

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 78 за 2007 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Е.П.Сычугова

Численные методы решения уравнения переноса в многогрупповом приближении в трехмерной геометрии в пакете «РЕАКТОР»

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International

CC I

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Сычугова Е. П. Численные методы решения уравнения переноса в многогрупповом приближении в трехмерной геометрии в пакете «PEAKTOP» // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2007. № 78. 22 с. <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2007-78</u>

Содержание

Введение		4
1.	Постановка задачи	5
2.	Р _т - приближение сечений перехода (рассеяния).	6
3.	S _n - приближение метода дискретных ординат.	8
4.	Конечно-разностные методы решения.	9
5.	Ускорение внутренних итераций.	10
6.	Ускорение внешних итераций для подкритических систем.	16
7.	Ускорение внешних итераций для задач на $K_{e\!f\!f}$.	17
8.	Результаты расчета реактора СВБР 75/100.	20
Заключение		22
Литература		23

Введение

Численное решение уравнения переноса в трехмерной геометрии находит все большее применение при решении реальных задач. Благодаря вычислительной технике, наряду современной с классическими прямоугольными сетками в Х-Ү-Z геометрии появилась возможность использовать криволинейные сетки в R-ф-Z геометрии и гексагональные сетки HEX-Z геометрии, которые максимально В согласованы С конфигурацией расчетной области.

В течение ряда лет в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН для нейтроннофизических расчетов ядерных реакторов использовалась «алмазная» схема метода Дискретных ординат с «нулевой» коррекцией, реализованная в пакете «РЕАКТОР» для R-Z геометрии [1,2,5], X-Y-Z геометрии [3,4] и НЕХ-Z геометрии [6]. Для ускорения сходимости внутренних итераций ранее использовался синтетический DSA – метод [7], а для ускорения внешних итераций – процесс экстраполяции, основанный на полиномах Чебышева, наименее уклоняющихся от нуля [8].

Когда возникла необходимость использования в едином комплексе программ результатов, полученных из нейтронно-физических расчетов были разработаны реактора для расчета его защиты, новые И программы. усовершенствованы старые алгоритмы И Для расчета радиационных полей в X-Y-Z и R- φ -Z геометрии была добавлена взвешенная схема [9] (WDIF) метода дискретных ординат. Для улучшения ускорения сходимости внутренних итераций реализован метод ребаланса [10,11], а для ускорения внешних итераций взят за основу δ^2 - процесс [12]. В настоящий момент в состав пакета входят следующие модули расчета активной зоны реактора и его защиты:

- **KIN1D** расчет во всех одномерных геометриях: плоской, цилиндрической, сферической;
- **KIN2D** расчет в двумерной R-Z геометрии;
- КІN3D расчет в трехмерных геометриях. В Х-Ү-Z и НЕХ-Z геометрии расчетная область представляет собой прямую призму с основанием в виде выпуклого многоугольника. В R-φ-Z геометрии расчетная область представляет собой прямой цилиндр или его часть. Предполагается, что по вертикальной оси Z сетка неравномерная. В НЕХ-Z геометрии в основании задается равномерная гексагональная сетка, а в X-Y-Z и R-φ-Z геометрии сетка может быть неравномерной.

Данная работа посвящена описанию этих численных методов для решения многогрупповой системы уравнений переноса нейтронов и γ -квантов S_n - методом дискретных ординат с P_m - приближением сечений перехода. Для простоты изложения эти методы описаны в трехмерной X-Y-Z геометрии. В заключение приводятся результаты реальных трехмерных расчетов K_{eff} и радиационных полей реактора СВБР 75/100 [13-15], полученные описываемыми методами.

1. Постановка задачи.

Уравнение переноса нейтронов в многогрупповом приближении в некоторой пространственной области *G* может быть записано в следующем виде:

$$\vec{\Omega}(\nabla \Psi^{g}(\vec{r},\vec{\Omega})) + \Sigma^{g}_{t}(\vec{r}) \cdot \Psi^{g}(\vec{r},\vec{\Omega}) = S^{g}(\vec{r},\vec{\Omega}).$$
(1.1)

Правая часть уравнения (1.1) для нейтронов группы g ($g = 1, 2, ..., N_n$) имеет следующий вид:

$$S_{n}^{g}(\vec{r},\vec{\Omega}) = \sum_{h=1}^{N_{n}} \int_{\Omega} P_{n}^{h \to g}(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}') \Psi^{h}(\vec{r},\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \chi_{p}^{g} \sum_{h=1}^{N_{n}} \nu \Sigma_{f}^{h} \overline{\Psi}^{h}(\vec{r}) + Q^{g}(\vec{r}), \qquad (1.2)$$

