов i -й группы
- Λ — среднее время жизни поколения нейтронов
- N — плотность нейтронов
- \bar{N} — приближенное значение N
- ν — среднее число нейтронов, рождающихся в одном акте деления
- $\omega(t)$ — период реактора [см. (6.83)]
- ω_k — определяются уравнением (6.57)
- ρ — реактивность (k_{ex}/k_{eff})
- r — отношение ρ/β
- S_0 — внешние источники нейтронов
- Σ_a — сечение поглощения
- Σ_f — сечение деления
- t — время
- τ — время смещения

Δt — шаг по времени
 v — скорость мгновенных нейтронов
 V — определяется уравнением (6.64)
 $w_i = \frac{\Delta \lambda_i}{\beta} C_i$

ЛИТЕРАТУРА

- Lewins J. The Use of the Generation Time in Reactor Kinetics. Nucl. Sci. Engng, 7, 122 (1960).
- Blaine R. A., Berland R. F. AIROS, A Digital Simulator for Power Reactor Dynamics. NAA—SR—9943 (August 1964).
- Flatt H. P., Satkus D. P. SNACK—SNAP Code for Kinetics. NAA Program Description (February 1961).
- Cohn C. E., Toppel B. J. IBM—704 Codes for Reactivity Step Calculations (RE 126 and RE 135), ANL 6134 (March 1960).
- Argonne National Laboratory. «Reactor Physics Constants», 17—18, ANL—5800 (July 1963).
- Sangren W. C. Digital Computers and Nuclear Reactor Computations. John Wiley, New York, 1960.
- Smets H. Exact Solution of the Reactor Kinetics Equations for Linear, Exponential or Reciprocal Reactivity Dependence on Time. Bull. Acad. Sci. Belgique, 45, 256 (1959).
- Wallach S. Solutions of the Pile Kinetic Equations when the Reactivity is a Linear Function of the Time. WAPD—13 (1950).
- Wilkins J. E., Jr. The Behavior of a Reactor at Prompt Critical when the Reactivity is a Linear Function of Time. Nucl. Sci. Engng, 5, 207 (1959).
- Cohen E. R. Some Topics in Reactor Kinetics. Доклад на Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958.
- Blaine R. A., Berland R. F. AIROS, A Digital Simulator for Power Reactor Dynamics. NAA—SR—9943 (August 1964).
- См. [11].
- Henrici P. Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations. John Wiley, New York, 1962, p. 9.
- См. [13], стр. 66.
- Cohen E. R. Stability of Reactor Kinetics Calculations. IBM Nuclear Computing Technical Bulletin No. 4 (March 1962).
- Hansen K. F., Koen B. V., Little W. E., Jr. Stable Numerical Solutions of Reactor Kinetics Equations. Nucl. Sci. Engng, 22, 51 (1965).
- Cohen E. R. Stability of Reactor Kinetics Calculations. IBM Nuclear Computing Technical Bulletin No. 4 (March 1962).
- Wills L., Krumbain A., Soodak H., Certaine J., Gruber W. Amer. Nucl. Soc. Meeting. Abstract 5—3 (October 28, 1957).
- Cohen E. R. Some Topics in Reactor Kinetics. Доклад на Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958.
- Schwartz A. Generalized Reactor Kinetics Code AIREK—II. NAA—SR—MEMO 4980 (1959).
- Stiede W. L., Matsumoto D. D. TRIP, A Reactor Kinetics Code with Parameter Search. HW—78706 (August 1963).
- Blaine R. A., Berland R. F. AIROS, A Digital Simulator for Power Reactor Dynamics. NAA—SR—9943 (August 1964).
- Mongini-Tamagnini C. AIREK—MOD: A Modified Version of the Kinetic Code AIREK—II. EUR 1914. e (1964).
- Milne W. E. Numerical Calculus. Princeton University Press, Princeton, New York, 1949, p. 137.
- Ralston A., Wilf H. S. Mathematical Methods for Digital Computers. John Wiley, New York, 1962, p. 98.
- Warten R. M. Automatic Step-Size Control for Runge — Kutta Integration. IBM Journ. Res., 7, 340 (1963).
- Blaine R. A., Berland R. F. AIROS, A Digital Simulator for Power Reactor Dynamics. NAA—SR—9943 (August 1964).
- Cohen E. R., Flatt H. P. Numerical Solution of Quasi-Linear Equations. Codes for Reactor Computations, 461, IAEA, Vienna (1961).
- Blue L. R. Private communication.
- Akascu Z. General Solution of the Reactor Kinetics Equations without Feedback. Nucl. Sci. Engng, 3, 456 (1958).
- Minton G. H., Saalbach C. P. Numerical Solution of the Reactor Kinetics Equations. Trans. Amer. Nucl. Soc., 2, No. 2, 65 (1959).
- Brittan R. O. Some Problems in the Safety of Fast Reactors. ANL—5577 (1955).
- Kaganove J. J. Numerical Solution of the One—Group, Space Independent Reactor Kinetics Equations for Neutron Density Given the Excess Reactivity. ANL—6132 (1960).
- Kopal Z. Numerical Analysis. John Wiley, New York, 1955, p. 471.

35. Flatt H. P. The Numerical Solution of the Reactor Kinetics Equations by the Method of Collocation. IBM Nuclear Computing Technical Bulletin No. 5 (August 1962).
36. Cm. [35].
37. Cm. [35].
38. Flatt H. P. Some Remarks on Reactor Kinetics Calculations. Scandinavian Nuclear Codes Seminar (1962).
39. Volterra V. Theory of Functionals and Integral and Integro-Differential Equations. Dover Publications, New York, 1959, p. 43.
40. Cm. [39].
41. Sansone G. Equazioni Differenziali nel Campo Reale. Vol. I, 30—31. N. Zanichelli Bologna (1956).
42. Stiede W. L., Matsumoto D. D. TRIP, A Reactor Kinetics Code with Parameter Search. HW—72616.
43. Mongini-Tamagnini C. AIREC—MOD: A Modified Version of the Kinetic Code AIREC—II. EUR 1914.e (1964).
44. Smets H. Non-Linear Analytical Methods in Nuclear Power Reactor Kinetics. European Nuclear Energy Agency OECD, Paris (1961).
45. Winsor R. W. BOOMER—A Digital Program for Evaluating the Thermal and Kinetics Responce of a SNAP 2/10A Reactor, NAA—SR—MEMO 8414 (July 1963).
46. Rice J. R. Split Runge—Kutta Method for Simultaneous Equations. J. Res. National Bureau of Standards, 64B, 151 (1960).
47. Forrington C. V. D. Extensions of the Predictor—Corrector Method for the Solution of Systems of Ordinary Differential Equations. Computer Journal, 4, 80 (1961).
48. Pickering W. J. A Comparison with Experiment of Transient Results from the Spatial Kinetics Program STAB. TRG. 127(R).
49. Curtis A. R., Tyror J. G., Wrigley H. E. STAB: A Kinetic, Three-Dimensional, One-Group Digital Computer Program. AEEW—R77 (October 1961).
50. Roberts B. E. A Mercury Program for the Solution of Simultaneous First-Order Total Differential Equations of Basically Linear Form. DEG Report 140(R) (1961).
51. Yasinsky J. B., Henry A. F. Some Numerical Experiments Concerning Space-Time Reactor Kinetics Behavior. Nucl. Sci. Engng, 22, 171 (1965).
52. Cadwell W. R., Vigilotti A. J., Henry A. F. WIGLE—A Program for the Solution of the Two-Group Space-Time Diffusion Equations in Slab Geometry. WAPD TM—416 (January 1964).
53. Crank J., Nicholson P. A Practical Method for Numerical Evaluation of Solutions of Partial Differential Equations of the Heat-Conduction Type Proc. Camb. Phil. Soc., 43, 50 (1947).
54. O'Brien G. G., Hyman M. A., Kaplan S. A Study of the Numerical Solution of Partial Differential Equations. J. Math. Phys., 29, 223 (1951).
55. Douglas J. On the Numerical Integration of Quasi-Linear Parabolic Differential Equations. Pacific J. Math., 6, 35 (1956).
56. Richtmyer R. D. Difference Methods for Initial-Value Problems. Interscience Publ. Co., New York, 1958.
57. Ralston A., Wilf H. S. Mathematical Methods for Digital Computers. John Wiley, New York, 1962, p. 135.
58. Vincenti E., Monterosso R., Agazzi A. COSTANZA, A Numerical Code for the Study of the Reactor Spatial Dynamics in Two Groups. EUR 2103e (1964).
59. Nahavandi A. N., Von Hollen R. F. A Digital Computer Solution for Space-Dependent Neutron Kinetics Equations. Nucl. Sci. Engng, 18, 335 (1964).
60. Monterosso R., Vincenti E. Finite Difference Methods for Solving the Spatio-Temporal Diffusion Equation in the Two-Group Approximation. EUR 596.2 (1964).
61. Канторович Л. В., Крылов В. И. «Approximate Methods of Higher Analysis», 304—316, Interscience Publishers, New York (1958). (См. на русском языке: Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближенные методы высшего анализа. М.—Л., Физматгиз, 1962.)
62. Dougherty D. E., Shen C. N. The Space-Time Neutron Kinetic Equations Obtained by the Semidirect Variational Method. Nucl. Sci. Engng, 13, 141 (1962).
63. Galligani I. Variational Methods for the Solutions of Problems of Reactor Kinetics. ANL—ANS—ENEA Conference (May 1965).
64. Henry A. F., Curlee N. J. Verification of a Method for Treating Neutron Space Time Problems. Nucl. Sci. Engng, 4, 727 (1958).
65. Kaplan S., Marlowe O. J., Bewick J. Application of Synthesis Techniques to Problems Involving Time Dependence. Nucl. Sci. Engng, 18, 163 (1964).
66. Kaplan S., Ewen R., Curlee N. J., Margolis S. Space-Time Kinetics. Section 5.4, Naval Reactors Physics Handbook (1962).
67. Wachpress E. L., Burgess R. D., Baron S. Multi-Channel Flux Synthesis. Nucl. Sci. Engng, 12, 381 (1962).
68. Garabedian H. L., Lynch R. E. Nonlinear Reactor Kinetics Analysis. Nucl. Sci. Engng, 21, 550 (1965).
69. Henry A. F. The Application of Inhour Modes to the Description of Nonseparable Reactor Transients. Nucl. Sci. Engng, 20, 338 (1964).

КОМПЛЕКСНЫЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ НЕЙТРОННО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ**Р. Лазарус, В. Страттон*

(Лос-Аламосская научная лаборатория, Калифорнийский университет)

Т. Юз

(Аргоннская национальная лаборатория)

§ 7.1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе рассматриваются численные методы приближенного расчета поведения реакторов при коротких периодах разгона и высоких плотностях выделения энергии, обусловленных быстрым введением избыточной реактивности. В данной главе предполагается, что избыток реактивности компенсируется перемещением вещества активной зоны и температурными эффектами, вызванными повышением температуры при выбросе мощности. При этом уровень мощности также снижается. В некоторых случаях эти методы оказываются полезными в предсказании поведения реактора при контролируемых быстрых разгонах. Но основная задача главы состоит в изучении гипотетических аварий реакторов, в связи с чем интересно иметь представление о полном количестве энергии, выделяющейся в процессе разгона, и той ее доле, которая превращается в кинетическую энергию кусков реактора.

Для анализа таких процессов необходимо построить идеализированную модель реактора и получить совместное решение системы уравнений движения материалов реактора и уравнения переноса нейтронов. Эта взаимосвязь иллюстрируется рассмотрением взаимодействия следующих процессов. Вследствие роста реактивности происходит рост числа делений. При этом генерируется тепло, что, в свою очередь, приводит к росту давления, достаточного, чтобы вызвать движение вещества, которое влияет на реактивность. Высокие температуры влияют также на реактивность и через эффект Допплера, но этот аспект здесь не анализируется.

Были рассмотрены три подхода для описания происходящих при разгоне процессов. Первый из них основан на точечной модели для описания кинетики реактора (см. гл. 6 и [1—3]). Второй предложен Бете и Тайтом [4, 5]. Этот метод аналитический, он разработан при следующих предположениях: 1) изменение реактивности рассчитывается на основе теории возмущений первого порядка; 2) длительность разгона настолько мала, что изменение давления во времени можно рассчитывать без учета изменения плотности. Кроме того, не учитывается эффект распространения волн. Третий метод является предметом обсуждения данной главы, с его помощью на ЭВМ численно решаются уравнения в частных производных, описывающие происходящие процессы.

Первоначально эти численные методы использовались для расчета ядерных бомб, где их успешное применение обеспечивалось главным образом гомогенностью систем и высокими температурами материалов. Но расчетные процедуры могут быть применены и к соответствующим экспериментам. В случае взрыва энергетического реактора задача является более трудной и методы, рассматриваемые в этой главе, могут дать только порядок интересующих величин. Дело в том, во-первых, что недостаточно известны последствия процессов, приводящих к сверхкритическому состоянию. Во-вторых, трудно выбрать достаточно точную и поддающуюся расчету математическую модель гетерогенного реактора с учетом изменения фазового состояния материалов. Некоторые принципиальные трудности рассмотрения тяжелых аварий реакторов описаны в работе [5].

* Работа выполнена при содействии КАЭ США.

§ 7.2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим систему, полностью определенную в некоторый начальный момент времени $t = 0$. Это значит, что в каждой точке пространства известны состав материала, плотность, внутренняя энергия или температура и скорость. Предполагается известным и пространственно-энергетическое распределение нейтронов. Последующее поведение реактора характеризуется системой уравнений, описывающих перемещение материалов, выделение и перераспределение энергии и процессы распространения нейтронов.

Пусть переменная \mathbf{r} (называемая лагранжевой координатой) определяет точку в трехмерном пространстве и пусть также она обозначает для любого момента времени ту частицу материала нашей системы, которая находилась в начальный момент времени $t = 0$ в точке r . Через $\mathbf{R}(\mathbf{r}, t)$ обозначим положение частицы \mathbf{r} в более поздние моменты времени [тогда $\mathbf{r} = \mathbf{R}(\mathbf{r}, 0)$]. Предположим, что движение материала описывается уравнением движения сжимаемой жидкости.

Для скорости движения материала получается следующее выражение:

$$\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \text{grad } p, \quad \mathbf{u} = \dot{\mathbf{R}}, \quad (7.1)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ — скорость движения материала; $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ — плотность материала и $p = p(\mathbf{r}, t)$ — давление, определяемое уравнением состояния (точка над некоторой величиной всегда будет обозначать частную производную по времени t , а градиент p вычисляется по пространственным переменным). Иногда используют другие уравнения движения материала [6, 7]. Из закона сохранения массы для плотности материала получается выражение

$$\rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{R} = \rho(\mathbf{r}, 0) d\mathbf{r}, \quad (7.2)$$

где $d\mathbf{R}$ — дифференциальный элемент объема, связанный с частицей \mathbf{r} .

Обычная форма уравнения состояния связывает давление с плотностью и внутренней энергией (или температурой). Таким образом,

$$p(\mathbf{r}, t) = p[E(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}, t)] = p'[T(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}, t)]. \quad (7.3)$$

Выбор между внутренней энергией и температурой зависит от того, какая из этих переменных делает уравнение состояния более удобным и наглядным. Вообще говоря, уравнение состояния известно довольно плохо и поэтому используются различные упрощающие предположения. По-видимому, лучше всего записать уравнение в виде некоторой гладкой поверхности, проходящей через известные из теории и эксперимента точки.

Локальная скорость возрастания внутренней энергии определяется источником (главным образом источником деления), работой и рассеянием энергии:

$$\dot{E}(\mathbf{r}, t) = \dot{Q}(\mathbf{r}, t) - p(\mathbf{r}, t) \dot{V}(\mathbf{r}, t) + \text{скорость рассеяния}, \quad (7.4)$$

где $V(\mathbf{r}, t) = 1/\rho(\mathbf{r}, t)$ — удельный объем и $Q(\mathbf{r}, t)$ — локальная скорость выделения энергии в процессе соударений нейтронов с атомами материалов. Если температура выбрана в качестве независимой переменной, то, используя уравнение термодинамики

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T + p = T \left(\frac{\partial p'}{\partial T}\right)_V$$

и уравнение (7.4), можно получить уравнение для скорости изменения температуры:

$$\dot{T}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{C_V} \left[\dot{Q}(\mathbf{r}, t) - T(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\partial p'}{\partial T}\right)_V \dot{V}(\mathbf{r}, t) + \text{скорость рассеяния} \right],$$

где C_V — удельная теплоемкость при постоянном объеме. Если пренебречь переносом энергии посредством γ -излучения и предположить, что энергия,

передаваемая материалу в точке \mathbf{r} , пропорциональна нейтронному потоку в этой точке, то можно записать

$$\dot{Q}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (7.5)$$

где $\varepsilon(\mathbf{r})$ — средняя энергия, передаваемая при одном соударении; $\sigma(\mathbf{r})$ — сечение соударения и $\varphi(\mathbf{r}, t)$ — полный нейтронный поток. Отсутствие временной зависимости в ε и σ указывает на то, что изменение изотопного состава не учитывается. В начальный момент времени величина $\varphi(\mathbf{r}, 0)$ предполагается известной.

§ 7.3. УПРОЩЕННЫЕ МОДЕЛИ

7.3.1. Приближения. Чтобы упростить задачу до разумных пределов, учитывают, например, тот факт, что уравнение состояния известно довольно приближенно. Первое приближение состоит в замене сложной структуры реактора подходящей гомогенной моделью. Простейшая возможность — предположить, что система является однозонной и гомогенной. Но замена системы набором симметричных гомогенных зон с различным составом также не сильно усложняет расчет. Второе приближение состоит в замене трехмерной системы эквивалентной одномерной симметричной системой. Здесь мы ограничимся случаем сферической симметрии, хотя рассматривались также бесконечные и конечные цилиндрические системы [6, 8]. Мы будем изучать сферические системы, состоящие из K гомогенных зон разного состава.

Разгон может быть вызван непрерывным введением реактивности в течение некоторого промежутка времени или ступенчатым скачком реактивности (над состоянием критичности на мгновенных нейтронах) в течение времени, сравнимого со временем жизни мгновенных нейтронов. Если реактивность вводится постепенно, что более соответствует реальной аварийной ситуации на реакторе, то часто используется предположение о постоянстве скорости введения реактивности, которая определяется наклоном кривой реактивности в момент достижения реактором критичности на мгновенных нейтронах [5]. Однако во многих случаях можно показать, что такая постоянная скорость введения реактивности эквивалентна некоторому мгновенному скачку реактивности. Таким образом, предполагается, что разгон происходит после того, как система достигла мгновенной надкритичности, и обычно расчеты начинаются с мгновенно надкритичной системы [5]. Но программы могут обчислять также и коллапсирующие системы в процессе перехода в надкритическое состояние. В каждом случае предполагается, что рассматриваемый интервал времени настолько мал, что влиянием запаздывающих нейтронов можно пренебречь и что рассеяние энергии вследствие теплопроводности и излучения несущественно.

В рассматриваемой сферической модели перераспределение энергии учитывается посредством симметричного уравнения движения. Если некоторый сферический слой A в начале расчета находился внутри сферического слоя B , то в соответствии с одномерным уравнением движения этот порядок не изменится. Таким образом, в нашей упрощенной модели не учитывается движение малой доли внутреннего материала, который в реальном реакторе может вынести значительное количество энергии наружу через некоторый пустотный канал или полость. В качестве иллюстрации была выбрана сферическая модель графитового реактора с бериллиевым отражателем «Kiwi» для ракетного двигателя Лос-Аламосской научной лаборатории. Для активной зоны этого реактора характерны: 1) большой отрицательный коэффициент при медленных разгонах вследствие расширения графита; 2) малый отрицательный коэффициент при разгоне с коротким периодом, во время которого графит испаряется с такой скоростью, что возникающее при этом давление вызывает взрыв. В промежуточных случаях некоторые материалы в центральной части активной зоны испаряются, перемещаются по каналам теплоносителя в области с меньшей температурой (и меньшим весом реактивности) и конденсируются. Такая схема включает перемещение малой массы материала с высокой плотностью энергии на значительные расстояния, и эффективные проводимости

для таких «тепловых трубок» могут быть на пять порядков больше, чем обычная теплопроводность. Если при этом переносится значительное количество энергии, то соответствующий член с эффективной проводимостью нужно добавить в уравнение энергетического баланса.

7.3.2. Уравнение состояния. Как указывалось в § 7.2, в качестве переменной в уравнении состояния можно выбрать либо внутреннюю энергию, либо температуру. Использование внутренней энергии E особенно удобно для газов или при высоких температурах (значительно превышающих критическую температуру). В качестве «гибкого» приближения здесь иногда используется так называемый гамма-закон

$$p = (\gamma - 1) \rho E, \quad (7.6)$$

где $\gamma = C_p/C_v$ — отношение удельных теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме.

Использование температуры T в качестве переменной удобно в том случае, когда приближенное уравнение допускает более простую запись через температуру (например, с учетом фазовых переходов) или когда желательно проследить за изменением температуры. При описании «твердого» состояния удобной формой уравнения состояния является следующая:

$$p - p_0 = B_T \beta_T (T - T_0) + B_T (\rho - \rho_0) / \rho, \quad (7.7)$$

где β_T — объемный коэффициент расширения; B_T — изотермический объемный модуль упругости.

Можно также использовать различные уравнения состояния в различных диапазонах изменения переменных. Нередко приходится использовать в одной программе уравнения состояния и для твердого тела и для газа. Такая ситуация может создаться, если в системе имеются полости и если происходит процесс возгонки материала, а не ожидение. При этом нужно учитывать скрытую теплоту парообразования и давление паров должно быть ограничено величиной, которая используется при интегрировании уравнения Клапейрона — Клаузиуса.

Здесь нужно обратить внимание на две особенности. Во-первых, «твердое» тело выдерживает напряжения лишь до некоторого предела, а затем появляется текучесть. Во-вторых, возникает проблема «гомогенизации» системы, содержащей пустоты. Для иллюстрации первой особенности рассмотрим, например, уравнение (7.7) при $T = T_0$. Когда плотность упадет значительно ниже ρ_0 , давление станет отрицательным, т. е. появится стягивающее напряжение. В этом случае обычно принимают, что если давление $p(\rho, T)$ стало меньше некоторого заданного значения, его полагают равным нулю. Что касается второй особенности, то здесь вводят понятие пороговой энергии. Именно, давление считается равным нулю до тех пор, пока температура или внутренняя энергия не достигнет значений, при которых пустоты будут заполнены.

7.3.3 Сферическая модель. Итак, мы ограничились сферическими моделями без учета рассеяния энергии посредством теплопроводности и излучения. Для определенности выберем E и ρ в качестве термодинамических переменных в уравнении состояния. Для этого случая уравнения (7.1)–(7.4) сводятся к следующей системе уравнений:

уравнение движения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{R^2}{\rho_0 r^2} \cdot \frac{\partial p}{\partial r}, \quad u = \frac{\partial R}{\partial t};$$

уравнение неразрывности

$$\rho R^2 dR = \rho_0 r^2 dr;$$

уравнение энергии

$$\partial E / \partial t = \dot{Q} - p \cdot \partial V / \partial t, \quad V = 1/\rho;$$

уравнение состояния

$$p = p(E, \rho).$$

(7.8)

Лагранжева координата r определяет сферическую поверхность, которая была на расстоянии r от центра сферической системы в начальный момент времени $t = 0$; $\rho_0 = \rho(r, 0)$ — начальная плотность материала на поверхности r . В качестве начальных условий считаются известными плотность материала, внутренняя энергия, скорость перемещения материала и, в соответствии с уравнением состояния, давление. В качестве граничных условий предполагается, что центральная точка остается все время неподвижной, а на наружной поверхности $r = b$ можно поставить условие абсолютно жесткой стенки

$$R(b, t) = R(b, 0) \text{ для всех } t$$

или свободной поверхности

$$p(b, t) = 0 \text{ для всех } t.$$

Поведение полного нейтронного потока во времени рассчитывается в предположении разделения пространственной и временной переменных (т. е. экспоненциальной зависимости от времени) в одnogрупповом приближении

$$\varphi(r, t) = \Phi_0 \exp \left[\int_0^t \alpha(t) dt \right] N(r, t), \quad (7.9)$$

где Φ_0 — амплитуда начального потока, равная $\int_0^b 4\pi\varphi(r, 0) r^2 dr$, а пространственное распределение нормировано на единицу, т. е. $\int_0^b 4\pi N(r, t) r^2 dr = 1$.

Таким образом, временная зависимость α и N аппроксимируется последовательностью решений «стационарных» задач, полученных стандартными методами. Временной шаг между этими расчетами зависит от того, как сильно меняются α и N . В начальный момент времени α и N примерно постоянны и только позже, когда начинается расширение и разрушение материала, они начинают изменяться.

Подстановка уравнения (7.9) в (7.5) дает следующее выражение для источника энергии:

$$\dot{Q}(r, t) = \varepsilon(r) \sigma(r) \Phi_0 \exp \left[\int_0^t \alpha(t) dt \right] N(r, t), \quad (7.10)$$

где ε и σ рассматриваются как исходные параметры задачи. Перегруппировав члены, можно получить

$$\dot{Q}(r, t) = P(t) \bar{N}(r, t) = P_0 \exp \left[\int_0^t \alpha(t) dt \right] \bar{N}(r, t), \quad (7.11)$$

где P_0 — начальная мощность, равная $\int_0^b 4\pi\varepsilon\sigma\rho_0\varphi(r, 0) r^2 dr$, а пространственное распределение мощности определяется законом $\varepsilon\sigma N(r, t) / \int_0^b 4\pi\varepsilon\sigma N r^2 dr$.

§ 7.4. РЕШЕНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВМ

7.4.1. Ударные волны. Ударные волны не возникают во время медленного разгона, который может быть прекращен эффектом теплового расширения. При быстрых разгонах, когда происходит большой и быстрый рост давления, возможно возникновение ударных волн. Удар — это поверхность, на которой давление, плотность, внутренняя энергия и скорость терпят разрыв. Эти разрывы перемещаются по системе и отражаются от поверхностей раздела зон. Вообще говоря, однажды возникнув, ударные волны образуют очень сложные узоры разрывов и универсально составленная программа должна быть способной рассчитывать такие разрывности. Дифференциальные уравнения (7.8) записаны для непрерывного изменения величин и поэтому требуют постановки граничных условий на поверхностях разрыва. В случае плоской ударной волны необхо-

димые граничные условия даются условиями Ренкина—Гюгиони. Они являются следствием сохранения массы, импульса и энергии [9]. Эти условия имеют вид (индекс 1 относится к области перед фронтом волны, а индекс 2 — за ним)

$$\left. \begin{aligned} E_2 - E_1 &= \frac{1}{2} (\rho_1 + \rho_2) (V_1 - V_2), \\ u_2 - u_1 &= \sqrt{(\rho_2 - \rho_1) (V_1 - V_2)}, \\ \frac{d\xi}{dt} &= \frac{u_2 V_1 - u_1 V_2}{V_1 - V_2}, \end{aligned} \right\} \quad (7.12)$$

где $\xi(t)$ — лагранжева координата фронта волны. При численном решении задач разгона реактора ударные волны рассчитываются по приближенной методике, разработанной фон Нейманом и Рихтмайером [10]. В этой методике уравнения в частных производных модифицированы таким образом, что ударные волны учитываются автоматически независимо от того, возникают они на самом деле или нет. При учете вязкости и теплопроводности можно показать, что реальная ударная волна не приводит к разрывам. В очень узкой области, толщиной несколько молекулярных длин свободного пробега, свойства меняются быстро, но непрерывно. В приближенной методике в дифференциальные уравнения добавляются члены диссипации, которые можно интерпретировать как соответствующие вязкости и теплопроводности. При этом ударная волна становится узкой областью, в которой используются модифицированные уравнения. При добавлении членов диссипации требуется выполнение следующих условий: 1) уравнения в частных производных должны давать непрерывные решения; 2) условия Ренкина—Гюгиони должны выполняться во всей области волны; 3) влияние членов диссипации должно быть пренебрежимо мало вне волны и 4) фронт волны должен распространяться с правильной скоростью. Фон Нейман и Рихтмайер разработали свою методику для случая одномерных плоских ударных волн и показали, что все четыре условия, указанные выше, могут быть удовлетворены [11]. В нашем случае дифференциальные уравнения (7.8) модифицируются заменой в уравнениях движения и энергии давления p величиной \hat{p} . Переменная \hat{p} есть сумма давления, найденного из уравнения состояния, и псевдовязкостного давления q , определяемого выражением

$$q = \begin{cases} \frac{(\rho_0 l)^2}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial t} \right), & \text{если } \frac{\partial V}{\partial t} < 0, \\ 0, & \text{если } \frac{\partial V}{\partial t} \geq 0, \end{cases} \quad (7.13)$$

где l — постоянная, имеющая размерность длины. Более подробно эта методика изложена в работах [10, 12].

7.4.2. Конечно-разностные уравнения. В этом разделе обсуждается конечно-разностный аналог дифференциальных уравнений (7.8) и дается порядок решения задачи. Временная ось разбивается на множество точек t^n , $n = 0, 1, 2, \dots$, где $t^0 = 0$ и $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. Временной шаг Δt , как правило, выбирается постоянным, но может и изменяться в процессе расчета, что зависит от следующих трех факторов: 1) степени устойчивости конечно-разностной схемы (см. разд. 7.4.3); 2) быстроты изменения α ; 3) возможности минимизации расчетного времени при достижении заданной точности (в приложении дан пример такого рода программы).

Многозонный сферический реактор разбивается на l тонких сферических колец. Координаты границ колец r_i являются лагранжевыми координатами, причем r_0 находится в центре реактора а r_l — на внешней границе. Разбиение на кольца произвольно, но желательно, чтобы точки разбиения совпадали с границами зон реактора, так как в этом случае масса и состав зон реактора останутся неизменными в процессе всего расчета.

Многомерные конечно-разностные уравнения, приведенные ниже, отличаются на величину второго порядка малости от точных дифференциальных уравнений (при постоянном Δt и внутри областей с постоянными свойствами). Заметим, что в дальнейшем для краткости будем вместо $f(r_i, t^n)$ писать f_i^n . Как указано на рис. 7.1, в пространственно-временной системе координат выбирается разностная схема так, чтобы ρ , ρ , E вычислялись в точках t^n , а u , Q и P в середине промежутков. А по пространству сетка выбирается так, чтобы u и R вычислялись в точках r_i , а ρ , ρ , E и \dot{Q} в серединах промежутков. Члены

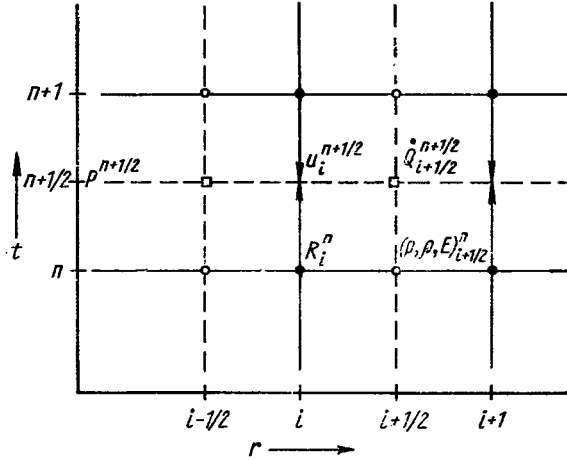


Рис. 7.1. Пространственно-временная сетка.

в каждом из следующих уравнений перегруппировывались так, чтобы уравнения были разрешены относительно вычисляемых величин:

$$u_i^{n+1/2} = u_i^{n-1/2} - (R_i^n)^2 (\hat{\rho}_{i+1/2}^n - \hat{\rho}_{i-1/2}^n) \Delta t / D_i; \quad (7.14)$$

$$R_i^{n+1} = R_i^n + \Delta t u_i^{n+1/2}; \quad (7.15)$$

$$V_{i-1/2}^{n+1} = (\rho_{i-1/2}^{n+1})^{-1} = [(R_i^{n+1})^3 - (R_{i-1}^{n+1})^3] / [\rho_{0i-1/2} (r_i^3 - r_{i-1}^3)]; \quad (7.16)$$

$$E_{i-1/2}^{n+1} = E_{i-1/2}^n + \Delta t \dot{Q}_{i-1/2}^{n+1/2} - \frac{1}{2} (\hat{\rho}_{i-1/2}^{n+1} + \hat{\rho}_{i-1/2}^n) (V_{i-1/2}^{n+1} - V_{i-1/2}^n); \quad (7.17)$$

$$\hat{\rho}_{i-1/2}^{n+1} = \rho (E_{i-1/2}^{n+1}, \rho_{i-1/2}^{n+1/2}) + q_{i-1/2}^{n+1}. \quad (7.18)$$

Некоторые члены этих уравнений требуют пояснения. Символ D_i в уравнении (7.14) обозначает конечно-разностный аналог членов в уравнении движения, которые не зависят от времени и вычисляются только один раз. Удобная форма записи D_i имеет вид

$$D_i = [\rho_{0i-1/2} (r_i^3 - r_{i-1}^3) + \rho_{0i+1/2} (r_{i+1}^3 - r_i^3)] / 6.$$

Член источника $\dot{Q}_{i-1/2}^{n+1/2}$ вычисляется с использованием любого из уравнений разд. 7.3.3, подходящего для изучаемой проблемы. Для определенности используем уравнение (7.11) и запишем его в конечно-разностной форме

$$\dot{Q}_{i-1/2}^{n+1/2} = P^{n+1/2} \bar{N}_{i-1/2}, \quad (7.19)$$

где

$$P^{n+1/2} = P^{n-1/2} \exp [\alpha \cdot \Delta t]. \quad (7.20)$$

Член вязкостного давления $q_{i-1/2}^{n+1}$ вычисляется с помощью уравнения (7.13), в котором l заменяется на $a (\rho/\rho_0) \Delta R$ (a — безразмерная постоянная).

В конечно-разностной форме q имеет вид

$$q_{i-1/2}^{n+1} = \begin{cases} a^2 (\rho_{i-1/2}^{n+1})^3 (R_i^{n+1} - R_{i-1}^{n+1})^2 (V_{i-1/2}^{n+1} - V_{i-1/2}^n)^2 / \Delta t^2 & \text{для } V_{i-1/2}^{n+1} < V_{i-1/2}^n; \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (7.21)$$

Опыт показывает, что при $a^2 = 2,0$ получаются удовлетворительные результаты.

Процедура решения этих конечно-разностных уравнений крайне проста. Предполагая, что известны все величины в момент времени t^n , вычисляем их в следующий момент времени t^{n+1} . В начальный момент $t^0 = 0$ q равно нулю, т. е. ударные волны отсутствуют. Вычисления проводятся в следующей последовательности: рассчитывается новая мощность $P^{n+1/2}$ из уравнения (7.20), и если внешняя граница считается свободной, то $\hat{p}_{i+1/2}^n$ полагаются равными $-\hat{p}_{i-1/2}^n$. Далее вычисляются: 1) $u_i^{n+1/2}$ из уравнения (7.14) (где $u_i^{n+1/2} = 0$, если наружная граница считается фиксированной); 2) R_i^{n+1} из уравнения (7.15); 3) $V_{i-1/2}^{n+1}$ из уравнения (7.16) (где $R_0^{n+1} = r_0 = 0$) и 4) $E_{i-1/2}^{n+1}$ и $\hat{p}_{i-1/2}^{n+1}$ из уравнений (7.17)—(7.21). Вообще говоря, для этого необходимо использовать итерационный процесс. Например, можно положить $\hat{p}_{i-1/2}^{n+1}$ равными $\hat{p}_{i-1/2}^n + q_{i-1/2}^{n+1}$ и найти $E_{i-1/2}^{n+1}$ и $\hat{p}_{i-1/2}^{n+1}$. Это следует повторять до тех пор, пока не будет достигнута сходимость последовательности $\hat{p}_{i-1/2}^{n+1}$ с достаточной степенью точности. Если необходимо, то в п. 4 включают расчет члена эффективной проводимости (см. разд. 7.3.1).

Так как мы используем координаты, жестко связанные с материалом, а точки пространственного разбиения в конечно-разностной схеме совпадают с границами зон, то в каждый момент времени нам известно положение границ между зонами.

При обсуждении уравнений (7.19) и (7.20) не упоминалось о том, что α и пространственное распределение потока N зависят от перераспределения материалов внутри реактора. Это учитывается путем прерывания вычислительного процесса через определенные промежутки времени и пересчета α и N , соответствующих состоянию реактора в данный момент времени, с помощью программ решения уравнения переноса. Таким образом получается кривая зависимости α от времени, которую можно экстраполировать до следующего решения уравнения переноса. Интервал времени между нейтронными расчетами определяется скоростью изменения α и N . В общем случае нет смысла делать этот интервал таким же малым, как Δt , так как нейтронные расчеты требуют больших затрат машинного времени. В Приложении приведена примерная схема программы таких расчетов, в которой нейтронное поле рассчитывается в S_n - или диффузионном приближении [13].

7.4.3. Устойчивость. Из-за нелинейности уравнений строгое обсуждение вопроса устойчивости конечно-разностной схемы разд. 7.4.2 не проведено. А обычный путь анализа устойчивости [12] состоит, как известно, в изучении линеаризованных уравнений для малых возмущений. В этих уравнениях предполагается, что любой коэффициент перед возмущением является постоянным, что малые возмущения носят экспоненциальный характер, и отсюда находят условие, при котором не будет иметь места рост возмущения. Это условие устойчивости является обычным критерием Куранта, в соответствии с которым должно выполняться неравенство

$$C_{i+1/2} \Delta t / (R_{i+1} - R_i) \leq v, \quad (7.22)$$

где $C_{i+1/2}$ — локальная скорость звука и $v = 1$ в области, где отсутствуют ударные волны. В области ударной волны в зависимости от ее величины это условие должно быть усилено. Обычно предполагают наиболее неприятный случай неограниченно сильной ударной волны, для которой $v = 1/3$. Для

уравнения состояния, записанного в виде гамма-закона скорость звука вычисляется по формуле

$$C^2 = \gamma p / \rho. \quad (7.23)$$

В случае сложного уравнения состояния можно использовать приближенную формулу для C и выбрать ν с некоторым запасом.

Практически этот критерий проверяется вычислительной машиной во всех или в отдельных точках t^n и r_i . При нарушении критерия вычисление продолжается с меньшим шагом по времени Δt или с уменьшенным количеством зон. Практический путь выбора ν — аппроксимировать C в соответствии с уравнением (7.23) с некоторой подходящей величиной γ и провести серии расчетов тестовых задач с различными величинами ν от $1/3$ до 1, а в дальнейшем использовать наибольшее значение ν , при котором еще нет нарушения устойчивости (обычно $\nu \approx 2/3$). Часто Δt выбирают с самого начала неизменным. Тогда необходимо предвидеть возможность его уменьшения в процессе расчета, что можно выполнить, требуя выполнения условия $(u_i - u_{i+1}) \Delta t / (R_{i+1} - R_i) < \nu^*$, где ν^* лежит между $1/2$ и $1/6$.

§ 7.5. СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Вычислительные схемы, описанные в этой главе, имели ограниченную проверку, не связанную с неопубликованными расчетами ядерных бомб. Результаты расчетов сравнивались с результатами экспериментов на реакторе «Годива» [14] и установке Kiwi—TNT [15]. Реактор «Годива» имел сферическую форму без отражателя с металлическим топливом высокого обогащения (93,5% U^{235}). Контролируемые мгновенные выбросы мощности инициировались введением в течение 50 мсек «взрывающегося» металлического стержня с весом, несколько превышающим 1 долл реактивности. В течение нескольких миллисекунд уровень мощности достигал порядка тысячи мегаватт, а

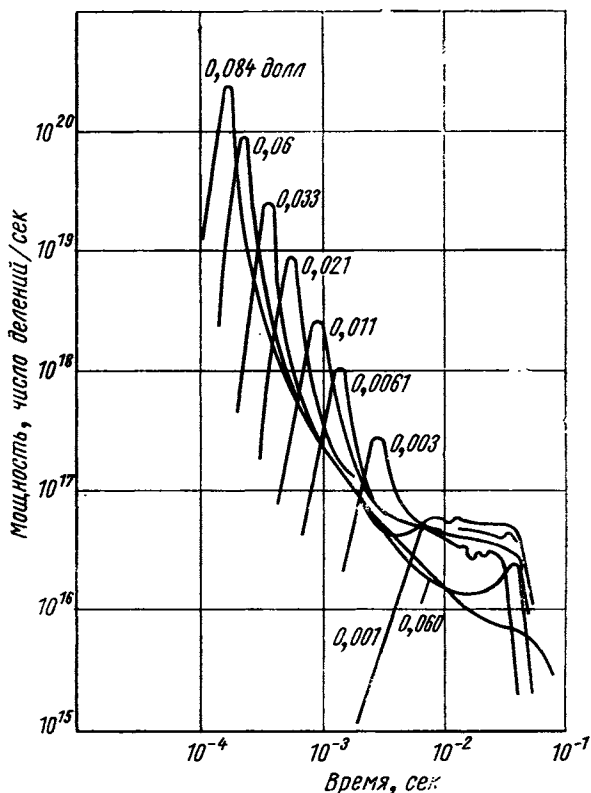


Рис. 7.2. Экспериментальная величина скорости делений для нескольких контролируемых разгонов в области надкритичности на мгновенных нейтронах в реакторе «Годива». (Период реактора можно вычислить по формуле $\tau = l/\$ \beta$, где $l = 6,6 \cdot 10^{-9}$ сек — время жизни нейтронов; β — избыток реактивности над критичностью на мгновенных нейтронах.)

затем тепловое расширение вследствие поглощения примерно 1 Мвт·сек энергии уменьшало реактивность ниже уровня мгновенной критичности. Графики кривых мощности как функции времени приведены на рис. 7.2, а график выделяющейся энергии в зависимости от избытка реактивности над мгновенной критичностью приведен на рис. 7.3.

В расчетной модели предполагалось, что реактор представляет собой гомогенную сферу весом около 52 кг. Уравнение состояния использовалось в виде

$$p = a + bT + cp, \quad (7.24)$$

где a , b и c — постоянные величины.

При сильных разгонах учитывалась возможность разрыва материалов. Уравнение переноса нейтронов решалось в одгрупповом приближении. Как видно из рис. 7.3, было получено удовлетворительное согласие с результатами эксперимента. Результаты, однако, были довольно чувствительными к виду уравнения состояния.

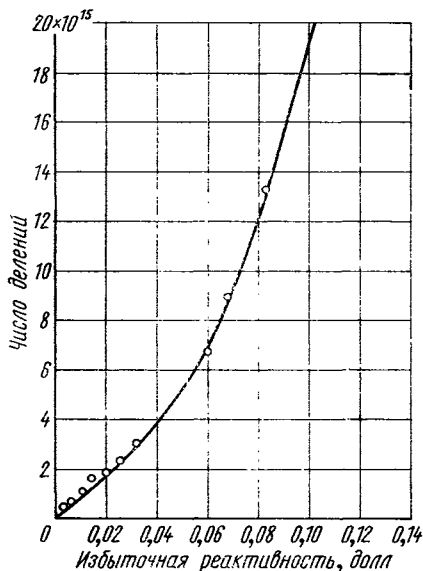


Рис. 7.3. Выделение энергии в зависимости от избытка реактивности (— расчет, ○—эксперимент).

Другой интересный результат, который можно получить из таких расчетов с разумной точностью, — оценка кинетической энергии разлетающихся кусков активной зоны и отражателя. Кинетическая энергия является мерой возможности разгона для создания угрозы окружающему. В диапазоне мощностей, приведенных на рис. 7.3, рассчитанная конечная кинетическая энергия была равна нулю в каждом случае. Это подтверждает, что разгон действительно был контролируемый. Для более сильных разгонов указанная кинетическая энергия больше нуля и очень быстро растет с ростом избытка реактивности. Обсчет эксперимента по разгону с разрушением реактора «Годива» показал удовлетворительное согласие расчетного и опытного значений кинетической энергии.

12 января 1965 г. реактор Kiwi—B4E был доведен до разрушения введением при скорости 300 долл/сек реактивности в 8,3 долл над критичностью на запаздывающих нейтронах. Расчетные значения периода разгона и полного количества делений находились в удовлетворительном согласии с данными эксперимента [8]. Наблюдаемый выход кинетической энергии не совпадал с расчетным. Общий характер поведения реактора расчет воспроизводит удовлетворительно, а тонкости, конечно, сказываются при переходе от реального реактора к его эквивалентной симметричной модели.

ПРИЛОЖЕНИЕ

СХЕМА ПРОГРАММЫ

Здесь кратко описывается программа AX-1 [16] комплексного нейтронно-динамического расчета, которая была разработана в Аргоннской национальной лаборатории совместно с Лос-Аламосской научной лабораторией [14]. Программа позволяет рассчитывать сферическую модель реактора, который имеет до 8 гомогенных зон разного состава, 50 узлов пространственной сетки, свободную наружную границу и использует уравнение состояния в виде (7.24). Уравнение переноса нейтронов решается по программе [17] S_n -методом. Между нейтронными расчетами α предполагается постоянной для одного или более шагов по времени Δt , а число этих шагов определяется автоматически самой программой. Проверка точности обеспечивается проверкой двух независимых балансов полной энергии и двух независимых локальных энергетических балансов. Общая схема программы AX-1 приведена на рис. 7.4. Для упрощения опущены некоторые детали.

Блок 1. Блок включает исходные данные и различные параметры, которые или указывают тип задачи или задают требуемую точность.

Блок 2. При необходимости из сечений отдельных элементов рассчитываются сечения смеси.

Блок 3. Блок решения уравнения переноса нейтронов S_n -методом.

Блок 4. Рассчитывается число шагов по времени при решении уравнений динамики, первоначально шаги одинаковые. Если α начинает изменяться слишком быстро, то Δt уменьшают.

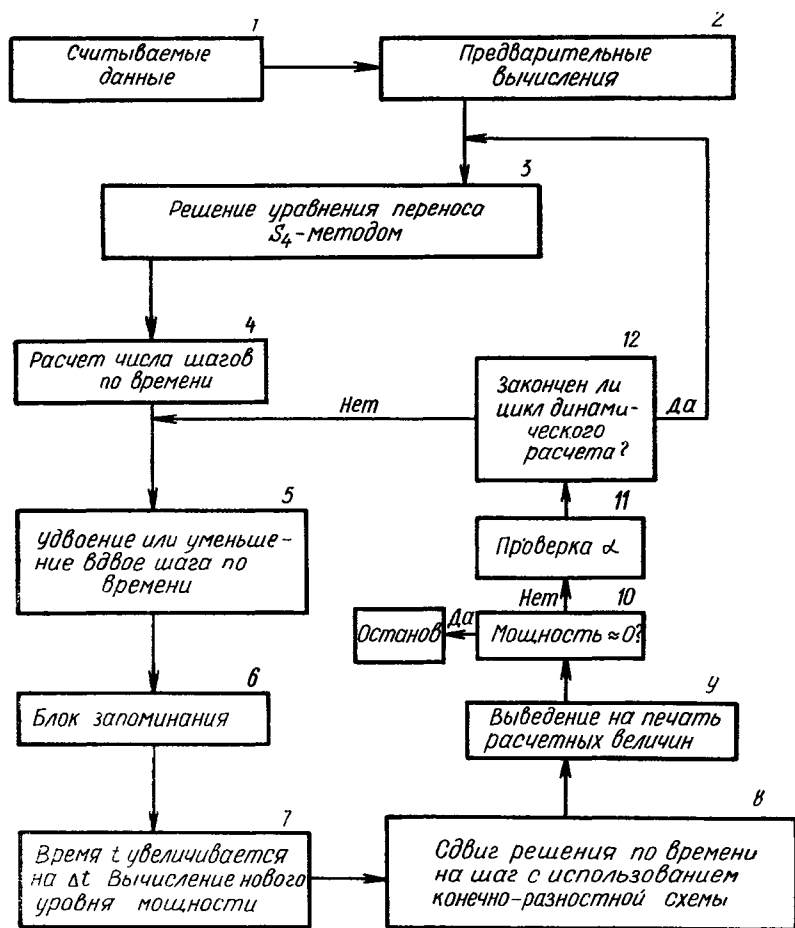


Рис. 7.4. Схема программы АХ-1.