где

$$\overline{\Psi}^{g}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Psi^{g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}$$
(1.3)

Правая часть уравнения (1.1) для γ -квантов групп с номерами $g = N_n + 1, N_n + 2, ..., N_n + N_{\gamma} = NG$ имеет следующий вид:

$$S_{\gamma}^{g}(\vec{r},\vec{\Omega}) = \sum_{h=1}^{NG} \int_{\Omega} P_{n,\gamma}^{h \to g}(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}') \Psi^{h}(\vec{r},\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \sum_{h=N_{n}+1}^{NG} \int_{\Omega} P_{\gamma}^{h \to g}(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}') \Psi^{h}(\vec{r},\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}'.$$
(1.4)

На границе Г пространственной области G задаются нулевые значения углового потока для направлений внутрь этой области (\vec{n} - внешняя нормаль к границе области G):

$$\Psi^{g}(\vec{r},\vec{\Omega})\Big|_{\Gamma,\vec{\Omega}\cdot\vec{n}<0}=0.$$
(1.5)

В (1.1) - (1.5) использованы следующие обозначения:

- Ω единичная сфера;
- $\vec{\Omega}$ единичный вектор в направлении полета нейтронов $\vec{\Omega} = (\theta, \omega)$;
- θ полярный угол с осью Z,
- *ω* азимутальный угол с осью X;

NG - полное число энергетических групп;

 $\Psi^{g}(\vec{r},\vec{\Omega})$ - плотность потока в точке \vec{r} в направлении $\vec{\Omega}$ в группе g;

 $\overline{\Psi}^{g}(\vec{r})$ - скалярный поток нейтронов в точке \vec{r} в группе g;

 $\Sigma_t^g(\vec{r})$ - полное макроскопическое сечение;

 $P_n^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega}\vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение перехода нейтронов из группы *h* в группу *g*;

 $P_{\gamma}^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение перехода γ -квантов из группы *h* в группу *g*;

 $P_{n,\gamma}^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение образования γ -квантов в группе *g* при столкновении нейтрона из группы *h* с ядром;

 $\Sigma_{f}^{h}(\vec{r})$ - макроскопическое сечение деления;

v - число вторичных нейтронов, возникающих при одном акте деления; χ_p^g - спектр деления мгновенных нейтронов;

 $Q^{s}(\vec{r})$ - функция распределения внутренних источников.

Система уравнений (1.1) – (1.5) описывает стационарное распределение нейтронов и γ -квантов с учетом процесса деления, а также заданных внутренних источников. Если в правой части (1.2) член с делением отсутствует ($v\Sigma_f^g = 0$ для всех g), система уравнений (1.1) – (1.5) описывает стационарное распределение нейтронов и γ -квантов в зависимости от заданных источников. Задача на K_{eff} (однородная задача) описывается системой уравнений (1.1) - (1.3) с граничными условиями (1.5) для нейтронов $g = 1, 2, ..., N_n$ с нулевыми внутренними источниками $Q^g(\vec{r})$ и множителем $1/K_{eff}$ перед вторым слагаемым в правой части (1.2).

2. Р_т - приближение сечений перехода (рассеяния).

Предполагается, что макроскопическое сечение перехода $P^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ задается в виде ряда по полиномам Лежандра $P_{\nu}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$, где $\nu = 0,1,...,m$ (в $P_{\rm m}$ - приближении):

$$\mathbf{P}^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=0}^{m_{h,g}} (2\nu + 1) \Sigma_{\nu}^{h \to g}(\vec{r}) P_{\nu}(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'), \quad m_{h,g} \le m$$
(2.1)

с условиями нормировки:

$$\int_{\vec{\Omega}'} \mathbf{P}^{h \to g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' = \sum_{0}^{h \to g} (\vec{r}) \int_{-1}^{1} P_{\nu}(x) dx = \sum_{0}^{h \to g} (\vec{r});$$

$$\int_{-1}^{1} P_{\nu}(x) P_{n}(x) dx = \frac{2\delta_{\nu n}}{2\nu + 1}, \delta_{\nu, n} = \begin{cases} 0, \nu \neq n\\ 1, \nu = n \end{cases};$$

Для упрощения выражения (2.1) используется теорема сложения полиномов Лежандра:

$$P_{\nu}(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}') = P_{\nu}(\xi)\cdot P_{\nu}(\xi') + 2\sum_{u=1}^{\nu} \frac{(\nu-u)!}{(\nu+u)!} P_{\nu}^{u}(\xi) P_{\nu}^{u}(\xi') \cos[u(\omega-\omega')], \quad (2.2)$$