Блок 5. Выполняется ряд тестов, чтобы установить нужный шаг по времени Δt . Заданный шаг делится пополам, если W [т. е. максимальная величина левой части уравнения (7.22)] больше ν или если $\alpha \Delta t$ (т. е. величина, связанная с изменением мощности за шаг Δt), превышает некоторую постоянную. Если W и $\alpha \Delta t$ достаточно малы, то Δt удваивается.

Блок 6. Блок запоминания, работающий периодически, позволяет при необходимости прерывать решение задачи и продолжать его впоследствии с прерванного места.

Блок 7. Временная переменная увеличивается на Δt и с помощью уравнения (7.20) вычисляется новое значение мощности.

Блок 8. Решение сдвигается на шаг по времени, используется конечно-разностная схема разд. 7.4.2.

Блок 9. Выведение на печать расчетных величин.

Блок 10. Решение задачи прекращается, когда мощность реактора становится пренебрежимо малой.

Блок 11. В типичной задаче, имеющей ступенчатый закон введения реактивности в начальный момент времени и низкую мощность, число шагов по времени определяется временем, через которое давление достигнет величины, приводящей к разрушению реактора. Изменение α учитывается в рамках теории Бете—Тайта [16].

Блок 12. После выполнения цикла динамического расчета происходит расчет α и нейтронного потока.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

- α — обратный период реактора
- $E(\mathbf{r}, t), E_{i+1/2}^n$ — внутренняя энергия
- $e(\mathbf{r})$ — средняя энергия, передаваемая при соударении
- $\bar{N}(\mathbf{r}, t), \bar{N}_{i+1/2}^n$ — нормированное распределение мощности по пространству
- $P(t), P^{n+1/2}$ — полная мощность реактора
- $p(\mathbf{r}, t), p_{i+1/2}^n$ — внутреннее давление, определяемое из уравнения состояния
- $\hat{p}_{i+1/2}^n$ — сумма внутреннего и псевдовязкостного давлений
- $\varphi(\mathbf{r}, t)$ — полный нейтронный поток
- $q_{i+1/2}^n$ — псевдовязкостное давление
- $\dot{Q}(\mathbf{r}, t), \dot{Q}_{i+1/2}^{n+1/2}$ — локальная скорость выделения энергии
- $R(\mathbf{r}, t), R_i$ — распределение материала
- \mathbf{r}, r_i — лагранжева координата материала
- $\rho(\mathbf{r}, t), \rho_{i+1/2}^n$ — плотность материала
- $\rho_{0i+1/2}$ — начальная плотность материала
- $\sigma(\mathbf{r})$ — среднее сечение соударения
- t^n — дискретные моменты времени
- $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ — шаг по времени
- $u(\mathbf{r}, t), u_{i+1/2}^{n+1/2}$ — скорость перемещения материала
- $V(\mathbf{r}, t), V_{i+1/2}^n$ — удельный объем материала

ЛИТЕРАТУРА

1. Gyftopoulos E. P. General Reactor Dynamics. In «The Technology of Nuclear Reactor Safety». Vol. 1, p. 175. Cambridge, The M.I.T. Press, 1964.
2. Nyer W. E. Mathematical Models of Fast Transients. In «The Technology of Nuclear Reactor Safety». Vol. 1, p. 417. Cambridge, The M.I.T. Press, 1964.
3. Canosa J. Nucl. Sci. Engng, 19, No. 3, 329 (July 1964).
4. Bethe H. A., Tait J. H. An Estimate of the Order of Magnitude of the Explosion when the Core of a Fast Reactor Collapses. UKAEA—RHM (56)/113 (1956).
5. McCarthy W. J., Jr., Okrent D. Fast Reactor Kinetics. In «The Technology of Nuclear Safety». Vol. 1, p. 530. Cambridge, The M.I.T. Press, 1964.
6. Lehman J. P. HATCHET—A Coupled Neutrons-Hydrodynamics Code to Calculate Burst Characteristics of a Pulsed Reactor for IBM 704. AN—237 (September 1960).
7. Kolar O. C., Pruvost N. CONEC—A Coupled Neutronic-Elasticity Theory Code and its Application to Pulsed, Fast Reactors. UCRL—6798 (November 1962).
8. Chezem C. G., Stratton W. R. RAC—A Computer Program for Reactor Accident Calculations. LAMS—2920 (August 1963).
9. Courant R., Friedrichs K. O. Supersonic Flow and Waves. New York, Interscience Publishers, Inc., 1948.
10. Von Neumann J., Richtmyer R. D. A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks. J. Appl. Phys., 21, 232 (March 1950).
11. Brode H. L. Numerical Solutions of Spherical Blast Waves. J. Appl. Phys., 26, No. 6, 766 (June 1955).
12. Richtmyer R. D. Difference Methods for Initial-Value Problems. New York Interscience Publishers, Inc., 1957.
13. Luci B. C., Riley D. R., Friedman N. F. Fast Reactor Meltdown Excursions—Analysis and Computer Program, FARM I—4350 (December 1963).
14. Stratton W. R., Colvin T. H., Lazarus R. B. Analysis of Prompt Excursions in Simple Systems and Idealized Fast Reactors. Доклад на Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1958.
15. Reider R. Kiwi—TNT «Explosion». LA—3351 (August 1965).
16. Okrent D. et al. AX-1, A Computing Program for Coupled Neutrons-Hydrodynamics Calculations on the IBM—704. ANL—5977 (May 1959).
17. Carlson B. G. The S_n -Method and the SNG Code. LAMS—2201 (April 1959).

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Дж. Кук

(Аргоннская национальная лаборатория)

§ 8.1. ВВЕДЕНИЕ

Цель настоящей главы — установить связь между современным математическим формализмом и интуитивными представлениями о связи физических и математических идей, с которыми сталкиваются специалисты, посвятившие себя изучению физики реакторов. В данной главе будет изложена чисто математическая модель, в рамках которой можно интерпретировать большинство нейтронных задач реакторной физики.

В том случае, когда статистические флуктуации потока нейтронов не имеют существенного значения, модель может быть основана исключительно на уравнении (1.1). Но следует помнить, что нейтронный газ намного сильнее разрежен, чем те газы, с которыми приходится иметь дело в классической газодинамике. Например, в экспоненциальных опытах поток нейтронов может быть равен примерно 10^6 нейтрон/(см² · сек). При таком потоке стандартное отклонение числа тепловых нейтронов в 1 см³ составляет около 40% [1]. Подобные флуктуации даже в энергетических реакторах обеспечивают уровень шума, достаточный для анализа передаточной функции [2, 3]. Иными словами, в основе нейтронной транспортной теории почти всегда лежит рассмотрение вероятного поведения отдельных нейтронов. Математическое описание проводится на языке, соответствующем терминологии экспериментов по рассеянию, из которых определяются сечения процессов взаимодействия нейтронов с ядрами веществ. Следовательно, в математической модели должен фигурировать объект, который можно было бы назвать нейтроном.

Нам не понадобится формализм квантовой механики. Нейтроны можно представить как классические точечные частицы, которые рождаются, уничтожаются и скачками переходят из одного состояния (отвечающего некоторой скорости) в другое (характеризуемое новой величиной скорости) с вероятностями, определяемыми заранее заданными функциями сечений.

Такая картина может быть интерпретирована как конкретный стохастический процесс, именно, как мультипликативный (или ветвящийся) процесс развития популяций [4—7]. Эта математическая аналогия служит для описания всех необходимых свойств физического потока нейтронов. Подобные модели уже давно используются в генетике, в теории распространения излучения и в теории различных каскадных явлений. В теории ядерных цепных реакций они начали применяться на самых ранних этапах развития данной области физики [8—11]. Уже тогда была создана широко распространенная вычислительная схема, основанная на выборочной модели, известная под названием метода Монте-Карло [12] (см. гл. 5). В результате перехода к некоторым средним величинам (математическим ожиданиям) удалось получить линейаризованное уравнение Больцмана. Затем были развиты метод сферических гармоник (см. гл. 4), диффузионная теория (см. гл. 1 и 2) и построены уравнения кинетики (см. гл. 6) на основе операторного подхода (лишенного элементов вероятностного описания).

Для анализа стохастических процессов ниже будет сконструировано выборочное пространство \mathcal{E} . Соответствующий подход будет сформулирован на

языке современной теории вероятностей [13—15]. В пространстве \mathcal{E} будет введена некоторая мера и задана функция распределения вероятности P , так что каждой наблюдаемой будет отвечать в пространстве \mathcal{E} некая функция f с математическим ожиданием $\int P f dP$.

Использование теоретико-множественных моделей для описания стохастических процессов широко распространено среди математиков. Однако некоторым читателям подобный прием может показаться не совсем обычным. Им мы рекомендуем обратиться к более конкретной работе Пала и др. [16].

§ 8.2. СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС

В нашем случае состояние нейтрона полностью задается его координатой $(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{x}$ и скоростью $(v_1, v_2, v_3) = \mathbf{v}$, т. е. точкой $(x_1, x_2, x_3, v_1, v_2, v_3) = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ в шестимерном фазовом пространстве E_6 . В этом пространстве нейтрон совершает зигзагообразный путь, состоящий из прямолинейных отрезков. Вершины углов такой ломаной линии соответствуют рассеянию нейтронов на ядрах, размножению (когда в результате столкновения происходит деление) с последующей эмиссией нескольких нейтронов и уничтожению (если нейтрон захватывается ядром).

Предположим, что нейтрон испытал последнее столкновение в момент времени t_0 в точке \mathbf{x}_0 . Тогда в любой момент времени t между этим столкновением и последующим скорость нейтрона постоянна и равна \mathbf{v}_0 . Поэтому соответствующее состояние нейтрона задается точкой фазового пространства $(\mathbf{x}_0 + (t - t_0)\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_0)$.

Функция Σ_{tot} , являющаяся полным макроскопическим сечением данного материала, определяет (в первом порядке по Δt) вероятность того, что столкновение произойдет в любой момент t' в интервале $t < t' < t + \Delta t$ в соответствии с соотношением

$$\int_t^{t+\Delta t} |\mathbf{v}(t)| \Sigma_{tot}(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t), t) dt.$$

Вероятность того, что нейтрон не испытывает столкновения в течение интервала времени $t_1 < t' < t_2$, равна

$$\exp \left[- \int_{t_1}^{t_2} |\mathbf{v}(t')| \Sigma_{tot}(\mathbf{x}(t'), \mathbf{v}(t'), t') dt' \right].$$

Если в результате столкновения в точке (\mathbf{x}, \mathbf{v}) может произойти только рассеяние, в пространстве E_6 должен иметь место дискретный марковский процесс [17]. В этом случае при математическом описании не возникнет дополнительных трудностей, характерных для теории реакторов. Но нейтроны могут рождаться в результате спонтанного деления или прибывать от внешнего источника со скоростью, задаваемой функцией плотности распределения $Q(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Тогда после столкновения они могут не только испытать рассеяние. Не исключена также вероятность их захвата. Возможно, что эти нейтроны вызовут деление с испусканием нескольких нейтронов. Вероятность всех указанных процессов определяется соответственно сечениями Σ_s , Σ_c и Σ_f . Функция Σ_c зависит от координаты \mathbf{x} , времени t и скорости налетающего нейтрона \mathbf{v} . Сечение Σ_s зависит, кроме того, от скорости нейтрона \mathbf{v}' после рассеяния. Отношение $\int_{V'} \Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' / \int_{E_s} \Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}'$ есть вероятность того, что нейтрон будет рассеян в интервале скоростей V' при условии, что он испытывает рассеяние в точке (\mathbf{x}, \mathbf{v}) .

Величина $\nu(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \int_{V'} \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' / \int_{E_s} \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}'$ представляет собой математическое ожидание числа нейтронов со скоростью, заключенной в интервале V' , рожденных в результате деления нейтронами в точке (\mathbf{x}, \mathbf{v}) . Сечение Σ_f может быть разложено на компоненты $\Sigma_{f,m}$ каждая из которых

соответствует испусканию ровно m нейтронов. Оно нормировано таким образом, чтобы величина ν (которая обычно предполагается постоянной) равнялась среднему полному числу нейтронов, испускаемых в акте деления. (Это условие нетрудно модифицировать с учетом запаздывающих нейтронов.)

Указанные три класса взаимно исключающих друг друга событий исчерпывают все множество возможных исходов соударения, т. е.

$$\sum_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \int_{E_s} \sum_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' + \int_{E_f} \sum_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' = \sum_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t).$$

Все физические идеи, необходимые для формулировки математической модели, будут заложены в этих функциях. Они полностью определяют вероятностное поведение каждого нейтрона и, следовательно, всех нейтронов вместе, так как можно предположить, что нейтроны непосредственно не взаимодействуют друг с другом.

Состояние системы из m нейтронов есть точка $(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m)$ в $6m$ -мерном пространстве, представляющем собой прямое m -кратное произведение пространства E_6 на себя. (Пространство E_6 состоит просто из одной точки, в которой нет ни одного нейтрона.) Но число нейтронов может быть столь велико, что точное определение числа m оказывается неосуществимым. Кроме того, m подвержено флуктуациям, поскольку вещество, с которым взаимодействуют нейтроны, непрерывно поглощает и испускает нейтроны. Однако подобная трудность была преодолена еще Гиббсом при описании смеси молекул, число которых оставалось неопределенным в процессе химических реакций [18]. Аналогичное неудобство возникает в любой многочастичной задаче (в которой фигурирует электронный, фотонный или фононный газ). Его можно обойти с помощью того же формального приема [19, 20], который использован нами и который мы заимствовали из теории популяций [21]. Именно, поскольку m является случайной величиной, конкретизирующей состояние, пространство состояний должно выражаться как объединение пространств E_{6m} по всем номерам m от 0 до ∞ , т. е. как $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. Наша задача — сконструировать пространство \mathcal{E} и показать, каким образом мера вероятности P , заданная на \mathcal{E} , проектируется на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$.

Гиббс, который впервые проанализировал детерминированный процесс, смог отождествить точки пространства \mathcal{E} с точками пространства $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. Если заданы уравнения движения и если известно, что состояние системы в момент времени $t = 0$ определяется точкой X_0 в пространстве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$, тогда можно охарактеризовать состояние системы в любой момент времени. Но в нашем случае, если задано состояние X_0 , то при $t > 0$ можно найти только распределение вероятности для X_t .

Тем не менее задачу можно формально свести к проблеме Гиббса, если в качестве точек в пространстве \mathcal{E} взять траектории. Такая аналогия теперь общепринята при рассмотрении стохастических процессов [22]. Итак, в качестве пространства \mathcal{E} следует взять множество всех функций $X_{(\cdot)}$ действительной переменной t , принимающих значения X_t в пространстве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. Конкретный реактор может соответствовать конкретной траектории $X_{(\cdot)}^{(1)}$, другой, макроскопически не отличимый от первого в момент времени $t = 0$, — иной траектории $X_{(\cdot)}^{(2)}$. Можно делать лишь вероятностные предположения о том, какую из траекторий $X_{(\cdot)}$ выберет реактор из множества \mathcal{E} . Вероятность такого выбора задается функцией P , определенной на множествах пространства \mathcal{E} и принимающей значения между нулем и единицей. $P(\mathcal{E}) = 1$ есть вероятность того, что пространству \mathcal{E} принадлежит с достоверностью какая-нибудь траектория.

P (пустое множество) = 0, ибо пустое множество по своему определению не может содержать ни одной траектории. Вообще $0 \leq P(\mathcal{T}) \leq 1$ — это подмножество траекторий, характеризуемых конкретными свойствами*.

Наблюдаемые характеристики системы соответствуют функциям \tilde{f} , определенным на \mathcal{E} . Например, среди функций, определенных на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$, может быть вещественнозначная функция f , такая, что $\tilde{f}(X_{(\cdot)}) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(X_{t'}) dt'$ для некоторых фиксированных t и T . Время усреднения может оказаться очень малым в привычных нам земных масштабах, но в нейтронной шкале времени оно, как правило, велико.

Как же вычислить $\tilde{f}(X_{(\cdot)})$? Гиббс проанализировал условия, при которых указанное выше среднее по времени можно заменить средним по ансамблю $\int_{\mathcal{E}} \tilde{g}(X'_{(\cdot)}) P(dX'_{(\cdot)})$, где $P(dX'_{(\cdot)})$ — дифференциал вероятности по ансамблю.

Метод Монте-Карло обеспечивает способы выбора последовательности траекторий $X_{(\cdot)}^{(i)}$ из \mathcal{E} , так что

$$\frac{\tilde{g}(X_{(\cdot)}^{(1)}) + \dots + \tilde{g}(X_{(\cdot)}^{(n)})}{n} \rightarrow \int_{\mathcal{E}} \tilde{g}(X'_{(\cdot)}) P(dX'_{(\cdot)})$$

при $n \rightarrow \infty$.

Уравнение движения для \mathcal{E} принципиально можно решить (тавтологически), осуществив сдвиг по времени на фиксированную величину t , т. е. перейдя для всех траекторий от $X_{(\cdot)}$ к $X_{(\cdot+t)}$. Поэтому все подмножества \mathcal{T} пространства \mathcal{E} также окажутся сдвинутыми. Если обратиться теперь к проблеме стационарности реактора, то следует сделать вывод, что реактор находится в стационарном состоянии тогда и только тогда, когда величина P инвариантна относительно такого временного сдвига, т. е. когда $P(\mathcal{T}) = P(\mathcal{T}_{\text{сдвиг}})$.

В этом случае стохастический процесс является строго стационарным [26], и для доказательства правомерности замены усреднения по времени усреднением по ансамблю можно применить современную эргодическую теорему (см. Приложение А). Однако мы должны получить зависящее от времени транспортное уравнение. Это сделать, вообще говоря, нельзя на основании стационарного процесса. Для надкритического реактора бесконечные средние по «бесконечному» интервалу времени могут даже и не существовать; поэтому из анализа опытов с надкритическим реактором не удастся получить результаты с нулевой дисперсией. Лучшее, на что можно надеяться, это оценить дисперсию статистических флуктуаций функции \tilde{g} относительно ее среднего значения:

$$\int_{\mathcal{E}} [\tilde{g}(X'_{(\cdot)}) - \int_{\mathcal{E}} \tilde{g}(X''_{(\cdot)}) P''_i(dX''_{(\cdot)})]^2 P(dX'_{(\cdot)}).$$

Результаты большинства измерений соответствуют функциям, определенным на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$, значения которых накапливаются аддитивно по мере регистрации каждого нового нейтрона [27]. В силу закона больших чисел [28] аккумулярованные значения функций близки к средним. Поясним эту мысль более подробно. Пусть f — вещественнозначная функция, определенная на E_{δ} . Соответствующая ей аддитивная функция m нейтронов есть $\sum_{i=1}^m f_i$, где $f_i(x_1, v_1,$

* Предполагается, что все множества, фигурирующие в данной книге, являются борелевскими, а все упоминающиеся здесь функции измеримы по Борелю [23, 24]. Обычная конструкция P [22] должна быть несколько модифицирована при переходе от пространства состояний E_1 к пространству $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$ [25].

..., $x_m, v_m) = f(x_i, v_i)$ — функция от m переменных, зависящая фактически только от i -х аргументов и поэтому действующая так, как если бы она была f .

Определим теперь $\sum_{i=1}^m f_i$ не только на E_{6m} , но на всем множестве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$, положив ее равной нулю на E_{6n} , если $n \neq m$. Тогда функция f будет отвечать функции $\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{i=1}^m f_i$ на множестве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. (В этой бесконечной сумме отличен от нуля член, соответствующий только одному m , так что она всегда сходится.) Написанный ряд будет ниже фигурировать во многих выражениях. Поэтому введем обозначение

$$\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{i=1}^m f_i = \omega(f).$$

(Такое обозначение не стандартно. В многочастичной теории [29, 30] указанный ряд известен под другими обозначениями. Во избежание путаницы мы не будем ими пользоваться.) Величина $\langle \omega(v\Sigma_j) \rangle$ пропорциональна математическому ожиданию мощностей реактора. Если нейтронный газ находится в тепловом равновесии и $f(x, v) = \bar{m}v^2/3k$, то $\omega(f)(X)$ есть температура нейтронного газа (\bar{m} — масса нейтрона; k — постоянная Больцмана).

Приведем еще один пример. Пусть $\delta_U(x, v)$ равна единице, если точка (x, v) принадлежит некоторому подмножеству U множества E_6 , и равна нулю, если (x, v) лежит вне U . Тогда $\omega(\delta_U)$ есть полное число нейтронов в U . (Для любого фиксированного X в $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$ множество $\omega(\delta_U)$, будучи функцией U , счетно.) Если $U = E_6$, величина δ_U тождественно равна единице и $\omega(1)(X)$ есть полное число нейтронов.

Мультипликативность процесса [4, 5] означает, что ветви, происшедшие от двух различных предшественников, выбраны из двух независимых распределений. Пусть область U достаточно велика (в микроскопическом масштабе), так что она почти наверняка содержит много нейтронов; тогда большинство общих предшественников этих нейтронов будет находиться где-то в начале цепочки столкновений и потому состояния таких нейтронов окажутся в высшей степени некоррелированными. Применяя модифицированный принцип Хинчина [31], который строго выполняется только в отсутствие взаимодействия частиц друг с другом, можно показать, что дисперсия величины $\omega(\delta_U)/\int_{\mathcal{E}} \omega(\delta_U)(X_t) P(dX_t)$ мала почти для всех t ($\sum_{i=1}^m \delta_{U_i}$ — сумма большого числа случайных величин, которые при $|i_1 - i_2| \gg 1$ почти независимы). Если функция f может быть достаточно хорошо аппроксимирована на E_6 ступенчатой функцией $\sum_{j=1}^k c_j \delta_{U_j}$ при не очень больших k и не слишком малых U_j , то $\omega(f)$ также может быть аппроксимирована ступенчатой функцией, ибо

$$\omega\left(\sum_{j=1}^k c_j \delta_{U_j}\right) = \sum_{j=1}^k c_j \omega(\delta_{U_j}).$$

Можно было бы еще многое сказать об условиях, при которых значения функций могут быть заменены их средними, но это не входит в наши задачи.

В наших рассуждениях фигурировала функция P , определенная на \mathcal{E} , но для вычислительных целей гораздо удобнее пользоваться мерой вероятности ρ_t , порождаемой в момент времени t функцией P на пространстве состояний $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. По определению

$$\int_{\mathcal{S}} \rho_t(X) dX = P(\{X(\cdot) : X_t \in S\}),$$

где $\{X_{(\cdot)} : X_t \in S\}$ — множество всех тех $X_{(\cdot)}$, для которых X_t лежит в S . Тогда

$$\int_{\mathcal{G}} g(X_t) P(dX_{(t)}) = \int_{\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}} g(X) \rho_t(X) dX.$$

Существует еще одно условие, которое следует наложить на стохастический процесс: сечения процессов как функции $(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ необходимо задавать заранее и считать их независимыми от прошлой истории потока нейтронов*.

Если система в момент времени t_0 находится в состоянии X_{t_0} , в более поздний момент времени t ее состояние с вероятностью $p(S, t; X_{t_0}, t_0)$ будет принадлежать подмножеству S множества $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$, причем вероятность p не будет зависеть ни от каких дополнительных условий, накладываемых на $X_{t'}$ в момент времени $t' < t_0$. Таким образом, процесс является марковским [33].

Зависящая от времени величина ρ определяется через p с помощью соотношения

$$\int_S \rho_t(X) dX = \int_{\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}} p(S, t; X, t_0) \rho_{t_0} dX.$$

Это есть линейная операция $\tau(t, t_0)$, заданная на линейном пространстве всех вполне ограниченных знакоопределенных мер на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$, причем $\rho_t = \tau(t, t_0) \rho_{t_0}$.

Сечения не определяют непосредственно $\tau(t, t_0)$ для всех $t \geq t_0$. Как и в случае большинства физических закономерностей, они служат для инфинитезимальной характеристики τ , т. е. определяют линейный оператор

$$L_{t_0} = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{\tau(t, t_0) - I}{t - t_0}.$$

Функцию же τ следует находить как решение уравнения движения (опережающего уравнения Колмогорова)

$$\frac{d}{dt} \tau(t, t_0) = L_t \tau(t, t_0)]$$

с начальным условием $\tau(t_0, t_0) = I$.

В § 8.4 будет сконструирован оператор L_t просто исходя из физического смысла сечений. Затем будет показано (см. Приложение Б), что действительно существуют \mathcal{G} и P , доставляющие искомое решение τ . После этого дело сведется к применению теории линейных операторов, заданных на частично упорядоченных линейных пространствах.

* Это условие не всегда строго выполняется [что имеет место, например, при вычислении выгорания (см. гл. 7)]. Однако удовлетворительные результаты можно получить, разбивая рассматриваемый отрезок времени на мелкие интервалы, в пределах каждого из которых предполагается заданным закон изменения сечения, причем для конкретного интервала новый закон формулируется в конце предшествующего. Подобная процедура перестает работать, когда сечения связаны с нейтронным потоком и быстро флуктуируют как, например, в кипящих реакторах). Чтобы остаться в этом случае в рамках марковского процесса, необходимо ввести еще пространство состояний, характеризующее турбулентное течение теплоносителя или относящееся к делящемуся материалу [32].

Огромную роль в кинетике реактора играют запаздывающие нейтроны (см. гл. 6). Они могут быть включены в рассмотрение путем введения сопряженного пространства для возбужденных состояний ядер.

Еще в начале нынешнего столетия было понято, что некоторые важные разделы анализа можно объединить общей теорией линейных операторов, определенных на пространствах функций [35]. Например, при рассмотрении классических задач математической физики с граничными условиями удобно абстрагироваться и проводить весь анализ в гильбертовом пространстве [36] — наиболее хорошо изученном бесконечномерном линейном пространстве. Аппарат линейных операторов в гильбертовых пространствах является также естественным инструментом при решении проблем квантовой механики.

Но подобный математический формализм неприменим непосредственно к решению задач реакторной физики. Функция потока и сопряженная функция потока принадлежат к существенно различным пространствам, которые нельзя отождествлять с дуальными [37].

Скалярное произведение функции потока и сопряженной функции потока имеет определенный физический смысл, в то время как скалярное произведение двух функций потока или двух сопряженных функций такового не имеет. Следовательно, в данном случае неприменима теория самосопряженных линейных операторов.

К счастью, существуют другие математические конструкции, естественно описывающие физическую ситуацию. Например, тот факт, что один нейтронный поток всюду больше или равен другому, позволяет сделать определенное физическое заключение: потоки частично упорядочены [38], и их частичная упорядоченность имеет конкретный физический смысл. Как это не удивительно, но именно такое простое наблюдение послужило толчком к построению целого класса линейных пространств, которые не менее удобны для реакторной теории, чем гильбертовы пространства для квантовой механики. Теория частично упорядоченных линейных пространств хорошо развита [38—41] и тесно связана с прикладной математикой [42] и численным анализом [43—46]. Теория эта является достаточно общей и включает в себя как частные случаи транспортную и диффузионную теории. Соответствующие уравнения могут быть записаны в интегральной и дифференциальной форме или в виде своих конечно-разностных аналогов. Теория марковских процессов также является составной частью теории частично упорядоченных пространств. И в то же время теория частично упорядоченных пространств достаточно специальна для того, чтобы обеспечить мощный инструмент для вычислителей.

Итак, спектральная теория операторов, одним из принципов которой является сохранение скалярного произведения, заменена новой теорией, в рамках которой сохраняются частичная упорядоченность. Первые теоремы были сформулированы Перроном и Фробениусом для случая конечномерных пространств [43, 47, 48]. Впоследствии они были обобщены в применении к бесконечномерным пространствам [49, 50]. Основное положение теории состоит в том, что оператор, определяющий эволюцию нейтронного газа, имеет единственное положительное собственное значение, которое по абсолютной величине больше всех остальных точек спектра этого оператора; соответствующее собственное пространство содержит неотрицательную собственную функцию, являющуюся доминирующей модой [51]. (Для марковских процессов — это стационарное распределение [52].)

Из всех частично упорядоченных пространств мы выберем для наших целей пространство $\mathcal{L}_1(\mathcal{S})$, т. е. пространство определенных на измеримом множестве \mathcal{S} интегрируемых и вещественнозначных функций [23, 53]. В качестве \mathcal{S} у нас будет фигурировать либо $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$ для марковских процессов, либо E_6 для транспортного уравнения, либо E_3 для моноэнергетического диффузионного уравнения, либо объединение нескольких пространств E_3 для многогрупповой системы диффузионных уравнений (возможно несколько подмножеств этих евклидовых пространств), либо некоторое конечное множество для разностной аппроксимации указанных уравнений и т. д. Часто бывает удобно расши-

речь пространство $\mathcal{L}_1(\mathcal{S})$, включив в него все вполне ограниченные знакоопределенные измеримые функции [34], так чтобы можно было оперировать с сингулярными потоками (т. е. потоками, имеющими особенности ввиду присутствия внешних источников или из-за наличия монохроматических пучков и т. п.). Такое расширенное пространство обычно фигурирует и в теории марковских процессов [54].

Введение расширенного пространства в нашем случае является некоторой идеализацией и отходом от более реалистичной модели, в которой нельзя утверждать, что определенное состояние системы действительно принадлежит множеству с нулевой лебеговой мерой.

В дальнейшем мы опустим индекс 1 и обозначим пространство $\mathcal{L}_1(\mathcal{S})$ или его расширение $\tilde{\mathcal{L}}_1(\mathcal{S})$ просто как $\mathcal{L}(\mathcal{S})$ (ибо для нас важно лишь то, чтобы рассматриваемое линейное пространство было пространством интегрируемых по Лебегу функций [55, 56]). В соответствии с общей терминологией [57] элементы ρ из $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m})$ будем называть функциями плотности и записывать их как $\rho(x_1, v_1, \dots, x_m, v_m)$ или $\rho(X)$.

Если математик имеет дело с линейным топологическим пространством, подобным $\mathcal{L}(\mathcal{S})$, он инстинктивно обращается к сопряженному пространству всех линейных непрерывных функционалов. В теорию реакторов сопряженные пространства были введены Е. Вигнером [58]. Линейный функционал на $\mathcal{L}(\mathcal{S})$ есть линейное преобразование его элементов в действительные числа. Например, важную роль в теории реакторов играет функционал

$$\left[\rho \rightarrow \int_{\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}} \rho(X) dX = \sum_{m=0}^{\infty} \int_{E_{\delta m}} \rho(x_1, v_1, \dots, x_m, v_m) dx_1 dv_1 \dots dx_m dv_m \right],$$

ибо он инвариантен относительно перемещений $\mathcal{L}(\mathcal{S})$, обусловленных детерминированными перемещениями \mathcal{S} . В дальнейшем будем обозначать его $\langle \rho \rangle$.

§ 8.4. ЭВОЛЮЦИОННОЕ УРАВНЕНИЕ КОЛМОГОРОВА

Функция ρ удовлетворяет обобщенному уравнению Лиувилля $\frac{\partial \rho}{\partial t} = L\rho$,

где L — некоторый линейный оператор, определенный на $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m})$. (Уравнение является обобщенным [59], поскольку оно может не иметь решения при детерминированном изменении независимых переменных.) Плотность нейтронов F удовлетворяет транспортному уравнению $\frac{\partial F}{\partial t} = BF$, где B — некоторый линейный оператор, определенный на $\mathcal{L}(E_0)$. Функции ρ и $F = M\rho$ связаны оператором проектирования M пространства $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m})$ на $\mathcal{L}(E_0)$ (см. § 8.5).

Оператор B , входящий в транспортное уравнение, однозначно определяется соотношением $BM = ML$, если оператор L найден.

Как отмечалось в конце § 8.2, зависящая от времени функция $\rho_t = \tau(t, t_0)\rho_{t_0}$ задается двухпараметрическим семейством линейных операторов $\tau(t, t_0)$. Поэтому L входит также в эволюционное уравнение Колмогорова [60, 61] вида

$$\frac{\partial \tau(t, t_0)}{\partial t} = L_t \tau(t, t_0).$$

Если задан оператор L_t , можно найти τ как единственное решение написанного уравнения, удовлетворяющее начальному условию $\tau(t_0, t_0) = I$ для всех t_0 . Тогда будет нетрудно с помощью метода Колмогорова сконструировать P на \mathcal{E} . Наоборот, если известна функция P , можно найти переходные функции ρ

и τ , а потом получить L_t дифференцированием соотношения $\rho_t = \tau(t, t_0) \rho_{t_0}$. Построение операторов L_t является ключом ко всему стохастическому процессу.

Если процесс мультипликативен, то можно выразить L в явной форме.

Пространство $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ — не просто линейное пространство, оно обладает естественной алгебраической структурой. Пусть функция $\rho^{(m)}$ из $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ такова, что она сконцентрирована на множестве $E_{\delta m}$. Аналогично функция $\rho^{(n)}$ ($m \neq n$) принадлежит $\mathcal{L}(E_{\delta n})$. Тогда существует элемент из $\mathcal{L}(E_{\delta(m+n)})$, который мы обозначим $\rho^{(m)} \rho^{(n)}$ [краткое обозначение для обычного тензорного произведения [62] $\rho^{(m)} \otimes \rho^{(n)}$, определяемого соотношением $(\rho^{(m)} \rho^{(n)})(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_{m+n}, \mathbf{v}_{m+n}) = \rho^{(m)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m) \rho^{(n)}(\mathbf{x}_{m+1}, \mathbf{v}_{m+1}, \dots, \mathbf{x}_{m+n}, \mathbf{v}_{m+n})$]. По линейности распространим определение на конечные суммы $\left(\sum_m \rho^{(m)} \right) \left(\sum_n \rho^{(n)} \right) = \sum_{m,n} \rho^{(m)} \rho^{(n)}$, а по непрерывности — на все пространство $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$. (По отношению к указанному произведению $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ является банаховой алгеброй [63].)

Предположим на время, что член источника Q отсутствует. Тогда нейтронный поток не возмущается внешними эффектами. В этом случае его можно представить разложимым элементом $\rho\sigma$ из $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ в момент времени t_0 . Мультипликативность процесса означает, что в любой, более поздний момент времени t поток представим разложимым элементом $\tau(t, t_0)(\rho\sigma) = (\tau(t, t_0)\rho)(\tau(t, t_0)\sigma)$. Оператор $\tau(t, t_0)$, будучи линейным преобразованием, обладает также и более сильным свойством — он является гомоморфным отображением.

Пространство $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ натянута на разложимые элементы. Поэтому, если рассматривать ансамбль не взаимодействующих друг с другом частиц, отображение τ будет полностью определяться действием оператора τ на одночастичное распределение $\rho^{(1)}$ из $\mathcal{L}(E_{\delta})$ в соответствии с применением правила

$$\tau(t, t_0)(\rho^{(1)} \rho^{(m)}) = (\tau(t, t_0)\rho^{(1)}) (\tau(t, t_0)\rho^{(m)}).$$

Дифференцируя обе части написанного соотношения и выражая производные при $t = t_0$ из уравнения Колмогорова, получаем

$$L(\rho\sigma) = (L\rho)\sigma + \rho(L\sigma).$$

[В общем случае L — неограниченный оператор и, значит, он не обязательно определен на всем пространстве $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$. Мы не будем здесь устанавливать точно область его определения, хотя сделать это для частично упорядоченного пространства легче, чем для гильбертова пространства.]

Итак, оператор L также полностью определяется его значениями $L\rho^{(1)}$ на $\mathcal{L}(E_{\delta})$ [64]. Пусть, например, операция L на $\mathcal{L}(E_{\delta})$ есть линейное преобразование, заключающееся в *поточечном* умножении на некоторую фиксированную вещественнозначную функцию. [$(f\rho^{(1)})(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \rho^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ не есть тензорное произведение, используемое в предыдущих параграфах.]

Тогда операция L на $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$ будет поточечным умножением на функцию $\omega(f)$, введенную в § 8.2.

Предположим, что L_1 есть произвольное линейное отображение $\mathcal{L}(E_{\delta})$ в $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$. Удобно обобщить определение функции ω , потребовав, чтобы

$\omega(L_1)$ давала однозначное отображение $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ на себя, которое соответствовало бы действию L_1 на $\mathcal{L}(E_6)$ и удовлетворяло бы соотношению

$$\omega(L_1)(\rho\sigma) = (\omega(L_1)\rho)\sigma + \rho\omega(L_1)\sigma.$$

Чтобы выразить L_1 в явной форме, необходимо в математический формализм заложить некоторую эмпирическую информацию о поведении одиночного нейтрона.

Предположим, что все сечения равны нулю. Тогда действие оператора τ на $\mathcal{L}(E_6)$ задается соотношением

$$(\tau_0(t, t_0)\rho)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \rho(\mathbf{x} - (t - t_0)\mathbf{v}, \mathbf{v}).$$

При этом

$$\left[\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \right]_{t=t_0} = (-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho)(\mathbf{x}, \mathbf{v}),$$

если ρ дифференцируема по \mathbf{x} и такова, что

$$\int_{E_6} |-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v})| dx dv < \infty.$$

Значит, в данном случае $L_1 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}$.

Теперь допустим, что не все сечения равны нулю. Тогда к полученному оператору следует добавить член L_{int} , учитывающий влияние этих сечений на поведение нейтронов:

$$L_1 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + L_{int}.$$

Такая возмущающая добавка есть сумма неположительной и неотрицательной компонент, т. е.

$$L_{int} = L_{(-)} + L_{(+)}.$$

Первая компонента характеризует скорость убывания ρ в результате любого столкновения в точке (\mathbf{x}, \mathbf{v}) . При $Q = 0$ имеет место соотношение

$$(L_{(-)}\rho)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = -v \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v})$$

(в смысле поточечного умножения). Вторая компонента определяет скорость возрастания ρ вследствие рассеяния в *любой* элемент X из $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. Существует три вида столкновений, в соответствии с чем $L_{(+)} = L_c + L_s + L_f$ (если $Q = 0$). В результате столкновения с захватом нейтрон должен исчезнуть, так что ρ будет возрастать со скоростью

$$(L_c \rho)_0 = \int_{E_6} v \Sigma_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}) dx dv.$$

При рассеянии ρ как функция из $\mathcal{L}(E_6)$ будет возрастать со скоростью

$$(L_s \rho)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \int_{E_3} v' \Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}') dv'.$$

В результате деления ρ как функция из $\mathcal{L}(E_{6m})$ должна возрастать со скоростью

$$(L_{f, m} \rho)(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m) = \int_{E_3} v v' \Sigma_{f, m}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m; \mathbf{v}', t) \times \\ \times \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \dots \delta(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}') dv',$$

где функция $\Sigma_{f, m}$ нормирована таким образом, что константа v равна среднему числу нейтронов, испускаемых в акте деления. (Заметим, что область опре-

деления $L_{f, m}$ при $m > 1$ состоит целиком из сингулярных измеримых распределений, сконцентрированных на подмножестве (множества E_{6m}) $\mathbf{x}_1 = \dots = \mathbf{x}_m$ лебеговой меры нуль. Тем не менее можно показать, что множество функций τ включает в себя подпространство абсолютно непрерывных мер).

Положим по определению $L_f = \sum_{m=1}^M L_{f, m}$, где M — некоторое конечное число. Тогда $L_1 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_x + L_{(-)} + L_c + L_s + L_f$, если член внешнего источника Q равен нулю.

В присутствии внешнего источника, т. е. при $Q \neq 0$, в E_{6m} испускаются нейтроны со скоростью, задаваемой некоторой неотрицательной функцией q_m из $\mathcal{L}(E_{6m})$. Если никаких других нейтронов нет, то ρ является единичной функцией из $\mathcal{L}(E_0)$, поэтому E_0 должно истощаться со скоростью

$$q_0 = - \sum_{m=1}^M \int_{E_{6m}} q_m(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{v}_1 \dots d\mathbf{x}_m d\mathbf{v}_m.$$

Определим линейное преобразование L_0 множества $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ в себя соотношением $L_0 q = 1$, где $q = q_0 + q_1 + \dots + q_M$, а $L_0 \mathcal{L}(E_{6m}) = \{0\}$ при $m > 0$.

Влияние внешнего источника на произвольную функцию ρ из $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ можно выразить с помощью линейного преобразования ω (L_0) $\rho = \rho q$, определяющего умножение справа на q . (Хотя нейтроны являются неразличимыми частицами, нет необходимости симметризовать пространство состояний [65].)

Предполагая $\omega(\cdot)$ аддитивной функцией аргументов, можно записать $\omega(L_1 + L_0) = \omega(L_1) + \omega(L_0)$. Поэтому окончательно* эволюционное уравнение Колмогорова примет вид

$$\frac{\partial \tau(t, t_0)}{\partial t} = \omega(L_1 + L_0) \tau(t, t_0)$$

при начальном условии $\tau(t_0, t_0) = 1$.

В Приложении Б будет показано, что стохастический процесс действительно существует, причем он однозначно определяется преобразованием $L_1 + L_0$. В свою очередь, он сам однозначно определяет $L_1 + L_0$ и решение τ эволюционного уравнения Колмогорова.

§ 8.5. ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ

Распределение вероятности ρ на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$ детально описывает нейтронный газ в ненаблюдаемых переменных. Огромное упрощение вытекает из того факта (см. § 8.2), что результаты большинства наблюдений соответствуют усреднению по ансамблю $\langle \omega(f) \rho \rangle$, где операция f на $\mathcal{L}(E_0)$ представляет собой поточечное умножение на вещественнозначную функцию $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$. Если математическое ожидание числа нейтронов $\langle \omega(I) \rho \rangle$ конечно, то $\langle \omega(f) \rho \rangle$ является линейным функционалом $\langle \omega(\cdot) \rho \rangle : f \rightarrow \langle \omega(f) \rho \rangle$. Этот линейный функционал определен на таких f , для которых существует [68] функция F из $\mathcal{L}(E_0)$, зависящая только от ρ и удовлетворяющая соотношению $\langle \omega(f) \rho \rangle = \langle fF \rangle$. [В правой части последнего равенства $\langle fF \rangle$ означает $\int_{E_0} (fF) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$. Согласно следствию

* Чтобы учесть двойные столкновения, следует определить [66] $\omega(L_2)$ для некоторого линейного преобразования L_2 . Тогда эволюционное уравнение примет вид основного уравнения [67] для обычного газа с низкой плотностью. Необходимость введения $\omega(A)$ для произвольного линейного преобразования A пространства $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ исключается ввиду ничтожно малого нейтрон-нейтронного взаимодействия. Это избавляет нас от серьезных математических усложнений.

из теоремы Витали—Хана—Сакса [69] функция F должна принадлежать $\mathcal{L}_1(E_6)$, если $f \in \mathcal{L}_1(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$.

Операция $F = M\rho$ есть линейное преобразование с областью определения в $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ и областью значений в $\mathcal{L}(E_6)$. Функция F — это обычная нейтронная плотность, или угловой поток [70], деленный на скорость нейтронов. Его простая связь с ρ обусловлена тем, что он определен на E_6 , а не на $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$. При этом общность нисколько не уменьшается, если использовать наблюдаемые величины вида $\omega(f)$.

С помощью M осуществляется обычным способом переход к безусловному или приведенному распределению в кинетической теории газов [71]. Математическое ожидание числа нейтронов в области U пространства E_6 равно $\langle \omega(\delta_U)\rho \rangle = \langle \delta_U F \rangle = \int_U F dx dv$. Например, если присутствуют только два нейтрона, функция ρ сконцентрирована на E_{62} и выполняется соотношение

$$\int_U F dx dv = \int_{U \cdot E_6} \rho dx_1 dv_1 dx_2 dv_2 + \int_{E_6 \cdot U} \rho dx_1 dv_1 dx_2 dv_2.$$

Если $\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m)$ — симметричная на каждом множестве E_{6m} функция m координат $(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i)$, то

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_{m=0}^{\infty} m \int_{E_{6(m-1)}} \rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m) dx_2 dv_2 \dots dx_m dv_m.$$

Конструкция M включает бесконечную сумму по m в $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$. Потребуем, чтобы сходимость такого ряда была абсолютной. Например, пусть ρ можно разложить на неотрицательную и неположительную компоненты, т. е. $\rho = \rho^{(+)} - \rho^{(-)}$ [72]. Возьмем в качестве области определения M все функции ρ , для которых в $\mathcal{L}(E_6)$ существуют $M\rho^{(+)}$ и $M\rho^{(-)}$. При этом процесс сходимости оказывается монотонным и однозначным. Тогда M определим как $M\rho \equiv M\rho^{(+)} - M\rho^{(-)}$.

Необходимо, чтобы операция M обладала двумя свойствами:

1) $M^2 = M$ (идемпотентность), что очевидно;

2) $M(\rho\sigma) = M\rho \langle \sigma \rangle + \langle \rho \rangle M\sigma$. Это равенство следует из соотношения

$$\langle fM(\rho\sigma) \rangle = \langle (\omega(f)\rho)\sigma \rangle + \langle \rho\omega(f)\sigma \rangle,$$

вытекающего из свойства дифференцирования; поскольку $\langle \cdot \rangle$ есть гомоморфизм алгебры $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$, последнее соотношение можно приравнять выражению $\langle \omega(f)\rho \rangle \langle \sigma \rangle + \langle \rho \rangle \langle \omega(f)\sigma \rangle$, что в силу определяющего свойства M равно $\langle fM\rho \rangle \langle \sigma \rangle + \langle \rho \rangle \langle fM\sigma \rangle = \langle f(M\rho \langle \sigma \rangle + \langle \rho \rangle M\sigma) \rangle$.

Наоборот, указанные два свойства полностью характеризуют линейное преобразование M , если известна область его изменения. Они могут быть использованы для определения M .

Согласно второму свойству, M является левой производной типа $(\langle \cdot \rangle, \langle \cdot \rangle)$ [71].

F есть образ ρ , так что временная зависимость ρ_t отражается во временной зависимости $F_t = M\rho_t$. Транспортное уравнение

$$\frac{\partial F_t}{\partial t} + BF_t,$$

в которое явно не входит ρ_t , справедливо только потому, что функция F_t сама содержит всю информацию, определяющую ее поведение в будущем. Следует

показать, что производная $\partial F_t / \partial t$ может быть образована из F_t с помощью некоторого оператора B без обращения к функции ρ_t , от которой произошла F_t . Операция $\tau(t, t_0)$ совместима [73] с M . Равенство $M\rho = 0$ означает, что $M\tau(t, t_0)\rho = 0$, т. е. действие $\tau(t, t_0)$ на $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ с помощью оператора M связывается с действием оператора $U(t, t_0)$ на $\mathcal{L}(E_6)$ таким образом, что $U(t, t_0)F_{t_0} = M\tau(t, t_0)\rho_{t_0}$, или $U(t, t_0)M = M\tau(t, t_0)$.

Предположим, что $\tau(t, t_0)\mathcal{L}(E_6)$ есть область определения M (это обусловлено тем, что $\nu\nu\Sigma_f \leq \text{const}$). Определим $U(t, t_0) = M\tau(t, t_0)$. Чтобы доказать утверждения предыдущего параграфа, необходимо установить, что $M\tau(t, t_0) = M\tau(t, t_0)M$.

Если $L_0 = 0$, последнее равенство вытекает из мультипликативности и монотонности $\tau(t, t_0)$ и инвариантности $\langle \cdot \rangle$ относительно операции сопряжения. Очевидно, $M\tau(t, t_0)\rho = M\tau(t, t_0)M\rho$, когда $\rho \in \mathcal{L}(E_0)$ [$\tau(t, t_0) = I$ на $\mathcal{L}(E_0)$ и $M = 0$] или когда $\rho \in \mathcal{L}(E_6)$ [$M = I$ на $\mathcal{L}(E_6)$]. Далее продолжим процесс по индукции. Предположим, что указанное равенство выполняется на $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{n-1} E_{6m})$.