где $P_{v}^{u}(\xi)$ - присоединенные функции Лежандра первого рода с нормировкой:

$$\int_{-1}^{1} P_{\nu}^{u}(\xi) P_{n}^{u}(\xi) d\xi = \frac{2\delta_{\nu n}}{2\nu+1} \cdot \frac{(\nu+u)!}{(\nu-u)!}.$$

Предполагается, что искомая функция разлагается в ряд по присоединенным функциям Лежандра:

$$\Psi^{g}(\vec{r},\xi,\omega) = \sum_{\nu=0}^{m_{g}} \left[\overline{P}_{\nu}^{0}(\xi) \Phi^{(g)}_{1\nu}(\vec{r}) + \sum_{u=1}^{\nu} \overline{P}_{\nu}^{u}(\xi) \Phi^{(g)}_{1\nu}(\vec{r}) \cos u\omega + \sum_{u=1}^{\nu} \overline{P}_{\nu}^{u}(\xi) \Phi^{(g)}_{2\nu}(\vec{r}) \sin u\omega \right], (2.3)$$

где угловые моменты по косинусам $\Phi_{1_{\nu}}^{(h)}$ и синусам $\Phi_{2_{\nu}}^{(h)}$ решения уравнения переноса в группе *g*, определяются по формулам:

$$\Phi_{1_{\nu}}^{(g)}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^{1} \overline{P_{\nu}}^{u}(\xi') \int_{0}^{2\pi} \Psi^{g}(\vec{r},\xi',\omega') \cos u\omega' d\omega' d\xi',$$

$$\Phi_{2_{\nu}}^{(g)}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^{1} \overline{P_{\nu}}^{u}(\xi') \int_{0}^{2\pi} \Psi^{g}(\vec{r},\xi',\omega') \sin u\omega' d\omega' d\xi'.$$

$$(2.4)$$

С учетом (2.1) – (2.4) правая часть уравнения переноса (1.1) для групп нейтронов ($g = 1, 2, ..., N_n$) имеет следующий вид:

$$S_{n}^{g}(x, y, z, \xi, \omega) = \sum_{h=1}^{N_{n}} \sum_{\nu=0}^{m_{h,g}} (2\nu+1) \Sigma_{\nu}^{h \to g}(x, y, z) \left[\sum_{u=0}^{\nu} \overline{P}_{\nu}^{u}(\xi) \Phi l_{\nu}^{u}(x, y, z) \cos u\omega + \sum_{u=0}^{\nu} \overline{P}_{\nu}^{u}(\xi) \Phi l_{\nu}^{u}(x, y, z) \sin u\omega \right]$$

+ $\chi_{p}^{g} \sum_{h=1}^{N_{n}} \nu \Sigma_{f}^{h} \Phi l_{0}^{0}(x, y, z) + Q^{g}(x, y, z)$

3. S_n - приближение метода дискретных ординат.

В качестве угловой сетки в X-Y-Z и HEX-Z геометриях используется полностью симметричная S_n квадратура [16] для небольших значений $n \le 16$. Общее число направлений в расчете составляет: $M = 2^d n(n+2)/8$, где d - геометрическая размерность области расчета. В криволинейной R- φ -Z геометрии используется ES_n квадратура Карлсона с равными весами [17].

Точки угловой сетки $(\theta_m, \omega_{m,l})$ расположены на единичной сфере в центрах секторов одинаковой площади. На интервале $0 \le \xi \le 1$ задаются узлы $\xi_m = \cos \theta_m$, m = 1, ..., n/2. Для каждого ξ_m интервал изменения угла ω , $\omega \in [0, \pi]$ делится на подинтервалы $\omega_{m,l-1/2} \ge \omega \ge \omega_{m,l+1/2}$, $l = 1, ..., L_m$, где $L_m = n - 2m + 2$, $\omega_{m,1/2} = \pi$, $\omega_{m,L_m+1/2} = 0$. Полученное разбиение симметрично отображается на часть полусферы, соответствующей интервалу $\omega \in [\pi, 2\pi]$. Диаграмма расположения точек для угловой квадратуры S_8 на октанте $\xi \in [0,1]$, $\omega \in [\pi/2, \pi]$ представлена на Рис.1.

Полученное разбиение верхней части полусферы ($\xi > 0$) единичного радиуса симметрично отображается на нижнюю часть полусферы ($\xi < 0$). В результате поверхность сферы разбивается на сектора с одинаковыми площадями $w_0 = w_{m,l} = \Delta \xi_m \cdot \Delta \omega_{m,l}$, $\sum_{m,l} w_{m,l} = 4\pi$.



Рис. 1. Диаграмма расположения точек угловой квадратуры S_8 на октанте.

4. Конечно-разностные методы решения.

Система многогрупповых уравнений переноса (1.1) решается итерационным способом. При решении задач на K_{eff} используются как внешние итерации по источнику деления, так и внутренние итерации по источнику рассеяния в каждой группе. В качестве начального приближения для потоков используется численное решение, полученное в диффузионном приближении методом верхней релаксации. При решении задач защиты задается распределенный источник делений.

В пакете «РЕАКТОР» используются эффективные конечно-разностные схемы. Численные методы различаются набором дополнительных соотношений, замыкающих систему уравнений. Для решения задач на K_{eff} используется «алмазная» схема с обнулением отрицательных «выходящих» потоков и последующим пересчетом ячейки для сохранения баланса. Для решения задач защиты используется схема WDIF [9], которая хорошо зарекомендовала себя при расчетах по американской программе TORT [18]. Практические расчеты показали, что эта схема наиболее приспособлена для расчета радиационных полей, особенно в криволинейной геометрии. Хотя она не является положительной для отдельно взятого направления, но результирующие скалярные потоки получаются практически всюду положительными при оптимальном выборе параметра θ . Рассмотрим эту схему более подробно.

Введем в X-Y-Z геометрии пространственную сетку (x_i, y_j, z_k) , где целыми индексами i=1,...,I(j); j=1,...,J; k=1,...,K; обозначены центры интервалов. Полуцелые индексы соответствуют границам интервалов, а вся пространственная область *G* расположена внутри параллелепипеда с координатами: $x_{1/2} = 0$, $x_{I+1/2} = X$; $y_{1/2} = 0$, $y_{J+1/2} = Y$; $z_{1/2} = 0$, $z_{K+1/2} = Z$. Выберем фиксированное направление $\Omega_{m,l} = (\mu_{m,l}, \eta_{m,l}, \xi_m)$, которому соответствует угловой диапазон $w_{m,l} = \Delta \mu_{m,l} \Delta \eta_{m,l} \Delta \xi_m$. Интегрируя уравнение переноса (1.1) в пределах пространственной ячейки $[x_-, x_+] x[y_-, y_+] x[z_-, z_+]$ а также по угловому диапазону $w_{m,l}$ и сокращая затем на $w_{m,l}$, получим следующее уравнение баланса (индекс группы g опущен):

$$\mu_{m,l}A(\Psi_x^+ - \Psi_x^-) + \eta_{m,l}B(\Psi_y^+ - \Psi_y^-) + \xi_m C(\Psi_z^+ - \Psi_z^-) + \Sigma_t V \Psi = VS, \quad (4.1)$$

где коэффициенты *A*, *B*, *C* - площади боковых поверхностей ячейки, $V = \Delta x_i \Delta y_i \Delta z_k$ - объем ячейки. Дополнительные соотношения имеют вид:

$$\Psi_{\alpha}^{+} = W_{\alpha}(\Psi - \Psi_{\alpha}^{-}) + \Psi_{\alpha}^{-}, \qquad \alpha = x, y, z.$$

$$(4.2)$$

Подставляя соотношения (4.2) в (4.1), получим формулу для расчета плотности потока Ψ в ячейке. Существует проблема выбора параметров W_{α} , которые принадлежат отрезку [1, 2]. В схеме WDIF выбор весовых параметров осуществляется на основе решения вспомогательных задач. Например, для направления по оси X находится решение $\tilde{\Psi}$ следующей системы уравнений:

$$\mu_{m,l}A(\Psi_x^+ - \Psi_x^-) + \eta_{m,l}B(\Psi_y^+ - \Psi_y^-) + \xi_m C(\Psi_z^+ - \Psi_z^-) + \Sigma_t V \widetilde{\Psi} = VS;$$

$$\Psi_x^+ = 0; \qquad \Psi_y^+ = 2\widetilde{\Psi} + (1 - \theta)\Psi_y^-; \qquad \Psi_z^+ = 2\widetilde{\Psi} + (1 - \theta)\Psi_z^-.$$

Из этой системы видно, что выходящий поток в направлении X полагается равным нулю. В двух других направлениях выходящий поток определяется в зависимости от величины параметра $\theta \in [0, 1]$. Для определения значения весового параметра W_x полученное решение $\tilde{\Psi}$ подставляется в (4.2) при $\alpha = x$:

$$W_x = \frac{\Psi_x^- - \Psi_x^+}{\Psi_x^- - \widetilde{\Psi}} = \frac{\Psi_x^-}{\Psi_x^- - \widetilde{\Psi}}.$$

Окончательно берется следующее значение $W_x = \max[1., W_x]$.