Пусть $\rho^{(n)} \in \mathcal{L}(E_{6n})$. Можно даже предположить, что $\rho^{(n)}$ представима в виде произведения $\rho^{(n)} = \rho^{(r)}\rho^{(s)}$, $r < n$, $s < n$, поскольку каждый неотрицательный элемент из $\mathcal{L}(E_{6n})$ есть монотонный предел последовательности линейных комбинаций разложимых элементов. Следующая цепочка равенств подтверждает справедливость уравнения для $\rho^{(n)}$:

$$\begin{aligned} M\tau(t, t_0)(\rho^{(r)}\rho^{(s)}) &= M\left(\tau(t, t_0)\rho^{(r)} \cdot \tau(t, t_0)\rho^{(s)}\right) = \\ &= M\tau(t, t_0)\rho^{(r)}\langle \tau(t, t_0)\rho^{(s)} \rangle + \langle \tau(t, t_0)\rho^{(r)} \rangle M\tau(t, t_0)\rho^{(s)} = \\ &= M\tau(t, t_0)\rho^{(r)}\langle \rho^{(s)} \rangle + \langle \rho^{(r)} \rangle M\tau(t, t_0)\rho^{(s)} = \\ &= M\tau(t, t_0)M\rho^{(r)}\langle \rho^{(s)} \rangle + \langle \rho^{(r)} \rangle M\tau(t, t_0)M\rho^{(s)} = \\ &= M\tau(t, t_0)(M\rho^{(r)}\langle \rho^{(s)} \rangle + \langle \rho^{(r)} \rangle M\rho^{(s)}) = M\tau(t, t_0)M(\rho^{(r)}\rho^{(s)}). \end{aligned}$$

Итак, для любой функции ρ на $\bigcup_{n=0}^{\infty} \mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^n E_{6m})$ верно указанное выше уравнение. Путем предельного перехода по монотонной последовательности это уравнение можно распространить на всю область определения M .

При $L_0 \neq 0$ ситуация усложняется незначительно. Пусть τ_1 есть решение уравнения

$$\frac{\partial \tau_1(t, t_0)}{\partial t} = \omega(L_1)\tau_1(t, t_0).$$

Тогда

$$\tau(t, t_0)\rho = \left(\tau_1(t, t_0)\rho\right) \prod_{t'=t_0}^{t'=t} (1 + \tau_1(t, t')q_{t'} dt'),$$

если временная зависимость ограниченного оператора L_0 , t такова, что интеграл произведения $\prod_{t'=t_0}^{t'=t}$ существует [74]—[76]. Теперь можно непосредственно убедиться в справедливости формального рассуждения:

$$\begin{aligned} M\tau(t, t_0)\rho &= (M\tau_1(t, t_0)\rho) \left\langle \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t')q_{t'} dt') \right\rangle + \\ &+ \langle \tau_1(t, t_0)\rho \rangle M \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t')q_{t'} dt') = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= M\tau_1(t, t_0) M\rho \left\langle \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t') q_{t'} dt') \right\rangle + \\
&+ M \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t') q_{t'} dt') \text{ (так как } \langle \tau_1(t, t_0)\rho \rangle = 1) = \\
&= M\tau_1(t, t_0) M\rho + M \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t') q_{t'} dt') \left[\text{так как } \left\langle \prod_{t_0}^t (1 + \tau_1(t, t') q_{t'} dt') \right\rangle = \right. \\
&= \left. \prod_{t_0}^t (1 + \langle \tau_1(t, t') q_{t'} \rangle dt') = \prod_{t_0}^t (1 + \langle q_{t'} \rangle dt') = \prod_{t_0}^t (1 + 0 \cdot dt') = 1 \right] = \\
&= M\tau_1(t, t_0) M\rho + \int_{t_0}^t M\tau_1(t, t') q_{t'} dt' = M\tau_1(t, t_0) M\rho + \\
&+ \int_{t_0}^t M\tau_1(t, t') Mq_{t'} dt' = U_1(t, t_0) M\rho + \int_{t_0}^t U_1(t, t') Q(t') dt' = M\tau(t, t_0) M\rho.
\end{aligned}$$

(Решение неоднородного уравнения находят с помощью стандартной процедуры [77, 78], если известно фундаментальное решение $M\tau_1$ соответствующего однородного уравнения). Итак, $M\tau(t, t_0)\rho = M\tau(t, t_0)M\rho$ для всех нормированных мер вероятности ρ .

Уравнение $U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$ для фундаментальных решений U неоднородного во времени эволюционного уравнения [79] вытекает в данном случае из уравнения Чэпмена — Колмогорова $\tau(t_3, t_2)\tau(t_2, t_1) = \tau(t_3, t_1)$ (U — так называемое среднее распределение Мойяла [80]):

$$\begin{aligned}
U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) &= (M\tau(t_3, t_2))(M\tau(t_2, t_1)) = \\
&= (M\tau(t_3, t_2)M)\tau(t_2, t_1) = (M\tau(t_3, t_2))\tau(t_2, t_1) = \\
&= M(\tau(t_3, t_2)\tau(t_2, t_1)) = M\tau(t_3, t_1) = U(t_3, t_1).
\end{aligned}$$

Инфинитезимальный вариант соотношения $M\tau = M\tau M$ приводит к транспортному оператору B . Пусть L_1 есть линейное преобразование $\mathcal{L}(E_6)$ в $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ такое, что $\langle L_1\rho^{(1)} \rangle = 0$ для всех $\rho^{(1)}$ из $\mathcal{L}(E_6)$. Тогда $Mw(L_1) = M(L_1)M$. Докажем это. Во-первых, $Mw(L_1)\rho = ML_1M\rho$ для ρ из $\mathcal{L}(E_0)$, где $M = 0$ и $w(L_1) = 0$, и для ρ из $\mathcal{L}(E_6)$, где $M = I$, а $w(L_1) = L_1$. Далее доказательство будем проводить по индукции. Предположим, что уравнение справедливо для $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{n-1} E_{6m})$. Пусть $\rho^{(n)} \in \mathcal{L}(E_{6n})$. Ввиду линейности можно считать, что элемент $\rho^{(n)}$ является разложимым, т. е. $\rho^{(n)} = \rho^{(r)}\rho^{(s)}$, $r < n$, $s < n$, так как множество линейных комбинаций таких элементов всюду плотно в рассматриваемом пространстве. (В отличие от случая интегральной формы уравнения область определения оператора $Mw(L_1)$ будет надлежащим образом включена в область определения ML_1M .) Итак,

$$\begin{aligned}
Mw(L_1)(\rho^{(r)}\rho^{(s)}) &= M\left((w(L_1)\rho^{(r)})\rho^{(s)} + \rho^{(r)}w(L_1)\rho^{(s)}\right) = \\
&= (Mw(L_1)\rho^{(r)})\langle\rho^{(s)}\rangle + \langle\rho^{(r)}\rangle Mw(L_1)\rho^{(s)},
\end{aligned}$$

поскольку $\langle Mw(L_1)\cdot \rangle = 0$.

В силу предположения индукции

$$\begin{aligned}
&(Mw(L_1)\rho^{(r)})\langle\rho^{(s)}\rangle + \langle\rho^{(r)}\rangle Mw(L_1)\rho^{(s)} = \\
&= (ML_1M\rho^{(r)})\langle\rho^{(s)}\rangle + \langle\rho^{(r)}\rangle ML_1M\rho^{(s)} = \\
&= ML_1(M\rho^{(r)}\langle\rho^{(s)}\rangle + \langle\rho^{(r)}\rangle M\rho^{(s)}) = ML_1M(\rho^{(r)}\rho^{(s)}).
\end{aligned}$$

Следовательно, на некотором всюду плотном подмножестве множества $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m} \right)$ справедливо соотношение $M\omega(L_1) = ML_1 M$. Поэтому

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_t}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} M\rho_t = M \frac{\partial}{\partial t} \rho_t = M\omega(L_1 + L_0) \rho_t = \\ &= M\omega(L_1) \rho_t + M\omega(L_0) \rho_t = ML_1 M\rho_t + M(\rho_t q) = \\ &= ML_1 F_t + M\rho_t \langle q \rangle + \langle \rho_t \rangle Mq = ML_1 F_t + Mq \quad (\text{так как } \langle q \rangle = 0 \text{ и } \langle \rho_t \rangle = 1). \end{aligned}$$

Значит, транспортное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial F_t}{\partial t} = BF_t + Q,$$

где $B = ML_1$ и $Q = Mq$.

В предыдущем параграфе преобразование L_1 было определено как $L_1 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_x + L_{(-)} + L_c + L_s + L_f$. Рассмотрим отдельно каждый член. Оператор M коммутирует с $-\mathbf{v} \cdot \nabla_x$ на $\mathcal{L}(E_6)$. Он коммутирует также в этом пространстве с оператором $L_{(-)}$, который, будучи оператором поточечного умножения на функцию $-\nu \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, переводит $\mathcal{L}(E_6)$ в себя. Оператор ML_c есть нуль на $\mathcal{L}(E_6)$, поскольку пространство $\mathcal{L}(E_6)$ с помощью оператора L_c преобразуется в $\mathcal{L}(E_0)$, элементы которого оператором M переводятся в нуль. Оператор L_s преобразует $\mathcal{L}(E_6)$ в себя, поэтому он коммутирует с M ; ML_f представляет собой на $\mathcal{L}(E_6)$ преобразование с интегральным ядром

$$\begin{aligned} & \nu \nu' \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) = \\ &= \nu \nu' \sum_{m=1}^N \sum_{k=1}^m \int_{E_3(m-1)} \Sigma_{f,m}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{k-1}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_{k+1}, \dots, \mathbf{v}_m; \mathbf{v}', t) \times \\ & \quad \times d\mathbf{v}_1 \dots d\mathbf{v}_{k-1} d\mathbf{v}_{k+1} \dots d\mathbf{v}_m. \end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} (BF)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= -\mathbf{v} \cdot \nabla_x F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - \nu \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \\ &+ \int_{E_3} \nu (\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t)) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}'. \end{aligned}$$

Если уравнение определено на неограниченном \mathbf{x} -пространстве E_3 , то нет нужды накладывать какие-либо граничные условия. Если же реактор окружен некоторым объемом, являющимся выпуклым множеством, необходимо потребовать выполнение условия

$$F(\mathbf{x}_{гр}, \mathbf{v}_{вх}, t) = 0$$

($\mathbf{x}_{гр}$ — координата любой точки на внешней поверхности; $\mathbf{v}_{вх}$ — скорость нейтронов, летящих в направлении внутрь реактора) и учесть возможность существования внешних источников.

Итак, мы установили смысл всех членов, входящих в транспортное уравнение, в предположении, что нейтрон-нейтронным взаимодействием можно пренебречь. В случае классических газов и плазмы, для которых указанное взаимодействие нельзя считать ничтожно малым, обобщенный оператор Лиувилля выражается как $\omega \left(\sum_{n=0}^{\infty} L_n \right)$. Операторы L_n суть линейные преобразования пространства $\mathcal{L}(E_{6n})$ в $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m} \right)$ или инфинитезимальные порождающие элементы полугрупп, характеризующие только n -частичное взаимодействие. Оператор $M\omega(L_2)$ обуславливает наличие в B квадратичного члена и т. д. Однако мы исключим подобные нелинейности, положив $L_n = 0$ для $n \geq 2$.

§ 8.6. ИНТЕГРАЛЬНОЕ ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ

Величина τ может быть определена как решение любого дифференциального уравнения Колмогорова. Мы для этой цели выбрали опережающее уравнение (уравнение Фоккера—Планка). Ту же самую величину τ можно найти как решение одного из двух интегральных уравнений — уравнения «первого столкновения» [17] и уравнения «последнего столкновения». В общей теории дискретных процессов удобнее оперировать с первым из названных уравнений. Действительно, не исключены такие ситуации, в которых с нулевой вероятностью может отсутствовать последнее столкновение: за конечный промежуток времени может осуществляться бесконечное число соударений. Однако в теории реакторов подобного осложнения не возникает, коль скоро в расчетах используются разумные с физической точки зрения величины сечений. Поэтому в последнем случае допускается произвол в выборе исходного уравнения. Не запрещено работать с уравнением «последнего столкновения», соответствующим [82] обычному интегральному транспортному уравнению для нейтронной плотности.

Такое уравнение получается из обобщенного уравнения Лиувилля $\partial\rho/\partial t = \omega(-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + L_{(-)} + L_{(+)} + L_0)\rho$ посредством двух промежуточных преобразований, реализуемых для его интегрирования. Оператор $\omega(-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + L_{(-)} + L_{(+)} + L_0)$ содержит два члена, которые нетрудно выделить и непосредственно проинтегрировать. Первый из них — так называемый член тока — характеризует прямолинейное движение $[\tau_0(t) = e^{-t\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})}]$ «молекул» нейтронного газа, когда все сечения как бы равны нулю. Именно,

$$(\tau_0(t)\rho)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \dots, \mathbf{x}_m, \mathbf{v}_m) = \rho(\mathbf{x}_1 - t\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{x}_m - t\mathbf{v}_m, \mathbf{v}_m)$$

на каждом множестве $\mathcal{L}(E_{\delta m})$.

Умножим уравнение

$$\left(\frac{\partial\rho_t}{\partial t}\right) + \omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})\rho_t = \omega(L_{(-)} + L_{(+)} + L_0)\rho_t$$

на интегрирующий множитель $\tau_0(t-t')$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'}\right)(\tau_0(t-t')\rho_{t'}) = \tau_0(t-t')\omega(L_{(-)} + L_{(+)} + L_0)\rho_{t'}$$

Далее для фиксированного t положим по определению

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{t'} &= \tau_0(t-t')\rho_{t'}; \quad \hat{L}_0(t') = e^{(t'-t)\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}}L_0; \\ \hat{L}_{(-)}(t') &= e^{(t'-t)\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}}L_{(-)}e^{(t'-t)\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}}; \\ \hat{L}_{(+)}(t') &= e^{(t'-t)\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}}L_{(+)}e^{(t'-t)\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}}.\end{aligned}$$

Тогда получим уравнение

$$(\partial/\partial t')\hat{\rho}_{t'} = \omega(\hat{L}_{(-)}(t') + \hat{L}_{(+)}(t') + \hat{L}_0(t'))\hat{\rho}_{t'},$$

так как

$$\tau_0(t-t')\omega(L_{(-)} + L_{(+)} + L_0)\tau_0(t'-t) = \omega(\hat{L}_{(-)}(t') + \hat{L}_{(+)}(t') + \hat{L}_0(t')).$$

Второй член, подлежащий интегрированию, порождается той частью $\omega(\hat{L}_{rem}(t'))$ оператора $\omega(\hat{L}_{(-)}(t') + \hat{L}_{(+)}(t') + \hat{L}_0(t'))$, которая дает скорость скачкообразного развития процесса — полную скорость убывания вследствие соударений и наличия внешних источников. Преобразование $\omega(\hat{L}_0(t'))$ есть операция умножения справа на

$$\hat{q}(t') = q_0 + \hat{q}_1(t') + \dots + \hat{q}_M(t'),$$

так что $\omega(L_{rem}(t'))$ есть определенная на $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$ операция умножения на функцию $-\omega(v \hat{\Sigma}_{tot}) + q_0$. Следовательно, $\exp\left(\int_{t'}^t \omega(\hat{L}_{rem}(t'')) dt''\right)$ представляет собой ограниченный оператор умножения на функцию, определенную на множестве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$ и принимающую на этом множестве значения между нулем и единицей. Это есть простой интегрирующий множитель для уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t'} \hat{\rho}_{t'} - \omega(\hat{L}_{rem}(t')) \hat{\rho}_{t'} = \omega(\hat{L}_{prod}(t')) \rho_{t'},$$

где

$$\omega(\hat{L}_{prod}(t')) = \omega(\hat{L}_{(+)}(t') + \hat{L}_0(t')) - q_0.$$

Итак,

$$\frac{\partial}{\partial t'} \left[\exp\left(\int_{t'}^t \omega(\hat{L}_{rem}(t'')) dt''\right) \hat{\rho}_{t'} \right] = \exp\left(\int_{t'}^t \omega(\hat{L}_{rem}(t'')) dt''\right) \omega(\hat{L}_{prod}(t')) \hat{\rho}_{t'}.$$

Проинтегрировав обе части этого уравнения по t' в пределах от t_0 до t , получим

$$\hat{\rho}_t - \exp\left[\int_{t_0}^t \omega(\hat{L}_{rem}(t'')) dt''\right] \hat{\rho}_{t_0} = \int_{t_0}^t dt' \exp\left[\int_{t'}^t \omega(\hat{L}_{rem}(t'')) dt''\right] \omega(\hat{L}_{prod}(t')) \hat{\rho}_{t'}.$$

Теперь снова осуществим замену $\hat{\rho}_{t'} = \tau_0(t-t') \rho_{t'}$:

$$\begin{aligned} \rho_t = \tau_0(t-t_0) \exp\left[\int_{t_0}^t \tau_0(t-t'') \omega(L_{rem}(t'')) \tau_0(t''-t_0) dt''\right] \rho_{t_0} + \\ + \int_{t_0}^t dt' \tau_0(t-t') \exp\left[\int_{t'}^t \tau_0(t'-t'') \omega(L_{rem}(t'')) \tau_0(t''-t') dt''\right] \times \\ \times \omega(L_{prod}(t')) \rho_{t'}. \end{aligned}$$

Это и есть уравнение «последнего столкновения». Первый член в правой части уравнения характеризует вклад в ρ_t , обусловленный теми «молекулами» газа из данного ансамбля, которые не претерпевают скачкообразного изменения состояния в течение промежутка времени $t - t_0$. Соответствующий оператор есть оператор перехода для незамкнутого мультипликативного процесса [94]. Подынтегральное выражение второго члена в правой части определяет вклад тех молекул газа, которые испытали последний скачок в момент времени t' .

Некоторые из фигурирующих выше операторов являются неограниченными. Но это обстоятельство не выдвигает серьезного препятствия. Операторы $\mathbf{v} \cdot \nabla_x$ и $\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)$ суть инфинитезимальные порождающие операторы группы преобразований, принадлежащих к одному хорошо известному классу — классу преобразований, осуществляемых посредством трансляций. Операторы $-\omega(L_{rem}(t))$ и $\omega(L_{prod}(t))$ являются сохраняющими порядок. Можно предположить, что $L_{rem}(t)$ и $L_{prod}(t)$ и даже $\int_{t'}^{t'+\text{const}} \omega(L_{prod}(t'')) \tau(t'', t_0) dt''$ имеют ограниченные в совокупности нормы и представляют собой на конечных интервалах достаточно хорошие функции. Таким образом, интуитивно оправдывается наличие интегральных операторов [83].

Строгий вывод можно получить на основе прямой модификации теоретико-множественных методов, примененных Мойялом к уравнению «первого столкновения» [84].

Точно таким же способом нетрудно найти интегральное транспортное уравнение для $F_t = M\rho_t$, ибо нами нигде не была использована нормировка

$\langle \rho_i \rangle = 1$. Запишем его:

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \exp \left[- \int_{t_0}^t v \Sigma_{tot}(\mathbf{x} - (t-t'') \mathbf{v}, \mathbf{v}, t'') dt'' \right] F(\mathbf{x} - (t-t_0) \mathbf{v}, \mathbf{v}, t_0) + \\ + \int_{t_0}^t dt' \exp \left[- \int_{t'}^t v \Sigma_{tot}(\mathbf{x} - (t-t'') \mathbf{v}, \mathbf{v}, t'') dt'' \right] dt' \times \\ \times \left\{ \int_{E_s} [v' \Sigma_s(\mathbf{x} - (t-t') \mathbf{v}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t') + v' \Sigma_f(\mathbf{x} - (t-t') \mathbf{v}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t')] \times \right. \\ \left. \times F(\mathbf{x} - (t-t') \mathbf{v}, \mathbf{v}', t') dv' + Q(\mathbf{x} - (t-t') \mathbf{v}, \mathbf{v}, t') \right\}.$$

Как правило, первый член в правой части этого уравнения отсутствует, поскольку обычно предполагается, что $t_0 \rightarrow -\infty$ и что при таком предельном переходе $F(\mathbf{x} - (t-t_0) \mathbf{v}, \mathbf{v}, t_0)$ обращается в нуль.

§ 8.7. МНОГОГРУППОВАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ

Вывод диффузионного уравнения из транспортного, основанный на методе сферических гармоник с использованием операторного формализма, не является вполне строгим (см. разд. 1.1.3). Дело в том, что при подобной процедуре осуществляется неконтролируемое приближение, ввиду чего трудно проследить связь с исходным мультипликативным процессом. Можно, однако, реализовать другое приближение, аппроксимируя исходный процесс новым мультипликативным процессом, который в точности соответствует некоторой системе диффузионных уравнений (в то время как исходный процесс описывается транспортным уравнением). Частицы нового типа совершают непрерывное движение, подобное броуновскому (при этом их траектория настолько нерегулярна, что не имеет даже касательной — скорость частицы характеризуется лишь абсолютной величиной v , а понятие вектора скорости \mathbf{v} в данном случае лишено смысла), в пределах каждой энергетической группы и претерпевают скачки при переходе в другие группы, при радиационном захвате и захвате с делением. Для описания таких диффузионных процессов развита весьма совершенная математическая теория [54, 85, 86], в частности, одномерная модель [86, 87] и конечно-разностное приближение [88]. Существует даже метод Монте-Карло для описания указанного диффузионного процесса. Этот метод может быть использован для оценки реактивности и для вычисления основной гармоникой потока нейтронов [89—92]. Хорошо развиты также методы случайных блужданий для решения эллиптического уравнения с заданными граничными условиями [93].

В изотропной среде коэффициент диффузии D естественным образом определяется через сечение рассеяния Σ_s . При этом нет необходимости пренебрегать какими-либо сферическими гармониками и диагонализировать надлежащим образом Σ_{tr} . Предположим, что в транспортном уравнении Σ_c , Σ_f и источник Q равны нулю. Сечение Σ_{tot} заменим той его частью, которая обусловлена только рассеянием, т. е. $\int_{E_s} \Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) dv'$. Поскольку оператор $\nabla \cdot D \nabla$ локален в \mathbf{x} -пространстве, оставшиеся две функции сечений заменим постоянными, равными значениям этих функций в некоторой фиксированной точке $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$, где надо определить $D(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$:

$$\Sigma_{tot}^{(0)}(\mathbf{x}, u, \Omega, t) = \int_{E_s} \Sigma_s(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}'; \mathbf{v}_0, t_0) dv';$$

$$\Sigma_s^{(0)}(\mathbf{x}, u' - u, \Omega' \cdot \Omega, t) = \Sigma_s(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}^{(0)}; \mathbf{v}_0, t_0)$$

для всех $\mathbf{x}, u, \Omega, u', \Omega', t$ (здесь $u = \ln(v/v_0)$, $\Omega = \mathbf{v}/v$, $v^{(0)} = e^{u' - u} \Omega' v_0$).

Модифицированное транспортное уравнение с начальным условием

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) / 4\pi v_0^2 \quad \text{при } t = 0$$

определяет модифицированный марковский процесс. Обобщая центральную предельную теорему на случай таких частично коррелированных сумм «случайных длин пролета», можно показать, что безусловная проекция $\rho(\cdot, \cdot, t)$ на \mathbf{x} -пространство асимптотически при $t \rightarrow \infty$ достигает гауссовского распределения

$$\exp[-(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2 / 2\sigma^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0) t] / [2\pi\sigma^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0) t]^{3/2}$$

с центром в точке \mathbf{x}_0 . Диффузионное уравнение

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot D(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0) \nabla_{\mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}, t)$$

асимптотически будет совпадать с транспортным уравнением тогда и только тогда, когда написанный гауссиан будет его функцией Грина, т. е. тогда и только тогда, когда

$$D(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0) = \sigma^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0) / 2.$$

Если значение D достигает этой или какой-либо другой (обязательно нелокальной) функции, если D достаточно гладок, тогда мы имеем дело с броуновским движением [54, 86].

Автору не удалось найти в литературе обсуждение характера разрывов величины D на границе раздела сред с разными рассеивающими свойствами для случая двумерного и (многомерного) \mathbf{x} -пространства. Однако одномерная теория диффузии является вполне совершенной и кажется более чем адекватной для описания любой физически разумной ситуации. Нетрудно догадаться, что отсутствие соответствующих теорем для двумерного и трехмерного пространств объясняется не принципиальными трудностями, а всего лишь тем, что в прошлом нам не были нужны подобные результаты.

Очень важным побочным результатом конструирования описанного стохастического процесса должно быть доказательство так называемой Первой теоремы многогрупповой диффузионной теории. Эта теорема устанавливает условия, при которых многогрупповой диффузионный оператор является инфинитезимальным порождающим оператором сохраняющей порядок полугруппы. Доказательство аналогичной теоремы для линейаризованного транспортного оператора вытекает непосредственно из теоремы Феллера (см. приложение Б), хотя с физической точки зрения транспортная теория является более реалистической, нежели диффузионная.

Коль скоро построен непрерывный, моноэнергетический процесс, описание перехода из группы в группу и вычисление соответствующего числа частиц можно выполнить с помощью метода Мойяла [94].

Пусть на интервале $[r_a, r_b]$ заданы граничные условия третьего рода (смешанные граничные условия), которые можно записать (для определенности на левом конце r_a) в виде $\alpha_a \varphi(r_a) - \beta_a \varphi'(r_a) = \gamma_a$, $\alpha_a > 0$, $\beta_a > 0$. Тогда, продолжая интервал до экстраполированной границы, можно интерпретировать эти условия в рамках вероятностного подхода [95]. Запишем указанные условия для уравнения

$$r^{1-N} (r^{N-1} D(r) \varphi'(r))' - \sigma(r) \varphi(r) + s(r) = 0$$

в виде $\varphi(r_a) - \frac{\gamma_a}{\alpha_a} - \frac{\beta_a}{\alpha_a} \varphi'(r_a) = 0$ и распространим процесс на интервал $\left[r_a - \frac{\beta_a}{\alpha_a}, r_a \right]$, определив на нем $D(r) = D(r_a)$ и $\sigma(r_a) = s(r_a) = 0$ и приняв, таким образом, $\varphi'(r) = \text{const}$ (рис. 8.1). Тогда в точке экстраполяции $r_a - \frac{\beta_a}{\alpha_a}$ будет

выполняться граничное условие первого рода (условие Дирихле) $\varphi\left(r_a - \frac{\beta_a}{\alpha_a}\right) = \frac{\gamma_a}{\alpha_a} \geq 0$, если $\gamma_a \geq 0$. Если $\gamma_a < 0$, то можно прибавить к φ константу $\frac{-\gamma_a}{\alpha_a} > 0$. Функция $\varphi + \left(\frac{-\gamma_a}{\alpha_a}\right)$ будет удовлетворять однородному граничному условию

$$\alpha_a \left[\varphi(r_a) + \left(\frac{-\gamma_a}{\alpha_a}\right) \right] - \beta_a \left[\varphi + \left(\frac{-\gamma_a}{\alpha_a}\right) \right]'(r_a) = 0.$$

Кроме того, эта функция должна удовлетворять исходному дифференциальному уравнению, в котором к члену источника добавлено неотрицательное слагаемое $-\gamma_a/\alpha_a \cdot \sigma$.

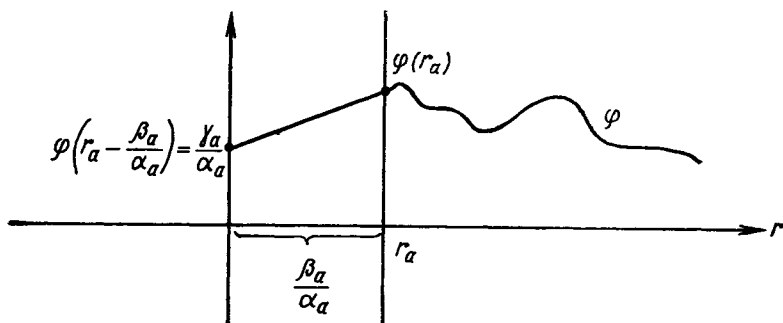


Рис. 8.1. К записи граничных условий.

Граничные условия первого или второго (условия Неймана: $\alpha = 0$) рода можно получить вероятностными методами, подбирая надлежащим образом источники в конечной точке. При рассмотрении диффузии на границе круга [96] реализуются периодические граничные условия.

Однородные граничные условия Дирихле и Неймана отвечают соответственно наличию поглощающего и отражающего барьеров. Особая точка при $r = 0$ для $N \geq 2$ имеет прозрачную вероятностную интерпретацию [97].

В конечно-разностном приближении марковский процесс представляет собой случайное блуждание в узловых точках $k = 0, 1, 2, \dots, k_{\max}$. Для того чтобы оператор $e^{[\Delta^+ A \Delta^-]t}$ (используются обозначения гл. 1) был оператором перехода для цепи Маркова в конечном пространстве k состояний [98, 99], необходимо и достаточно выполнение следующих двух условий: 1) $\sum_k (\Delta^+ A \Delta^-)_{kj} = 0$ для всех j (условие консервативности) и 2) $[\Delta^+ A \Delta^-]_{kj} > 0$, если $k \neq j$ (сохранение порядка).

Оператор $r^{1-N} \frac{d}{dr} D r^{N-1} \frac{d}{dr}$ однозначно определяет самосопряженный (с весом $r^{N-1} dr$) оператор, так что марковский процесс в точности совпадает с обратным [100]. Оператор $(\Delta^+ A \Delta^-)^* = (\Delta^-)^* A^* (\Delta^+)^* = (-\Delta^+) A (-\Delta^-) = \Delta^+ A \Delta^-$ также самосопряженный. Поэтому любая естественная модификация, приводящая к однородным граничным условиям, будет оставлять цепь Маркова инвариантной по отношению к обращению времени.

Для включения в рассмотрение захвата, деления и внешних источников и для учета неоднородных граничных условий конечное пространство состояний следует расширить до бесконечного пространства популяций (см. § 8.2). Однако такое бесконечное множество является счетным, а теория марковских цепей в счетном пространстве состояний — один из самых сложных разделов общей теории [88, 101, 102].

Как отмечалось в § 8.3, состояние реактора в произвольный момент времени описывается элементом из некоторого пространства $\mathcal{L}(S)$ в рамках любой из выбранных моделей (транспортной или диффузионной теории, конечно-разностного приближения для каждой из этих двух теорий или любого марковского процесса). Дуальное (сопряженное) пространство [37, 102] $\mathcal{L}(S)^*$ (M -пространство [104]) есть множество всех непрерывных линейных функционалов, определенных на $\mathcal{L}(S)$. Связи между линейными пространствами и их сопряженными посвящено много чисто математических работ. Однако физический смысл подобных концепций приходится выявлять заново в каждой прикладной задаче. Определение сопряженного (по Лагранжу [105]) оператора было введено впервые в прикладной математике. Анализ поведения реактора обеспечивает новую прекрасную возможность продемонстрировать связь современной абстрактной теории с прикладными вопросами.

Наблюдаемые параметры системы соответствуют вещественнозначным функциям, определенным в фазовом пространстве S , и, следовательно, средним значениям линейных функционалов $\psi \rightarrow \langle \Psi \psi \rangle$, определенных на $\mathcal{L}(S)$. Линейные функционалы мы будем предполагать ограниченными, так что Ψ (т. е. $\langle \Psi \cdot \rangle$) будут принадлежать $\mathcal{L}(S)^*$.

Каждое линейное преобразование A пространства $\mathcal{L}(S)$ в себя отвечает линейному сопряженному преобразованию A^* пространства $\mathcal{L}(S)^*$ в себя. Оператор A^* определяется соотношением [106] $\langle \Psi (A \psi) \rangle = \langle (A^* \Psi) \psi \rangle$ для всех ψ из $\mathcal{L}(S)$ и всех Ψ из $\mathcal{L}(S)^*$ с соответствующими модификациями [107] в том случае, когда оператор A задан не на всем пространстве $\mathcal{L}(S)$. Пусть $U(t_2, t_1)$ есть преобразование, переводящее пространство $\mathcal{L}(S)$ из состояния, отвечающего моменту времени t_1 , в состояние, отвечающее $t_2 \geq t_1$. Сопряженное ему преобразование сохраняет частичную упорядоченность пространства $\mathcal{L}(S)^*$ и характеризуется свойством

$$U(t, t)^* = I^* = I, \text{ а } U(t_3, t_1)^* = U(t_2, t_1)^* U(t_3, t_2)^*,$$

как вытекает из определяющего сопряженный оператор уравнения. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle (U(t_3, t_1)^* \Psi) \psi \rangle &= \langle \Psi (U(t_3, t_1) \psi) \rangle = \langle \Psi (U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) \psi) \rangle = \\ &= \langle (U(t_3, t_2)^* \Psi) (U(t_2, t_1) \psi) \rangle = \langle (U(t_2, t_1)^* U(t_3, t_2)^* \Psi) \psi \rangle = \\ &= \langle ((U(t_2, t_1)^* U(t_3, t_2)^*) \Psi) \psi \rangle. \end{aligned}$$

Чтобы сохранить соприкосновение средних точек t_2 , определим $U^*(\cdot, \cdot)$ соотношением $U^*(t_1, t_2) = U(t_2, t_1)^*$. Тогда $U^*(t_1, t_3) = U^*(t_1, t_2) U^*(t_2, t_3)$.

Пусть известно, что в момент времени t_1 система находится в состоянии ψ_{t_1} , а среднее значение Ψ_{t_2} в более поздний момент времени t_2 есть $\langle \Psi_{t_2} (U(t_2, t_1) \psi_{t_1}) \rangle = \langle (U^*(t_1, t_2) \Psi_{t_2}) \psi_{t_1} \rangle = \langle \Psi_{t_1} \psi_{t_1} \rangle$, где $\Psi_{t_1} = U^*(t_1, t_2) \Psi_{t_2}$.

Оператор $U^*(t_1, t_2)$ возвращает систему $\mathcal{L}(S)^*$ из состояния, отвечающего t_2 , в состояние, отвечающее $t_1 \leq t_2$. (Если процесс измерения нельзя считать мгновенным, то результат в момент времени t_1 будет выражаться как $\int_{t_1}^{\infty} U^*(t_1, t_2) \Psi^{(t_2)} dt_2 = \Psi^{(t_1)}$, где $\Psi^{(t)}$ — интегрируемая со значениями из $\mathcal{L}(S)^*$, а в остальном произвольная функция t .) Величина $U^*(t_1, t_2) \Psi_{t_2}$ в точке X множества S (рассматривается случай, когда Ψ представляет собой обычную функцию; это обычно так и есть, поскольку U обладает свойствами гладкости) есть «ценность» [108, 109] нейтрона в точке X в момент времени t_1 по отношению к величине Ψ_{t_2} , наблюдаемой в момент времени t_2 [110]. Ценность элемента X (безотносительно ко времени и к наблюдаемой), если она су-

существует, в рамках транспортной или диффузионной теории есть $(U^*(-\infty, 0)1)(X)$, где 1 — постоянная на S функция. Как правило (см. Приложение А), вид функции $U^*(-\infty, 0)\Psi$ не зависит от Ψ . Она является дуальным аналогом стационарной (основной) гармонике потока нейтронов. Ее часто называют сопряженным потоком.

Функция $U^*(t_1, t_2)$ также определяется как решение уравнения, сопряженного запаздывающему уравнению Колмогорова

$$-\frac{\partial}{\partial t_1} U^*(t_1, t_2) = -\frac{\partial}{\partial t_1} U(t_2, t_1)^* = (U(t_2, t_1)L_{t_1})^* = L_{t_1}^{*1} U^*(t_1, t_2).$$

Функция Ψ_t удовлетворяет уравнению $-\partial\Psi_t/\partial t = L_t^* \Psi_t$, сопряженному уравнению для ψ_t . В рамках транспортной теории оператор L_t^* , определенный на некоторой области из $\mathcal{L}(S)^*$, имеет вид

$$(L_t^* \Psi_t)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} \Psi_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - v \Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \Psi_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) + v \int (\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t) + v \Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t)) \Psi_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}') dv'.$$

Ценность по отношению к Ψ_{t_2} нейтрона, покидающего границу реактора, в момент $t_1 < t_2$ естественно равна нулю. Поэтому для функции Ψ_{t_1} должно выполняться граничное условие $\Psi_{t_1}(\mathbf{x}_{гр}, \mathbf{v}_{вых}) = 0$, обратное условию, накладываемому на функцию потока. Если добавить еще условие $\Psi_{t_1} \rightarrow \Psi_{t_2}$ при $t_1 \uparrow t_2$, то функция Ψ_t будет определена для всех $t < t_2$. Для физически реальной ситуации это можно доказать строго, используя теорию сопряженных полугрупп [111, 112], поскольку можно сослаться на теорему Феллера для исходного оператора U на $\mathcal{L}(S)$ (см. Приложение Б).

В многогрупповом диффузионном приближении функция Ψ_t удовлетворяет уравнению (заданному на некоторой области, которую мы не будем конкретизировать)

$$-\frac{\partial}{\partial t} \Psi_t = v \operatorname{div} D \operatorname{grad} \Psi_t + (\Sigma_s + v \Sigma_f)' \Psi_t - \Sigma_{tot} \Psi_t.$$

Величины v , D и Σ_{tot} — матричные функции \mathbf{x} (v — постоянная матрица, коммутирующая с grad и div), диагональные относительно индексов энергетических групп. Величина $(\Sigma_s + v \Sigma_f)'$ представляет собой транспонированную матрицу $\Sigma_s + v \Sigma_f$; поэтому модель, в которой допускается рассеяние нейтронов только в низлежащие энергетические группы, характеризуется рассеянием «ценности» только в обратном направлении («вверх»). Ценность броуновских частиц на границе равна нулю, так как при пересечении границы они с вероятностью единица исчезают [113]. Следовательно, для Ψ_t должно выполняться условие $\Psi_{t_1}(\mathbf{x}_{гр}) = 0$ при $t_1 < t_2$. На границе раздела сред ценность сохраняется. Кроме того, она удовлетворяет, как и выше, еще условию $\Psi_{t_1} \rightarrow \Psi_{t_2}$ при $t_1 \uparrow t_2$.

Основное применение сопряженные функции находят при вычислениях на основе теории возмущений [114, 115]. Пусть λ есть обратная величина периода реактора (λ^{-1} — время увеличения потока в «е» раз), а ψ_0 — основная гармоника потока нейтронов. Тогда ψ_0 удовлетворяет уравнению $A\psi_0 = \lambda\psi_0$, а оператор $U(t_2, t_1) = e^{A(t_2-t_1)}$ (в случае не зависящих от времени сечений) принадлежит равномерно полупрimitивной полугруппе [116]. Поскольку λ — изолированная точка в спектре оператора A , можно сконструировать спектральную проекцию E пространства $\mathcal{L}(S)$ на его одномерное подпространство, натянутое на ψ_0 .

Каждая функция ψ из $\mathcal{L}(S)$ задает с помощью уравнения $E\psi = \alpha_\psi \psi_0$ действительное число α_ψ . Совокупность всех α_ψ представляет собой множество ограниченных линейных функционалов, определенных на $\mathcal{L}(S)$. Значит, должен существовать элемент Ψ_0 из $\mathcal{L}(S)^*$ такой что $\alpha_\psi = \langle \Psi_0, \psi \rangle$ для каждой функции ψ . Поскольку $\alpha_{\psi_0} = 1$ (так как $E\psi_0 = \psi_0$), то $\langle \Psi_0, \psi_0 \rangle = 1$.

Можно показать, что справедливо соотношение $E^*\Psi = \Psi_0 \langle \Psi \psi_0 \rangle$. Действительно, $\langle \Psi(E\psi) \rangle = \langle \Psi(\psi_0 \langle \Psi_0 \psi \rangle) \rangle = \langle \Psi \psi_0 \rangle \langle \Psi_0 \psi \rangle = \langle (\Psi_0 \langle \Psi \psi_0 \rangle) \psi \rangle$ для всех Ψ из $\mathcal{L}(S)^*$ и всех ψ из $\mathcal{L}(S)$. Поэтому $E^* \Psi_0 = \Psi_0$. В обозначениях Гиббса $E = \psi_0 \langle \Psi_0 \cdot \rangle$ и $E^* = \Psi_0 \langle \cdot \psi_0 \rangle$ [117].

Функция Ψ_0 представляет собой функцию, сопряженную основной гармонике потока, и удовлетворяет уравнению $A^* \Psi_0 = \lambda \Psi_0$. Это утверждение вытекает из следующей цепочки равенств: $\langle (A^* \Psi_0) \psi \rangle = \langle (A^* E^* \Psi_0) \psi \rangle = \langle \Psi_0 (A E \psi) \rangle = \langle \Psi_0 (A \psi_0 \langle \Psi_0 \psi \rangle) \rangle = \langle \Psi_0 (A \psi_0) \rangle \langle \Psi_0 \psi \rangle = \langle \Psi_0 (\lambda \psi_0) \rangle \langle \Psi_0 \psi \rangle = \langle \Psi_0 \psi_0 \rangle \langle \lambda \Psi_0 \psi \rangle = \langle \lambda \Psi_0 \psi \rangle$ для всех ψ из области определения оператора A .

Предположим теперь, что к оператору A добавлено возмущение A_ε , зависящее аналитически от ε в окрестности точки $\varepsilon = 0$, где $A_0 = 0$ [118]. $A + A_\varepsilon$ также является инфинитезимальным порождающим оператором равномерно полупривитивной полугруппы. Поэтому к нему применимо приведенное выше рассуждение, касающееся основной гармоники ψ_ε , сопряженной к ней функции Ψ_ε и периода реактора $1/\lambda_\varepsilon$. Нам необходимо оценить λ_ε , если известны ψ_0 , Ψ_0 и λ для невозмущенного оператора A . Умножив справа обе части уравнения $(A + A_\varepsilon)^* \Psi_\varepsilon = \lambda_\varepsilon \Psi_\varepsilon$ на Ψ_0 , получим

$$\langle (A + A_\varepsilon)^* \Psi_\varepsilon \rangle \psi_0 = \lambda_\varepsilon \langle \Psi_\varepsilon \psi_0 \rangle$$

или

$$\langle (A_\varepsilon^* \Psi_\varepsilon) \psi \rangle + \langle \Psi_\varepsilon (A \psi_0) \rangle = \lambda_\varepsilon \langle \Psi_\varepsilon \psi_0 \rangle,$$

откуда

$$\langle (A_\varepsilon^* \Psi_\varepsilon) \psi_0 \rangle = (\lambda_\varepsilon - \lambda) \langle \Psi_\varepsilon \psi_0 \rangle$$

и

$$\lambda_\varepsilon - \lambda = \langle \Psi_\varepsilon (A_\varepsilon \psi_0) \rangle / \langle \Psi_\varepsilon \psi_0 \rangle.$$

Но $\Psi_\varepsilon / \langle \Psi_\varepsilon \psi_0 \rangle$ — аналитическая функция ε [118] со значениями из $\mathcal{L}(S)^*$, так что в окончательном уравнении мы можем заменить ее функцией $\Psi_0 / \langle \Psi_0 \psi_0 \rangle$. В результате получим

$$\lambda_\varepsilon = \lambda + \langle \Psi_0 (A_\varepsilon \psi_0) \rangle + O(\varepsilon^2).$$

Это и есть выражение для неизвестной величины λ_ε в терминах известных или непосредственно вычисляемых величин, справедливое в первом порядке по ε .

Можно получить аналогичные выражения для λ_ε и $\psi(\varepsilon)$ с произвольной точностью по ε , но соответствующие формулы значительно усложняются [114, 115].

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ЭРГОДИЧНОСТЬ

Если стохастический процесс является строго стационарным и если среднее по ансамблю \mathcal{E} значение абсолютной величины f конечно, то согласно эргодической теореме Биркхoffsа [119] с вероятностью единица существует

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(X_t) dt.$$

Этот предел равен среднему по ансамблю от величины f ,

если временной сдвиг множества \mathcal{E} обладает свойством эргодичности, т. е. если \mathcal{E} и любое его пустое подмножество являются единственными подмножествами, характеризующимися следующим свойством: если $X_{(\cdot)}$ принадлежит данному подмножеству, то для любого фиксированного момента времени t элемент $X_{(\cdot+t)}$ с необходимостью также принадлежит этому подмножеству [120, 121].

Выполнение указанного условия эргодичности весьма трудно проверить в большинстве задач статистической механики. Но в данном случае это сделать сравнительно просто. Оно вытекает из того довольно неприятного факта, что нельзя создать идеальную защиту от нейтронов. Чтобы установить его, заменим временную переменную дискретной переменной и реализуем аппроксимацию пространства $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{gm}$ некоторым конечным дискретным пространством

$\bigcup_{m=0}^M (E'_6)^{(m)}$. При этом стохастический процесс окажется конечномерной цепью Маркова со стационарными вероятностями перехода [122—124]. Для нее нетрудно показать [125], что временной сдвиг эргодичен тогда и только тогда, когда в любую точку множества $\bigcup_{m=0}^M (E'_6)^{(m)}$ можно попасть из любой другой точки через конечное число шагов. Матрица перехода $\tau^{(1)}$, характеризующая распределения вероятности на $\bigcup_{m=0}^M (E'_6)^{(m)}$ при смещении из одной временной точки в следующую, должна быть неприводимой в смысле Фробениуса [126—128].

Реактор нельзя представить в виде двух не взаимодействующих частей. Иначе можно было бы рассматривать каждую часть отдельно. И так, когда процесс Маркова ограничен множеством E'_6 и когда на границе возбуждаются неустойчивые точки [129], подпроцесс имеет только один эргодический класс [130] и соответствующая подматрица $\tau^{(1)}$ неприводима. Мы покажем даже, что эта матрица примитивна в смысле Фробениуса [131]. Следовательно, подпроцесс на $(E'_6)^{(m)}$ характеризуется неприводимой подматрицей, поскольку крокеровское произведение примитивных матриц есть также примитивная матрица. Чтобы учесть неустойчивые точки, следует принять обычное соглашение, в соответствии с которым все покидающие реактор нейтроны должны поглощаться землей или атмосферой. Этот факт должен быть отражен в граничных условиях. (На энергетической поверхности указанным граничным условиям отвечает наличие «ловушки потока».) Таким образом, с использованием сечения поглощения устанавливается связь $(E'_6)^{(m)}$ с $(E'_6)^{m-1}$. Связь с $(E'_6)^{(n)}$ для $n > m$ осуществляется с помощью сечений деления и внешних источников. Можно показать, что в любой реалистической модели матрица $\tau^{(1)}$ будет удовлетворять условию Фробениуса.

Усечение множества $\bigcup_{m=0}^{\infty} (E'_6)^{(m)}$ до конечного объединения $\bigcup_{m=0}^M (E'_6)^{(m)}$ можно выполнить совместно с разумной аппроксимацией уравнения движения, если среднее число $\langle \omega(I)\rho \rangle$ нейтронов остается ограниченным, что несомненно справедливо для стационарного процесса. С другой стороны, цепи Маркова для счетного пространства состояний [132] настолько хорошо изучены, что обрезания нетрудно избежать. Однако проведение строгих рассуждений для континуального пространства состояний при непрерывном во времени изменении параметров сопряжено с существенными техническими трудностями.