Параметр θ подбирается эмпирически. Практика показала, что в большинстве случаев значение $\theta = 0.9$ дает хорошие результаты.

5. Ускорение внутренних итераций.

Для ускорения внутренних итераций в пакете «РЕАКТОР» первоначально использовался [2] диффузионный синтетический метод (DSA) [7]. В некоторых задачах использование этого линейного метода приводило к сокращению времени счета. К сожалению, существуют задачи, для решения которых использование DSA метода может привести к неустойчивому алгоритму. К таким задачам относятся задачи с оптически толстыми областями, а также с областями с высокой анизотропией рассеяния.

В настоящее время для ускорения внутренних итераций в пакете «PEAKTOP» реализован нелинейный метод ребаланса (восстановление баланса) [10]. Существенное различие между методами состоит в том, что в методе ребаланса поправки для скалярного потока и угловых потоков – мультипликативные, а в DSA - аддитивные. Поправки получаются из решения системы линейных уравнений диффузионного типа, у которых коэффициенты зависят от угловых потоков, полученных на каждой внутренней итерации. Для того, чтобы при решении системы уравнений для поправок не получалось отрицательное, либо расходящееся решение,

применяется алгоритм аддитивного увеличения ее коэффициентов. Численные расчеты показали, что такой метод ребаланса эффективнее DSA метода. Ниже приводится описание этого метода.

На первых итерациях эффективно используется метод *группового* ребаланса. Просуммируем уравнение переноса (4.1) по ячейкам пространственной области *G* и по всем направлениям $\Omega_{m,l}$, предварительно умножив на $w_{m,l}$. В результате получим равенство:

$$\overline{\overline{L}}_{g} + \overline{\overline{T}}_{g} = \overline{\overline{R}}_{g} + \overline{\overline{S}}_{g} .$$
(5.1)

Слагаемое $\overline{\overline{L}}_{g}$ представляет собой утечку через границы области G. Слагаемое $\overline{\overline{T}}_{g}$ это исчезновение частиц в результате всех взаимодействий внутри области. В правой части (5.1) внутригрупповое рассеяние $\overline{\overline{S}}_{g}$ отделено от остальных слагаемых $\overline{\overline{R}}_{g}$:

$$\overline{\overline{S}}_{g} = \sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sum_{m,l} w_{m,l} \sum_{m',l'} \Sigma_{m,l,m',l'}^{g \to g} \Psi_{m',l'}^{g} ,$$

$$\overline{\overline{R}}_{g} = \sum_{i,j,k} V_{i,j,k} [\chi_{p}^{g} \sum_{h=1}^{N_{n}} v \Sigma_{f}^{h} \overline{\Psi}^{h} + \sum_{m,l} w_{m,l} (Q_{m,l}^{g} + \sum_{g' \neq g m',l'} w_{m',l'} \Sigma_{m,l,m',l'}^{g' \to g} \Psi_{m',l'}^{g'})] .$$

Итерационный цикл решения (5.1) можно записать следующим образом:

$$\overline{\overline{L}}_{g}^{p-1/2} + \overline{\overline{T}}_{g}^{p-1/2} = \overline{\overline{R}}_{g} + \overline{\overline{S}}_{g}^{p-1},$$
(5.2)

где результат простой итерации обозначен номером p-1/2, как предварительный. Для того, чтобы сбалансировать потоки и источники, вводится множитель f_g , на который умножаются все потоки:

$$f_{g}\overline{\overline{L}}_{g}^{p-1/2} + f_{g}\overline{\overline{T}}_{g}^{p-1/2} = \overline{\overline{R}}_{g} + f_{g}\overline{\overline{S}}_{g}^{p-1/2}.$$
(5.3)

Исключая из (5.2) и (5.3) слагаемые $\overline{\overline{L}}_{g}^{p-1/2}$ и $\overline{\overline{T}}_{g}^{p-1/2}$, получим формулу для вычисления f_{g} :

$$f_{g} = \frac{\overline{R}_{g}}{\overline{\overline{R}}_{g} - (\overline{\overline{S}}_{g}^{p-1/2} - \overline{\overline{S}}_{g}^{p-1})}$$

Итерация *p* заканчивается перенормировкой потоков $\Psi_g^p = f_g \cdot \Psi_g^{p-1/2}$. Таким образом, множитель f_g служит показателем общей сходимости. Как только суммы $\overline{\overline{S}}_g^{p-1/2}$ и $\overline{\overline{S}}_g^{p-1}$ станут одинаковыми, f_g станет равным 1.