В силу теоремы Перрона и Фробениуса [133, 47, 48] существует одно и только одно распределение вероятности ρ_{∞} такое, что $\tau^{(1)}\rho_{\infty} = \rho_{\infty}$. (В современной математической литературе множество работ посвящено вопросу существования и однозначности инвариантного распределения вероятности для большинства общих пространств состояний [134—137].) Любая координата ρ_{∞} положительна. Величина $M\rho_{\infty}$ представляет собой критический поток. Если пренебрегать источниками спонтанного деления и другими источниками, эргодичность окажется нарушенной и нельзя будет найти однозначно стационарного распределения. Действительно, $\tau^{(1)}\Sigma\alpha_n(\rho_{\infty})^n = \Sigma\alpha_n(\tau^{(1)}\rho_{\infty})^n = \Sigma\alpha_n(\rho_{\infty})^n$, так что любая выпуклая комбинация $\Sigma\alpha_n(\rho_{\infty})^n$ при $\alpha_n \geq 0$, $\Sigma\alpha_n = 1$ также будет стационарной. Но $M\Sigma\alpha_n(\rho_{\infty})^n = (\Sigma n\alpha_n)M\rho_{\infty}$, и поэтому результат будет просто скалярным произведением величины $\Sigma n\alpha_n$ на прежний поток. Однако условия Фробениуса будут все еще выполняться для макроскопического оператора эволюции $M\tau^{(1)} = U^{(1)}$, определенного на $\mathcal{L}(E'_6)$, даже при отсутствии внешних источников, но при выполнении других указанных выше условий. Операция проектирования M устраняет необходимость в таких источниках, поскольку оператор M есть нуль на $\mathcal{L}(E_0)$ и нужно лишь связать $\mathcal{L}(E_0)$ с $\mathcal{L}(E'_6)$, чтобы E_0 не было эргодическим классом.

Для вычислительных целей надо не только констатировать существование и единственность критического потока. Хотелось бы быть уверенным, что для

любого исходного распределения вероятности ρ_0 закономерен предельный переход $(\tau^{(1)})^n \rho_0 \rightarrow \rho_\infty$ при $n \rightarrow \infty$. Строго говоря, это гарантируется более сильным условием эргодичности, которое должно быть наложено реалистической моделью на стохастический процесс.

Пусть нам известна детально композиция критического реактора, т. е. известны все макроскопические сечения как функции координат и энергии. Тогда (принципиально) можно рассчитать асимптотическое распределение ρ_∞ , содержащее в себе всю располагаемую нами информацию о нейтронном газе. Теперь предположим, что мы наблюдаем один или несколько параметров, например полное тепловыделение, локальную температуру и т. п. Эти параметры обычно флуктуируют в процессе стационарной работы. Непосредственно перед моментом измерения указанные параметры представляли собой случайные величины с известными распределениями, поскольку асимптотическое распределение ρ_∞ известно. После окончания измерений те же самые параметры будут иметь различные распределения (с небольшой дисперсией, зависящей от точности измерений), включающие дополнительную информацию. Информация о состоянии системы также увеличится, ибо система будет теперь представлена новым, улучшенным распределением ρ_0 . (Информация, доставляемая наблюдениями, описывается формулой $H^{p\infty}(\rho_0) = \sum_i \rho_{0,i} \ln(\rho_{0,i}/\rho_{\infty,i})$, которую можно назвать основной формулой теории информации [144—146]. Распределение ρ_0 следует определить таким требованием: распределение ρ_0 должно минимизировать $H^{p\infty}(\rho)$ как функцию, заданную на множестве всех распределений вероятности ρ при условии, что наблюдаемые параметры имеют новые распределения [147].) Если через n шагов измерения окажутся законченными, система будет представлена распределением $\tau^{(1)n} \rho_0$. Такая временная зависимость обусловлена влиянием непредсказуемых случайных событий, влекущих за собой в конечном итоге полную потерю новой информации (в силу предположения о природе нейтронного газа), т. е. реализующих предельный переход $\tau^{(1)n} \rho_0 \rightarrow \rho_\infty$ при $n \rightarrow \infty$. Если последнее утверждение верно для всех распределений, то неприводимая матрица $\tau^{(1)}$ должна быть примитивной в смысле Фробениуса [148]. В противном случае должно существовать распределение ρ_0 такое, что $\tau^{(1)n} \rho_0$ является периодической функцией n , в силу чего невозможен предельный переход к ρ_∞ [149]. На языке стохастических процессов это означает, что должны существовать циклически движущиеся подклассы [150, 151].

Наоборот, если $\tau^{(1)}$ — примитивная матрица, тогда все ее собственные значения, за исключением (невырожденного) собственного значения Перрона—Фробениуса, имеют абсолютную величину, меньшую единицы. Поэтому предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \tau^{(1)n} \rho_0$ существует и для произвольного начального распределения вероятности ρ_0 он равен ρ_∞ .

Итак, примитивность матрицы $\tau^{(1)}$ эквивалентна свойству потери информации. Это утверждение можно сформулировать точно: если матрица $\tau^{(1)}$ примитивна и если ρ_0 есть результат некоторого максимального числа измерений, т. е.

$$\rho_{0,i} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = i_0; \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

то $H^{p\infty}(\tau^{(1)n} \rho_0)$ монотонно стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$ [152, 153].

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

СУЩЕСТВОВАНИЕ И ЕДИНСТВЕННОСТЬ СТОХАСТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Если все сечения равны нулю, то, очевидно, существует один и только один стохастический процесс — стохастический в самом тривиальном смысле, т. е. детерминированный процесс. В этом случае известен гамильтониан [154] H , заданный на фазовом пространстве E_ϵ и определяющий движение с помощью

своего инфинитезимального порождающего оператора, т. е. с помощью скобок Пуассона [155] $[H, \cdot] : f \rightarrow [H, f] = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right)$ для всех дифференцируемых функций f из $\mathcal{L}(E_\theta)$. Для одного свободного нейтрона с массой m , обладающего импульсом \mathbf{p} , $H = \mathbf{p}^2/2m$ и $[H, f] = (\mathbf{p}/m) \cdot \text{grad}_x f = \mathbf{v} \cdot \text{grad}_x f$. Пусть $e^{-t[H, \cdot]}$ есть соответствующая группа трансляций пространства $\mathcal{L}(E_\theta)$, т. е. $(e^{-t[H, \cdot]} f)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, \mathbf{v})$. Тогда $\tau_0(t_2, t_1) = e^{-(t_2 - t_1)[H, \cdot]}$ на $\mathcal{L}(E_\theta)$ и, следовательно, $\tau_0(t_2 - t_1) = e^{-(t_2 - t_1)\omega([H, \cdot])}$ на $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\theta m})$.

Теперь предположим, что не равные нулю сечения вносят некоторое возмущение в этот простой мультипликативный процесс. Используем оператор τ_0 для приведения множества $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\theta m}$ к движущейся системе координат, по отношению к которой все решения невозмущенного уравнения стационарны (метод Лагранжа, или метод «вариации произвольных постоянных»). Заменим ρ_t функцией $\hat{\rho}_t = \tau_0(-t)\rho_t$, где ρ_t из $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\theta m})$ есть решение возмущенного уравнения (с ненулевыми сечениями): $\rho_t = \tau(\mathbf{x}, 0)\rho_0$. При $t=0$ имеет место равенство $\rho_0 = \hat{\rho}_0$ (ибо $\tau_0(0) = I$), так что движение $\hat{\rho}$ в этой новой системе координат описывается законом $\hat{\rho}_t = \tau_0(-t)\tau(t, 0)\hat{\rho}_0$, т. е. $\hat{\rho}_{t_2} = \tau_0(-t_2)\tau(t_2, t_1) \times \tau_0(t_1)\hat{\rho}_{t_1}$ или $\hat{\rho}_{t_2} = \hat{\tau}(t_2, t_1)\hat{\rho}_{t_1}$, где $\hat{\tau}(t_2, t_1) = \tau_0(-t_2)\tau(t_2, t_1)\tau_0(t_1)$. Так же как τ и τ_0 , $\hat{\tau}$ удовлетворяет начальным условиям $\hat{\tau}(t, t) = I$ и для $t_3 \geq t_2 \geq t_1$ уравнению Чэпмена—Колмогорова $\hat{\tau}(t_3, t_2)\hat{\tau}(t_2, t_1) = \hat{\tau}(t_3, t_1)$. Это и есть оператор перехода для чисто дискретного марковского процесса [17].

Частота скачков определяется величиной сечений после трансляционного преобразования их аргументов:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \Sigma_{tot}(\mathbf{x} + \mathbf{v}t, \mathbf{v}, t), \quad \hat{\Sigma}_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \\ &= \Sigma_c(\mathbf{x} + \mathbf{v}t, \mathbf{v}, t), \quad \hat{\Sigma}_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{x}', \mathbf{v}', t) = \\ &= \Sigma_s(\mathbf{x}' + \mathbf{v}'t, \mathbf{v}, \mathbf{v}', t) \delta(\mathbf{x}' + (\mathbf{v}' - \mathbf{v})t - \mathbf{x}) \end{aligned}$$

и аналогично для сечения деления с испусканием двух и более нейтронов.

Подставив эти сечения и источники в оператор $L_{int} + L_0$ из § 8.4, увидим, что $\hat{\tau}$ удовлетворяет опережающему уравнению Колмогорова $\partial \hat{\tau}(t, t_0)/\partial t = \omega(\hat{L}_{int} + \hat{L}_0)\hat{\tau}(t, t_0)$. Было показано, что написанное уравнение определяет единственное решение $\hat{\tau}$, такое, что $\hat{\tau}(t, t) = I$. В этом случае функция $\tau(t, t_0) = e^{-t\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)} \hat{\tau}(t, t_0) e^{t_0\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)}$ должна быть достаточно гладкой и формальное дифференцирование будет оправданным:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tau(t, t_0) &= -\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x) \tau(t, t_0) + e^{-t\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)} \omega(\hat{L}_{int} + \hat{L}_0) \hat{\tau}(t, t_0) e^{t_0\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)} = \\ &= -\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x) \tau(t, t_0) + e^{-t\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)} \omega(\hat{L}_{int} + \hat{L}_0) e^{t\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)} \tau(t, t_0) = \\ &= -\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x) \tau(t, t_0) + \omega[e^{-t\mathbf{v} \cdot \nabla_x} (\hat{L}_{int} + \hat{L}_0) e^{t\mathbf{v} \cdot \nabla_x}] \tau(t, t_0) = \\ &= -\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x) \tau(t, t_0) + \omega(\hat{L}_{int} + \hat{L}_0) \tau(t, t_0). \end{aligned}$$

Таким образом, для получения опережающего уравнения для τ из аналогичного уравнения для $\hat{\tau}$ надо в последнем уравнении просто убрать значок $\hat{}$ над символами всех сечений и добавить к $\partial/\partial t$ член тока $\omega(\mathbf{v} \cdot \nabla_x)$, заменив дифференцирование по времени оператором Стокса.

В соответствии с нашим алгебраическим подходом к описанию мультипликативных процессов (см. § 8.5) необходимо теперь конкретизировать область определения оператора $\omega(\hat{L}_{int})$, так чтобы в любой фиксированный момент

времени он представлял собой инфинитезимальный порождающий оператор сохраняющей порядок полугруппы гомоморфизмов банаховой алгебры $\mathcal{L}(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m})$. Кроме того, этот оператор должен оставлять неизменной норму неотрицательных элементов.

Для нахождения $\hat{\tau}$ могут быть использованы методы интегрирования неоднородных по времени эволюционных уравнений в банаховых пространствах, развитые Иосидой [79] и другими математиками.

Однако применительно к нашей конкретной задаче теорем в готовом виде не существует. Их доказательство требует использования формализма чистого функционального анализа, что выходит за пределы намеченной для данной книги программы.

Вместо этого мы приведем теоретико-множественное доказательство существования $\hat{\tau}$, а следовательно, и τ (его можно найти и в литературе). Следуя методам, использованным Мойялом для получения запаздывающего уравнения [156], мы могли бы дать строгий вывод опережающего уравнения. Но нам бы пришлось идти окольным путем, прибегая к формализму теории меры. Поэтому мы вернемся к известной теореме Феллера [157], которая применима только к дискретным процессам. Но поскольку непрерывное движение между скачками, описываемое оператором τ , отражается также и оператором $\hat{\tau}$, теореме можно непосредственно использовать даже в том случае, когда имеется внешний источник нейтронов L_0 .

Итак, доказано существование марковского процесса с оператором перехода τ , удовлетворяющим необходимым уравнениям Колмогорова. Однако доказательство его единственности требует дополнительных ограничений на сечения. Феллеровская теорема единственности заранее предполагает, что процесс является «истинным» [158]. Но ведь сечение Σ_{tot} может оказаться очень быстро стремящимся к бесконечности. Тогда не исключена вероятность того, что система будет совершать бесконечное число скачков за конечный промежуток времени, что запрещено «инструкциями». Например, если поведение сечения подчиняется закону $1/v^2$ [159], при $v = 0$ должна разразиться «инфракрасная катастрофа». Однако в более реалистических моделях величина $v\Sigma_{tot}$ (а также $v\Sigma_f$) ограничена. В этом случае можно показать, что опережающее уравнение Колмогорова определяет единственный марковский процесс.

Оператор $\hat{\tau}$ в движущейся системе координат вводится для того, чтобы реализовать условия теоремы Феллера. Но его можно использовать также для связи не зависящего от времени процесса рассеяния нейтронных пучков с зависящим от времени рассеянием пульсирующих нейтронов. Можно показать, что в подкритической системе существует аналог $\tau(+\infty, -\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\tau}(t, -t)$ квантовомеханического оператора рассеяния [160], если величина $v\Sigma_{tot}$ ограничена и равна нулю вне некоторого компактного множества.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

B — линейный оператор, определяемый как

$$(BF)(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - v\Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F(\mathbf{x}, \mathbf{v}) + \int v' [\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t) + v\Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{v}', t)] F(\mathbf{x}, \mathbf{v}') dv'$$

$D(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ — коэффициент диффузии

$$d\mathbf{v} - d\mathbf{v} = dv_1 dv_2 dv_3$$

$$d\mathbf{x} - d\mathbf{x} = dx_1 dx_2 dx_3$$

$dX_{(\cdot)}$ — дифференциальное подмножество \mathcal{E}

$$dX - dX = dx_1 dx_2 \dots dx_m \text{ (} m \text{ любое)}$$

$d\Omega$ — элемент телесного угла такой, что $\int d\Omega = 4\pi$

E_n — вещественное n -мерное евклидово пространство
 E_6 — вещественное шестимерное евклидово пространство
 \mathcal{E} — множество $\{X_{(\cdot)}\}$ всех траекторий
 f, g — вещественнозначные функции, определенные на E_6 или

$$\text{на } \bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$$

$F(x, v, t)$ — плотность нейтронов в момент времени t

I — тождественный оператор

$\mathcal{L}(\mathcal{S})$ — пространство вещественнозначных функций, интегрируемых на \mathcal{S} по мере $d\xi$ (или пространство вещественнозначных вполне ограниченных измеримых функций, заданных на измеримом множестве \mathcal{E})

L_c } преобразования пространства $\mathcal{L}\left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}\right)$ (равные ну-
 L_s } лю на $\mathcal{L}(E_{6m})$, если $m \neq 1$), характеризующие скорость
 L_f } роста $\rho \in \mathcal{L}(E_6)$ вследствие захвата, рассеяния и деления
 соответственно

$L_{(+)}$ — оператор, характеризующий полную скорость роста $\rho \in \mathcal{L}(E_6)$ (без учета внешних источников)

$L_{(-)}$ — оператор на $\mathcal{L}(E_6)$, характеризующий полную скорость уменьшения ρ (без учета внешних источников)

$$L_{int} - L_{int} = L_{(-)} + L_{(+)}$$

$$L_1 - L_1 = -v \cdot \nabla_x + L_{int}$$

$L_0 = (\cdot)q$ — линейное преобразование пространства $\mathcal{L}\left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}\right)$ та-
 кое, что $L_0 \mathcal{L}(E_{6m}) = \{0\}$, если $m \neq 0$, а на $\mathcal{L}(E_0)$ оно
 соответствует умножению на q

$$L_{rem} - L_{rem} = L_{(-)} + L_0^{(-)}, \text{ где } L_0^{(-)} = L_0 \text{ с } q_i = 0 \text{ при } i \neq 0$$

$$L_{prod} - L_{prod} = L_{(+)} + L_0^{(+)}, \text{ где } L_0^{(+)} = L_0 \text{ с } q_0 = 0$$

$L_t - L_t = W(L_1 + L_0)$ — оператор, определяющий скорость изме-
 нения ρ_t

m — число нейтронов

M — проекция $\mathcal{L}\left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}\right)$ на $\mathcal{L}(E_6)$

N — $N=1$ в декартовых координатах, $N=2$ в цилиндрических
 координатах, $N=3$ в сферических координатах

P — мера вероятности на борелевских подмножествах выбороч-
 ного пространства \mathcal{E} для нейтронного газа

$P(dX_{(\cdot)})$ — дифференциальный элемент вероятности на \mathcal{E}

$p(S, t; X_{t_0}, t_0)$ — вероятность того, что величина $X_{(\cdot)}$ в момент времени t
 попадет в S при условии, что в момент времени t_0 она
 имела значение X_{t_0}

$Q(x, v, t)$ — плотность распределения внешних источников в момент
 времени t

$q - q = q_0 + q_1 + \dots \in \mathcal{L}\left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}\right)$ — внешние источники

q_0 — составляющая q из $\mathcal{L}(E_0)$

q_n — составляющая q из $\mathcal{L}(E_{6n})$

$s(r)$ — составляющая внешнего источника, зависящая только от r

S — подмножество множества $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{6m}$

\mathcal{S} — множество, состоящее из измеримых по Борелю подмно-
 жеств

t — время

U — подмножество из E_6

$U(t_2, t_1)$ — линейное преобразование $\mathcal{L}(\mathcal{S})$

u — летаргия

$v = (v_1, v_2, v_3)$ — скорость нейтрона

- $v = |\mathbf{v}| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2}$ — абсолютная величина скорости нейтрона
 \mathcal{W} — линейное преобразование в себя линейного пространства
 всех линейных преобразований $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$
- $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ — пространственная координата нейтрона
 X — точка $(x_1, v_1, \dots, x_n, v_n)$ (n — некоторое конечное число) в пространстве $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$
- $X_{(\cdot)}$ — функция переменной t , принимающая значения X_t из $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$
- Δ^- — запаздывающий дифференциальный оператор
 Δ^+ — опережающий дифференциальный оператор
- $[\Delta^+ A \Delta^-]$ — матричная аппроксимация оператора $\frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} r^{N-1} D \frac{d}{dr}$ с учетом условий в конечных точках
- δ — дельта-функция Дирака
 δ_U — функция, равная 1 на U и равная 0 вне U
 λ — обратный период
 ν — среднее число нейтронов, рождающихся в одном акте деления
- ρ — элемент из $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$
- $\rho^{(+)}$ — неотрицательная часть ρ
 $\rho^{(-)}$ — неположительная часть ρ
 $\rho^{(m)}$ — элемент из $\mathcal{L}(E_{\delta m})$
 ρ_{∞} — предел ρ_t (если он существует) при $t \rightarrow \infty$
- $\Sigma_c(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t)$ — макроскопическое сечение захвата
 $\Sigma_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t)$ — макроскопическое сечение деления
 $\Sigma_{f,m}(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t)$ — парциальное макроскопическое сечение деления, соответствующее испусканию ровно m нейтронов
 $\Sigma_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}'; \mathbf{v}, t)$ — макроскопическое сечение рассеяния
 $\Sigma_{tot}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ — полное макроскопическое сечение
- $\tau(t, t_0)$ — линейное преобразование пространства $\mathcal{L} \left(\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m} \right)$, ставящее ρ_{t_0} в соответствие ρ_t
- $\tau^{(1)}$ — дискретная аппроксимация τ
 Φ — поток нейтронов в диффузионном приближении
 ψ — элемент $\mathcal{L}(\mathcal{S})$
 Ψ — элемент из $\mathcal{L}(\mathcal{S})^*$
 $\Omega = \mathbf{\Omega} = \mathbf{v}/v$
 $\nabla_{\mathbf{x}} = \nabla_{\mathbf{x}} = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$
- $\bigcup_{m=0}^{\infty} E_{\delta m}$ — теоретико-множественное объединение множеств $E_{\delta m}$
- $\|\cdot\|$ — норма $\|\psi\| = \int_{\mathcal{S}} |\psi(\xi)| d\xi$
- $\langle \cdot \rangle$ — линейный функционал $\langle \psi \rangle = \int_{\mathcal{S}} \psi(\xi) d\xi$
- \wedge — символ, обозначающий аналог той или иной величины в движущейся системе координат, задаваемой τ_0

ЛИТЕРАТУРА

- Weinberg A., Wigner E. The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. The University of Chicago Press, Chicago, 1958, p. 221. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
- Thie J. A. Reactor Noise. Rowman and Littlefield, Inc., New York, 1963.
- Uhrig R. E. (ed.) Noise Analysis in Nuclear Systems. AEC Symposium Series No. 4 (U.S. Atomic Energy Commission/Division of Technical Information, 1964).