Метод группового ребаланса эффективен только на первых внутренних итерациях. На последующих итерациях ускорение сходимости осуществляется с помощью метода *пространственного* ребаланса. Опишем способ получения системы уравнений для мультипликативных поправок этого метода. Просуммируем уравнение переноса (4.1) для группы g по направлениям $\Omega_{m,l}$ с весом $W_{m,l}$. В результате получим уравнение в каждой внутренней ячейке (*i*, *j*, *k*) (далее этот индекс опущен там, где это возможно):

$$F_{i+1,i} - F_{i,i+1} + F_{i-1,i} - F_{i,i-1} + F_{j+1,j} - F_{j,j+1} + F_{j-1,j} - F_{j,j-1} + F_{k+1,k} - F_{k,k+1} + F_{k-1,k} - F_{k,k-1} + V(\Sigma^R + \overline{\Sigma}^s)\overline{\Psi} = V\overline{R} + V\overline{\Sigma}^s\overline{\Psi},$$
(5.4)

где в правой части слагаемое с внутригрупповым рассеянием отделено от других слагаемых:

$$\begin{split} \overline{\Sigma}^{s} \overline{\Psi} &= \sum_{m,l} w_{m,l} \sum_{m',l'} \Sigma_{m,l,m',l'}^{s \to g} \Psi_{m',l'}^{s} ,\\ \overline{R} &= \chi_{p}^{g} \sum_{h=1}^{N_{n}} v \Sigma_{f}^{h} \overline{\Psi}^{h} + \sum_{m,l} w_{m,l} (Q_{m,l}^{g} + \sum_{g' \neq g} \sum_{m',l'}^{s} w_{m',l'} \Sigma_{m,l,m',l'}^{g' \to g} \Psi_{m',l'}^{g'}) \end{split}$$

а в левой части введена сумма $\Sigma^{R} + \overline{\Sigma}^{s} = \Sigma_{t}$ и обозначены скалярные токи:

$$\begin{split} F_{i+1,i} &= A_{i+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i+1/2,j,k,m,l} \mu_{m,l} w_{m,l}; \ \mu_{m,l} > 0; \ \ F_{i,i+1} = A_{i+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i+1/2,j,k,m,l} \mu_{m,l} w_{m,l}; \ \mu_{m,l} < 0; \\ F_{j+1,j} &= B_{j+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i,j+1/2,k,m,l} \eta_{m,l} w_{m,l}; \ \eta_{m,l} > 0; \ \ F_{j,j+1} = B_{j+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i,j+1/2,k,m,l} \eta_{m,l} w_{m,l}; \ \eta_{m,l} < 0; \\ F_{k+1,k} &= C_{k+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i,j,k+1/2,m,l} \xi_m w_{m,l}; \ \xi_m > 0; \quad F_{k,k+1} = C_{k+1/2} \sum_{m,l} \Psi_{i,j,k+1/2,m,l} \xi_m w_{m,l}; \ \xi_m < 0; \end{split}$$

Итерационный цикл решения (5.4) можно записать следующим образом:

$$(F_{i+1,i}^{p-1/2} + F_{i-1,i}^{p-1/2}) - (F_{i,i+1}^{p-1/2} + F_{i,i-1}^{p-1/2}) + (F_{j+1,j}^{p-1/2} + F_{j-1,j}^{p-1/2}) - (F_{j,j+1}^{p-1/2} + F_{j,j-1}^{p-1/2}) + (F_{k+1,k}^{p-1/2} + F_{k-1,k}^{p-1/2}) - (F_{k,k+1}^{p-1/2} + F_{k,k-1}^{p-1/2}) + V(\Sigma^{R} + \overline{\Sigma}^{s})\overline{\Psi}^{p-1/2} = V\overline{R} + V\overline{\Sigma}^{s}\overline{\Psi}^{p-1},$$
(5.5)

где поток $\overline{\Psi}$ и токи *F* в левой части обозначены номером p-1/2, как результат простой итерации. Будем искать решение на итерации *p* в виде:

$$\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p} = f_{i,j,k}^{p} \cdot \overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1/2}, \qquad (5.6)$$

где $f_{i,j,k}^{p}$ - поправка, удовлетворяющая следующим условиям:

$$F_{i+1,i,j,k}^{p} = F_{i+1,i,j,k}^{p-1/2} \cdot f_{i,j,k}^{p}, \quad F_{j,j+1,j,k}^{p} = F_{i,j+1,j,k}^{p-1/2} \cdot f_{i,j,k}^{p}, \quad F_{i,j,k+1,k}^{p} = F_{i,j,k+1,k}^{p-1/2} \cdot f_{i,j,k}^{p}.$$
(5.7)