4. Moyal J. E. Multiplicative Population Processes. *J. Appl. Prod.*, **1**, 267 (1964).
5. Harris T. E. *The Theory of Branching Processes*. Springer-Verlag, Berlin, 1963.
6. Bharucha-Reid A. T. *Elements of the Theory of Markov Processes and Their Applications*. McGraw-Hill Book Co., New York, 1960, Chap. 5.
7. Beckenbach E. F. (ed.) *Modern Mathematics for the Engineer, Second Series*. McGraw-Hill Book Co., New York, 1961, Chap. 11.
8. Hawkins D., Ulam S. *Theory of Multiplicative Processes I*. USAEC Oak Ridge, MDDC 287, Ladc 265, Declassified, 1944.
9. Everett C. J., Ulam S. *Multiplicative Systems, I*. AECD—2164, «II», AECD—2165«III», AECD—2532, Technical Information Branch, Oak Ridge, Tenn., 1948.
10. Everett C. J., Ulam S. *Multiplicative Systems, I*. *Proc. Nat. Acad. Sci., U.S.A.*, **34**, 403 (1948).
11. Kolmogorov A. N., Sevast'yanov B. A. *Computation of Final Probabilities for Branching Stochastic Processes*, *Dokl. Akad. Nauk. S.S.S.R.*, **56**, 783 (1947). (См. на русском языке: Колмогоров А. Н., Севастьянов Б. А. «Докл. АН СССР», **56**, 783 (1947).)
12. von Neumann J. *Collected Works*. Macmillan Co., New York, 1963. Vol. 5, p. 751.
13. Doob J. L. *Stochastic Processes*. Wiley and Sons, New York, 1953.
14. Loève M. *Probability Theory*. Third Edition. D. Van Nostrand Co., Princeton, 1963.
15. Feller W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Vol. II*. John Wiley and Sons, New York, 1966. (См. на русском языке: Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. М., «Мир», 1967).
16. Sheff J. R., Albrecht R. W. *The Space Dependence of Reactor Noise, I—Theory*. *Nucl. Sci. Engng*, **24**, 246 (1966).
17. Moyal J. E. *Discontinuous Markov Processes*. *Acta Math.*, **98**, 221 (1957.)
18. Gibbs J. W. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. (Dover Publication, New York, 1960.)
19. Fock V. *Konfigurationsraum und zweite Quantelung*. *Zeits f. Phys.*, **75**, 622 (1932).
20. Cook J. M. *The Mathematics of Second Quantization*. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **74**, 222 (1953).
21. Moyal J. E. *The General Theory of Stochastic Population Processes*. *Acta Math.*, **108**, 1 (1962).
22. См. [13], гл. 1, § 6.
23. Halmos P. R. *Measure Theory*. Van Nostrand Co., New York, 1950.
24. См. [13], стр. 599.
25. Dynkin E. B. «Foundations of the Theory of Markov Processes» (Fizmatgiz, Moscow, 1959), Chap. IV, § 2, Theorem. 4.1. (См. на русском языке: Дынкин Е. Б. Основания теории марковских процессов. М., Физматгиз, 1959.)
26. См. [13], стр. 94.
27. Khinchin A. I. *The Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*. Dover Publications, New York, 1949, p. 113. (См. на русском языке: Хинчин А. Я. Математические основы статистической механики. М., Гостехиздат, 1943.)
28. См. [13], стр. 122.
29. См. [20], стр. 223.
30. Segal I. E. *Tensor Algebras over Hilbert Spaces*. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **81**, 106 (1956).
31. См. [27], гл. 5.
32. Blanc-Lapierre A., Fortet R. *Théorie des Fonctions Aléatoires*. Masson et Cie, Paris, 1953.
33. См. [13], гл. 2, § 6.
34. См. [23], гл. 6, § 28.
35. Riesz F., Sz.—Nagy B. *Functional Analysis*. Frederick Ungar Publishing Co., New York, 1955. (См. на русском языке: Рисс Ф., Секефальви-Надь Б. Лекции по функциональному анализу. М., Изд-во иностр. лит., 1954.)
36. См. [35], гл. 5, § 83.
37. См. [35], гл. 5, § 87.
38. Birkhoff G. *Lattice Theory* (revised edition), American, Mathematical Society, New York, 1948. Chap. XV.
39. Kelley J. L., Namioka I. *Linear Topological Spaces*. D. Van Nostrand Co., Princeton 1963, § 23, 24.
40. Vulikh B. Z. *Introduction to the Theory of Semi-Ordered Spaces*. Gostekizdat, Moscow, 1961. (См. на русском языке: Вулих Б. З. Введение в теорию полупорядоченных пространств. М., Гостехиздат, 1961.)
41. Krasnoselskii M. A. *Positive Solutions of Operator Equations*. P. Noordhoff, Ltd, Groningen, 1964. (См. на русском языке: Красносельский М. А. Положительные решения операторных уравнений. М., Физматгиз, 1962.)
42. Birkhoff G. *Lattices in Applied Mathematics*. *Proceedings of Symposia in Pure Mathematics*. Vol. II. American Mathematical Society, New York, 1961, p. 155.
43. Varga R. S. *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1962

44. Collatz L. Funktionalanalysis und Numerische Mathematik. Springer-Verlag, Berlin, 1964. (См. на русском языке: Коллатц Л. В. Функциональный анализ и вычислительная математика. М., «Мир», 1969.)
45. Collatz L. Application of the Theory of Monotonic Operators to Boundary Value Problems. Proc. Symposium on Boundary Problems in Differential Equations (ed. by R. E. Langer), University of Wisconsin Press, Madison, 1959, p. 35.
46. Канторович Л. В. Functional Analysis and Applied Mathematics. Uspehi Mat. Nauk (N.S.), 3, 89 (1948); translated by C. D. Benster, U.S. Department of Commerce, Nat. Bur. Stand., Los Angeles, Calif., NBS Rep. 1509, 1952. [См. на русском языке: Канторович Л. В. «Успехи матем. наук», 3, 89 (1948).]
47. Gantmacher F. R. The Theory of Matrices. Chelsea Publishing Co., New York, 1959; Interscience Publishers, Inc., New York, 1959, Chap. XIII, § 2. (См. на русском языке: Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., «Наука», 1966.)
48. Bellman R. Introduction to Matrix Analysis. McGraw-Hill Book Co., New York, 1960, Chap. XVI.
49. Krein M. G., Rutman M. A. Linear operators leaving invariant a cone in a Banach space. Uspehi Mat. Nauk, 3, 3 (1948); Amer. Math. Soc. Translation No. 26. [См. на русском языке: Крейн М. Г., Рутман М. А. «Успехи матем. наук», 3, 3 (1948).]
50. Birkhoff G. Extension of Jentzsch's Theorem. Trans. Amer. Math. Soc., 85, 219 (1957).
51. Weinberg A., Wigner E. «The Physical Theory of Neutron Chain Reactors. The University of Chicago Press, Chicago, 1958, p. 409. (См. на русском языке: Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.)
52. См. [38], стр. 264.
53. См. [35], гл. 2, § 36.
54. Дункин Е. В. Markov Processes. Academic Press, New York, 1965. (См. на русском языке: Дункин Е. В. Основания теории марковских процессов. М., Физматгиз, 1959.)
55. См. [38], стр. 254.
56. См. [39], стр. 238.
57. Gelfand I. M., Shilov G. E. Generalized Functions. Vol. I. Academic Press, New York, 1964. (См. на русском языке: Гельфанд И. М., Шиллов Г. Е. Обобщенные функции и действия над ними. Т. 1. М., Физматгиз, 1959.)
58. См. [51], стр. 555.
59. Chandrasekhar S. Stochastic Problems in Physics and Astronomy. Reviews of Modern Physics, 15, 1 (1943).
60. См. [13], стр. 275.
61. Feller W. An Introduction to Probability Theory and its Applications. John Wiley and Sons, New York, 1950, p. 389. (См. на русском языке: Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. М., «Мир», 1967.)
62. См. [39], стр. 152.
63. Hille E., Phillips R. S. Functional Analysis and Semi-groups. American Mathematical Society, Providence, 1957, Chap. IV. (См. на русском языке: Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. М., Изд-во иностр. лит., 1962.)
64. Chevalley C. Fundamental Concepts of Algebra. Academic Press, New York, 1956, p. 189.
65. Moyal J. E. Generalized Theory of Stochastic Population Processes. Acta Math., 108, 1 (1962).
66. См. [19], стр. 624.
67. Moyal J. E. Stochastic Processes and Statistical Physics. Journal of the Royal Statistical Society, Series B, Vol. XI, No. 2, 150 (1949).
68. См. [35], стр. 78, 110.
69. Yosida K. Functional Analysis. Academic Press, New York, 1965, p. 72. (См. на русском языке: Иосида К. Функциональный анализ. М., «Мир», 1967.)
70. См. [51], стр. 220.
71. Grad H. Principles of the Kinetic Theory of Gases. Encyclopedia of Physics (ed. by S. Flügge). Vol. XII, Thermodynamics of Gases. Springer-Verlag, Berlin, 1958, p. 208.
72. См. [23], стр. 121.
73. Bourbaki N. Algèbre. Herman and Cie, Paris, 1947.
74. См. [47], гл. 14, § 6.
75. Birkhoff G. On Product Integration. J. Math. Phys., 16, 104 (1937).
76. Masani P. R. Multiplicative Riemann Integration in Normed Rings. Trans. Amer. Math. Soc., 61, 147 (1947).
77. Coddington E. A., Levinson N. Theory of Ordinary Differential Equations. McGraw-Hill, New York, 1955, p. 75.
78. Courant R., Hilbert D. Methods of Mathematical Physics. Vol. II. Interscience Publ., New York, 1962, p. 204. (См. на русском языке: Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т. 2. М., Изд-во иностр. лит., 1951.)
79. См. [69], гл. 14.

80. См: [65], стр. 28.
81. Chevalley C. *Théorie des Groupes de Lie. Tome II.* Hermann et Cie, Paris, 1951.
82. См. [51], стр. 190.
83. См. [63], гл. 3, § 1.
84. См. [81], § 6, 8.
85. Knapp A. W. Connection between Brownian Motion and Potential Theory. *J. Math. Anal. Appl.*, 12, 328 (1965).
86. Ito K., McKean H. P., Jr. *Diffusion Processes and their Sample Paths.* Academic Press, New York, 1965.
87. См. [54], гл. 17.
88. Chung K. L. *Markov Chains.* Springer-Verlag, Berlin, 1960.
89. Donsker N. D., Kac M. A Sampling Method for Determining the Lowest Eigenvalue and the Principal Eigenfunction of Schrödinger's Equation. *J. Research NBS*, 44, 551 (1950).
90. Kac M., Cohen M. A Statistical Method for Determining the Lowest Eigenvalue of Schrödinger's Equation. *NBS Report 1553* (1952).
91. Fortet R. On the Estimation of an Eigenvalue by an Additive Functional of Stochastic Process, with Special Reference to the Kac—Donsker Method. *J. Research NBS*, 48, RP 2286 (1952).
92. Vladimirov V. S. Monte Carlo Methods as Applied to the Calculation of the Lowest Eigenvalue and Associated Eigenfunction of a Linear Integral Equation. *Theory of Probability and Its Applications*, 1, 101 (1956).
93. Spitzer F. *Principles of Random Walk.* D. Van Nostrand Co., New York, 1964.
94. Moyal J. E. Incomplete Discontinuous Markov Processes. *J. Appl. Prob.*, 2, 69 (1965).
95. Glasstone S., Eddlund M. The Elements of Nuclear Reactor Theory D. Van Nostrand Co., 1952, p. 104. (См. на русском языке: Глесттон С., Эдлунд М. Основы теории ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1954.)
96. См. [86], стр. 269.
97. См. [86], § 2, 7.
98. См. [13], стр. 240.
99. См. [48], гл. 14, § 12.
100. См. [13], стр. 83.
101. См. [63], гл. 23, § 4.
102. Kemeny J., Snell J., Knapp A. *Denumerable Markov Chains.* D. Van Nostrand Co., Princeton, 1966.
103. См. [38], стр. 246.
104. См. [39], стр. 239.
105. Lagrange J. L. (*Euvres*, Gauthier—Villars, Paris, 1867), Vol. I, p. 471.
106. См. [35], гл. 5, § 88.
107. См. [63], стр. 42.
108. Soodak H. *The Science and Engineering of Nuclear Power.* United Nations. New York, 1948.
109. См. [51], стр. 539.
110. Марчук Г. И., Орлов В. В. The Theory of Adjoint Functions. In «Soviet Progress in Neutron Physics» (ed. by P. A. Krupchitskii), 1961. Translated by Consultants Bureau, New York, 1963. (См. на русском языке: Марчук Г. И., Орлов В. В. К теории сопряженных функций. В сб. «Нейтронная физика», Под ред. П. А. Крупчицкого. М., Госатомиздат, 1961.)
111. См. [63], гл. 14.
112. Nelson E. The adjoint Markov process. *Duke Math. J.*, 25, 671 (1958).
113. См. [86], стр. 25.
114. См. [51], гл. 16.
115. Lewins J. Importance, The Adjoint Function. Pergamon Press, New York, 1965, Chap. V. (См. на русском языке: Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функция. М., Атомиздат, 1972).
116. Birkhoff G. Uniformly semi-primitive multiplicative processes. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 104, 37 (1962). *J. Math. Mech.*, 14, 507 (1965).
117. Friedman B. *Principles and Techniques of Applied Mathematics.* John Wiley and Sons. Inc., New York, 1956, p. 27.
118. Dunford N., Schwartz J. T. *Linear Operators. Vol. 1,* Interscience, New York, 1958. Chap. VII, § 6.11. (См. на русском языке: Данфорд Н., Шварц Дж. Т. Линейные операторы. Общая теория. М., Изд-во иностр. лит., 1962.)
119. См. [13], стр. 515.
120. См. [13], стр. 457.
121. Halmos P. R. *Lectures on Ergodic Theory.* The Mathematical Society of Japan, Токуо, 1965, p. 25.
122. См. [13], гл. 5, § 2.
123. См. [6], гл. 1.
124. См. [61], гл. 15.
125. См. [13], стр. 459.
126. См. [43], стр. 18.

127. Cm. [61], стр. 318.
128. Cm. [6], стр. 14.
129. Cm. [13], стр. 178.
130. Cm. [13], стр. 179.
131. Cm. [43], стр. 41.
132. Chung K. L. Markov Chains. Springer-Verlag, Berlin, 1960, Part I.
133. Cm. [43], стр. 30.
134. Cm. [121], стр. 81.
135. Jacobs K. Neuere Methoden und Ergebnisse der Ergodentheorie, Springer-Verlag, Berlin, 1960, Chap. IV, § 8.
136. Ito Y. Invariant Measures for Markov Processes. Trans. Amer. Math. Soc., 110, 152 (1964).
137. Ito Y. Finite Invariant Measures for Temporally Homogeneous Markov Processes. Proceedings of an International Symposium. Ergodic Theory. Academic Press, New York, 1963, p. 151.
138. Cm. [18], стр. 143.
139. Cm. [121], стр. 36.
140. Cm. [135], гл. 4, § 3.
141. Cm. [63], стр. 392.
142. Cm. [121], стр. 78.
143. Cm. [135], стр. 127.
144. Renyi A. Wahrscheinlichkeitsrechnung. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1962, p. 451.
145. Kullback S. Information Theory and Statistics. John Wiley and Sons, New York, 1959, p. 5.
146. Pinsker M. S. Information and Information Stability of Random Variable and Processes. Holden-Day, Inc., San Francisco, 1964, p. 20.
147. Jaynes E. T. Information Theory and Statistical Mechanics. In «Statistical Physics», 1962 Brandeis Lectures, Vol. 3, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1963.
148. Cm. [43], стр. 35.
149. Cm. [43], стр. 38.
150. Cm. [13], стр. 182.
151. Birkhoff G. Positivity and Criticality. In «Proceedings of Symposia in Applied Mathematics». Vol. XI. Nuclear Reactor Theory. American Mathematical Society, Providence, 1961.
152. Cm. [144], стр. 485.
153. Kendall D. G. Information theory and the limit-theorem for Markov chains and processes with a countable infinity of states. Ann. Inst. Statist. Math., 15, 137 (1963).
154. Goldstein H. Classical Mechanics Addison-Wesley Press, Inc., 1950.
155. Cm. [154], гл. 8, § 5.
156. Cm. [17], стр. 235.
157. Feller W. On the Integro-Differential Equations of Purely Discontinuous Markov Processes. Trans. Amer. Math. Soc., 48, 488 (1940).
158. Feller W. Erratum. Trans. Amer. Math. Soc., 58, 474 (1945).
159. Cm. [17], стр. 258.
160. Cook J. M. Banach Algebras and Asymptotic Mechanics. Cargese Summer School Lectures, 1965. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1966.

УКАЗАТЕЛЬ

- Абсолютная дисперсия 248
Аналоговой метод Монте-Карло 225
Антитетичная случайная величина 251
Аппроксимации конечно-разностной точность 21, 50, 53, 55, 59, 63, 64, 67
Асимптотическая скорость сходимости 72, 75, 82
Асимптотическое значение 265
- Базис 17
Баклинг 11, 33, 41, 54
Библиотека ядерных данных 39
Блуждания процесс 234
Больцмана уравнение 3
- Вариационный метод Монте-Карло 252
Вероятность избежать резонансного захвата 259
— поглощения 231
— рассеяния из группы j в группу i 257
— утечки 227, 228
Вес 242, 244, 246, 252, 255, 260
Весовая функция 251
Внешняя итерация 134
Внутренняя итерация 132
Возмущений теория 65
Выбор сетки 38, 65
Выборка 228, 236
— по важности 229, 232, 236, 240, 243
Выборочное пространство 333
— распределение 250
— среднее 229
- Гамма-закон 329
Геометрические преобразования 118
— проблемы в расчетах реактора 51, 59, 64
Гильбертово пространство 339
Граничное условие «белое» 136
— — Марка 162—164, 172, 176, 190, 202, 204
— — Маршака 115, 162—164, 176, 190, 202, 215
— — неявное 136
— — первого рода 352
— — отражения 176, 178, 201
Граничные условия 10, 25, 34, 55, 62
- Двоничная оценка 256
Двоничное распределение 258
Двойная граница 242
Двойное P_T -приближение 167—169, 172, 182, 191—194, 214
- Двойные P_T -уравнения 166, 168, 187, 194, 207
Двухмерная теория диффузии 50
Двухгрупповая задача 13, 14
— модель 12
Деления спектр 32
Деформация спектра источника 236
Деформированная функция распределения источников 236—238
Дисперсия 229, 232, 234, 235, 242, 243, 245—249, 258
— бесконечная 249
— нулевая 229, 231, 232, 252, 253, 258, 336
Диффузии длина 13
— коэффициент 9
Диффузионное приближение 129
Допплер-эффект 258, 260
- Задача Милна 164
Закон больших чисел 336
— Фика 9
Запаздывающие нейтроны 277, 278, 288, 303
- Интегрирующий множитель 348, 349
Инфинитезимальный порождающий оператор полугруппы 349, 351
История поколения нейтронов 229
История частицы 226, 227, 234
Источник нейтронов деления 110
— — рассеянных 110
Итерации внешние 19, 92
— внутренние 19, 37, 72, 74, 78, 93
— Гаусса — Зейделя 19
Итерационный метод Келлога 18
— — источника 17
- Квадратура Гаусса — Лежандра 119
Квадратурные коэффициенты 109, 116
Конечномерная цепь Маркова 356
Корректор 290
Коррекция потоков и источников 131
Коррелированные выборки 251, 260
Корреляция угловая 108
Коэффициент диффузии 9
— ослабления 233, 246
— — макроскопический 225
— проигрыша 39
— реактивности 299
— — мощностной 323
— — температурный 260
Критерий Куранта 328
— сходимости 131, 132

- Критичность мгновенная 297
— процедура поиска 29
- Линейные пространства 5
Линейный функционал 340, 353
— — оператор 338, 339
Локальные средние 105
- Макроскопическое сечение 246
Марковский процесс 338, 352
— — дискретный 334, 358
Математическое ожидание 228, 239, 244, 245, 334, 337
Матрица перехода 257, 356
Матриц свойства 56, 68—72, 90
Мера вероятности 335, 337
— — нормированная 346
Мертвое время 229
Метод AIRK 288—292, 295
— вариации произвольных постоянных 358
— верхней релаксации линейный 79, 80
— — — точечный 73, 79, 81
— возвратно-разностный 305—307
— дискретных ординат 158, 169, 170, 172, 179, 188, 190, 211, 124
— Ивона 158
— исключения (отбраковки) 225, 267, 269
— Канторовича 309, 310, 312, 313
— коллокации 292—295, 297, 306, 307
— Крэнка — Николсона 305—307
— Лагранжа 358
— Марчука 186, 189, 195
— Неймана — Рихтмайера 326
— Ньютона — Рафсона 281
— переменных направлений 80
— пересечений 264, 265
— Писемена-Рэчфорда 80, 81
— «предиктор-корректор» 290, 301
— прогонки 5, 27
— Рунге — Кутты 286, 287, 290, 291, 360
— сферических гармоник 158, 169, 175, 187
— Ти 85
— FLIP 180—182, 184, 185
— Чандрасекара 158, 170
— Чебышева 82, 83, 168
— Шмидта 187, 189, 196
— Штарка 183—189
Методы Монте-Карло 224
Многогрупповая модель 10, 15, 36
Многомерное распределение 269
Модифицированное ядро переноса 233
— — столкновений 233
Моменты нейтронного потока 113
- Нейтронный газ 3, 4
Неоднородные задачи теории диффузии 38
Несмещенная оценка 245
— траектория 232
Нормировочный коэффициент 230, 231
- Обратный период реактора 332
Одногрупповая модель 10
Одномерная теория диффузии 10
Округления ошибка 23
Оператор линейный самосопряженный 339
— — порождающий инфинитезимальный 358
— моментов 113
— неограниченный 341
— проектирования 5, 340
- Основная гармоника потока нейтронов 354
Относительная дисперсия 248
— вероятность реакции 226
Отрицательное «сечение» 123
Оценка длины трека 248
- Первый пролет 242
Перенос излучения 228
Перенормировка потока 133
Период реактора 291
Плотность вероятности 228
— распределения источников 230
— столкновений 227, 229, 239, 241, 246
Подпространство инвариантное 5
Поколение 228
Полиномы Лежандра 159, 165
— Чебышева 168
Популяция нейтронов 229
Поток нейтронов векторный 7
— — критический 18
— — скалярный 7
— — сопряженный 38, 65
Предиктор 290
Предшественники запаздывающих нейтронов 277, 278
Применение ЭВМ в решении задач диффузии 16, 39, 94
Пространство \mathcal{L} 340
— сопряженное 340
— частично упорядоченное линейное 339
Псевдовязкостное давление 332
- Равномерно распределенная случайная величина 266
Разложимый элемент 341
Разностная схема «алмаза» 125
Разностные схемы 124, 125
Распределение вероятности 266
— дискретное 266
Рассеяние на водороде 256
Расслоение 250
Расщепление 241, 242, 243
Ряд Неймана 261
- Свойство эргодичности 355
Сечение взаимодействия 226
— рассеяния на водороде дифференциальное 257
— реакции 226
Система взаимодействия программ 40
— программ-модулей 40
Скалярное произведение 257, 339
Скобки Пуассона 358
Скорость сходимости асимптотическая 72, 75, 82
Случайная величина 224, 234, 250, 266
Случайное событие 225
— число 250, 266
Случайные переменные 225
Смещение 246
Смещенный выбор 244
Собственная функция 11, 262
Собственное значение 229, 262
— — положительное 339
— распределение 253, 263
— число 11, 89, 98
Сопряженная функция 257
Сопряженное преобразование 353
— пространство 353
Спектральный радиус оператора 98
Средневзвешенная функция 336
Среднее арифметическое 228

- по ансамблю 336, 355
- — времени 336
- распределение Мойяла 346
- Стационарное распределение 229, 262, 265
- Стохастический процесс 334—338, 355, 356, 358
- Стратегия игры 230
- Сходимость итераций внешних 92
- — внутренних 38, 72, 74, 82
- Теория Бете — Тайта 332
- Тепловая трубка 324
- Точечная модель 301—303
- Точечный источник 225
- Траектория 335, 336
- Транспонированное ядро 231
- Трехмерные задачи диффузии 97
- Ударные волны 325
- Уравнение Больцмана 3, 127, 140, 149
- — интегральная форма 127, 140
- — сопряженное 149
- Гельмгольца 11
- движения 322
- диффузии 7
- Колмогорова опережающее 338, 358
- — эволюционное 340, 343
- Лиувилля 348
- — обобщенное 348
- неразрывности 324
- «первого столкновения» 348, 349
- «последнего столкновения» 348, 349
- переноса сопряженное 149
- реактора 11
- состояния 324
- сферических гармоник 5
- Фоккера—Планка 348
- Чэпмена — Колмогорова 346
- Эйлера — Лагранжа 308, 309
- Уравнения конечно-разностные одномерной диффузии 21, 25
- двухмерной диффузии 54, 61
- Условие Ренкина — Гюгонно 326
- Условия на границах сред 21, 34
- Установившийся режим 265
- Устойчивость 328
- Фазовое пространство 229, 230, 231, 232, 353
- — шестимерное 334
- Факторизации метод 20
- Физическая симметрия 117
- Функция плотности вероятности (ФПВ) 225, 226
- распределения 226, 237, 238
- — вероятности 252, 334
- ценности 230—236, 240—244, 252
- Ценность нейтрона 353
- — частицы 230
- Центральная предельная теорема 229, 351
- Эффективное ядро переноса 236
- Эффективный макроскопический коэффициент ослабления 240
- Экспоненциальное ядро 236
- Энергетическая группа 233
- Эргодичности свойство 355
- Эргодичность 355
- Ядро интегрального уравнения 143, 145, 146
- переноса 232
- — эффективное 236
- — столкновений 233, 244
- рассеяния 232

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ РЕАКТОРОВ

Редактор *В. А. Кузьмичева*

Переплет художника *А. С. Александрова*

Технический редактор *С. А. Бирюкова*

Корректор *Е. П. Пьянкова*

Сдано в набор 5/1 1972 г. Подписано к печати 4/VIII 1972 г.

Формат 70 × 108/16.

Бумага типографская № 2.

Усл. печ. л. 32,55. Уч.-изд. л. 33,84. Тираж 1 330 экз.

Зак. изд. 69028.

Зак. тип. 683. Цена 3 р. 73 к.

Атомиздат, 103031, Москва, К-31, ул. Жданова, 5/7

Московская типография № 4 Главполиграфпрома

Комитета по печати при Совете Министров СССР

Б. Переяславская, 46

ВНИМАНИЮ ЧИТАТЕЛЕЙ!

На складах и базах Союзкниги и Издательства имеется следующая литература:

ЯДЕРНАЯ ЭНЕРГЕТИКА

Исследование напряжений и прочности корпуса реактора. Сб. статей. Под ред. акад. УССР С. В. Серенсена и др. 1968, 280 стр., 1 р. 84 к.

Комаровский А. Н. Строительство ядерных установок. Изд. 3-е. 1969, 503 стр., 6 р. 27 к.

Поглощающие материалы регулирования ядерных реакторов. Перев. с англ. 1965, 450 стр., 2 р. 98 к.

Попов А. Ф. Эксплуатация приборов и регуляторов на АЭС. 1970, 190 стр., 51 коп.

Эллис Р. Ядерная техника для инженеров. Перев. с англ. 1961, 252 стр., 60 коп.

Заказы направляются по адресу: *Москва, Центр, ул. Петровка, 15, магазин № 8, отдел «Книга — почтой».*

АТОМИЗДАТ