Другими словами, потребуем, чтобы на конец итерации с номером *р* частичные токи, выходящие из ячейки, в которой они образуются, были пропорциональны скалярным потокам этой ячейки, и для них было справедливо уравнение баланса (5.4) на итерации *р*:

$$F_{i+1,i}^{p} - F_{i,i+1}^{p} + F_{i-1,i}^{p} - F_{i,i-1}^{p} + F_{j+1,j}^{p} - F_{j,j+1}^{p} + F_{j-1,j}^{p} - F_{j,j-1}^{p} + F_{k+1,k}^{p} - F_{k,k+1}^{p} + F_{k-1,k}^{p} - F_{k,k-1}^{p} + V(\Sigma^{R} + \overline{\Sigma}^{s})\overline{\Psi}^{p} = V\overline{R} + V\overline{\Sigma}^{s}\overline{\Psi}^{p},$$
(5.8)

Подставим токи (5.7) в уравнение (5.8) и сократим член с рассеянием:

$$F_{i+1,i,j,k}^{p-1/2} \cdot f_{i,j,k}^{p} - F_{i,i+1}^{p-1/2} f_{i+1,j,k}^{p} + F_{i-1,i,j,k}^{p-1/2} \cdot f_{i,j,k}^{p} - F_{i,i-1}^{p-1/2} f_{i-1,j,k}^{p} + F_{j+1,j,k}^{p-1/2} f_{i,j+1,k}^{p} + F_{j-1,j}^{p-1/2} f_{i,j,k}^{p} - F_{j,j-1}^{p-1/2} f_{i,j-1,k}^{p} + F_{k+1,k}^{p-1/2} f_{i,j,k}^{p} - F_{k,k+1}^{p-1/2} f_{i,j,k+1}^{p} + F_{k-1,k}^{p-1/2} f_{i,j,k}^{p} - F_{k,k-1}^{p-1/2} f_{i,j,k-1}^{p} + V\Sigma^{R} \overline{\Psi}^{p} = V\overline{R}$$
(5.9)

Разделим обе части уравнения (5.9) на $f_{i,j,k}^{p}$, выразим член $V\Sigma^{R}\overline{\Psi}^{p-1/2}$ из уравнения (5.9) и подставим полученное выражение для $V\Sigma^{R}\overline{\Psi}^{p-1/2}$ в (5.5). После сокращений получим следующую систему линейных уравнений относительно поправок $f_{i,j,k}^{p}$ во внутренних точках пространственной области *G*:

$$-(F_{i,i+1}^{p-1/2}f_{i+1}^{p}+F_{i,i-1}^{p-1/2}f_{i-1}^{p})-(F_{j,j+1}^{p-1/2}f_{j+1}^{p}+F_{j,j-1}^{p-1/2}f_{j-1}^{p})-(F_{k,k+1}^{p-1/2}f_{k+1}^{p}+F_{k,k-1}^{p-1/2}f_{k-1}^{p})+\\[F_{i,i+1}^{p-1/2}+F_{i,i-1}^{p-1/2}+F_{j,j+1}^{p-1/2}+F_{k,k+1}^{p-1/2}+F_{k,k-1}^{p-1/2}+V\overline{R}-V\overline{\Sigma}^{s}(\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1/2}-\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1})]f_{i,j,k}^{p}=V\overline{R}^{.(5.10)}$$

Разностные уравнения (5.10) имеют вид уравнений диффузии. Точным решением (5.10) является единичная поправка $f_{i,j,k}^{p} \equiv 1$, если на этапе простой итерации в каждой внутренней точке потоки до и после итерации совпадают $\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1/2} = \overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1}$. Наоборот, разница в решении приводит к ее перераспределению по пространству с помощью поправок, полученных из

решения уравнения ребаланса (5.10), и последующей коррекции потока (5.6). Одновременно необходимо произвести корректировку всех угловых моментов потоков путем их умножения на поправки $f_{i,j,k}^{p}$, что позволяет сохранять первоначальное угловое распределение. Таким образом, решение системы (5.10) служит для ускорения сходимости простых итераций.

Граничные условия для (5.10) относительно поправки $f_{i,j,k}^{p}$ необходимо согласовать с граничными условиями, заданными для уравнения переноса (4.1). Если на внутренней границе заданы условия отражения, то входящий поток равен выходящему. В уравнении (5.10), записанном для ячейки с номером (1, *j*,*k*), полагаем $f_{0,j,k}^{p} = f_{1,j,k}^{p}$. Если на внешней границе заданы нулевые значения входящего потока, то в уравнении (5.10) соответствующий ток равен нулю. Например, для направления по оси X полагаем входящий ток нулевым $F_{I,I+1}^{p-1/2} = 0$ и в уравнении (5.10) соответствующий член с поправкой $f_{I+1,j,k}^{p}$ исчезает. Если на внешней границе заданы условия отражения, то, например, для направления по оси X в уравнении (5.10) полагаем член с входящим током извне $F_{I,I+1}^{p-1/2} f_{I+1,j,k}^{p}$ равным члену с выходящим током изнутри с предыдущей итерации $F_{I+1,I}^{p-1} f_{I,j,k}^{p}$. В результате замены получаем в левой части член с вкладом, аналогичным вкладу от рассеяния:

$$(F_{I,I+1}^{p-1/2} - F_{I+1,I}^{p-1})f_{I,j,k}^{p}$$
.

Как уже отмечалось выше, при решении уравнения (5.10) может быть получено отрицательное, либо расходящееся решение $f_{i,j,k}^{p}$, если значения сечения рассеяния $\overline{\Sigma}^{s}$ велики. В этом случае полученный результат решения не используется, а производится подготовка к более устойчивому решению новой системы уравнений для поправок на следующей внутренней итерации.

Как известно, необходимым и достаточным условием сходимости итерационного метода является условие, при котором норма матрицы перехода меньше 1. Для того, чтобы это условие было выполнено, необходимо увеличить коэффициенты (скалярные токи) уравнения (5.10). Тогда норма матрицы перехода уменьшится и неустойчивость исчезнет.

Коэффициенты уравнения увеличиваются следующим образом. После вычисления скалярных токов каждый из них увеличивается на фиктивный ток:

$$\begin{split} \widetilde{F}_{i,i+1}^{p-1/2} &= F_{i,i+1}^{p-1/2} + F_{i+1/2}^{p} & \widetilde{F}_{j,j+1}^{p-1/2} = F_{j,j+1}^{p-1/2} + F_{j+1/2}^{p} & \widetilde{F}_{k,k+1}^{p-1/2} = F_{k,k+1}^{p-1/2} + F_{k+1/2}^{p} \\ \widetilde{F}_{i+1,i}^{p-1/2} &= F_{i+1,i}^{p-1/2} + F_{i+1/2}^{p} & \widetilde{F}_{j+1,j}^{p-1/2} = F_{j+1,j}^{p-1/2} + F_{j+1/2}^{p} & \widetilde{F}_{k+1,k}^{p-1/2} = F_{k+1,k}^{p-1/2} + F_{k+1/2}^{p} \end{split}$$

Увеличенный ток помечен волной, а фиктивные токи вычисляются по следующим формулам с общим параметром *c_F*:

$$F_{i+1/2}^{p} = c_{F} \cdot \min(F_{i+1,i}^{p-1/2}, F_{i,i+1}^{p-1/2}), \quad F_{j+1/2}^{p} = c_{F} \cdot \min(F_{j+1,j}^{p-1/2}, F_{j,j+1}^{p-1/2}), \quad F_{k+1/2}^{p} = c_{F} \cdot \min(F_{k+1,k}^{p-1/2}, F_{k,k+1}^{p-1/2}).$$

С учетом этих изменений уравнение ребаланса (5.10) примет следующий вид:

$$-(\widetilde{F}_{i,i+1}^{p-1/2}f_{i+1}^{p}+\widetilde{F}_{i,i-1}^{p-1/2}f_{i-1}^{p})-(\widetilde{F}_{j,j+1}^{p-1/2}f_{j+1}^{p}+\widetilde{F}_{j,j-1}^{p-1/2}f_{j-1}^{p})-(\widetilde{F}_{k,k+1}^{p-1/2}f_{k+1}^{p}+\widetilde{F}_{k,k-1}^{p-1/2}f_{k-1}^{p})+ [\widetilde{F}_{i,i+1}^{p-1/2}+\widetilde{F}_{j,j+1}^{p-1/2}+\widetilde{F}_{k,k+1}^{p-1/2}+\widetilde{F}_{k,k-1}^{p-1/2}+V\overline{R}-V\overline{\Sigma}^{s}(\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1/2}-\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1})]f_{i,j,k}^{p}=V\overline{R}.$$
(5.11)

Система уравнений (5.11) решается итерационным методом верхней релаксации с автоматическим выбором параметра релаксации *а* в каждой группе:

$$f_{i,j,k}^{s} = \alpha \cdot \tilde{f}_{i,j,k}^{s} + (1-\alpha)f_{i,j,k}^{s-1}$$

где

$$\widetilde{f}_{i,j,k}^{s} = \frac{V\overline{R} + (\widetilde{F}_{i,i+1}^{p-1/2}f_{i+1}^{p} + \widetilde{F}_{i,i-1}^{p-1/2}f_{i-1}^{p}) + (\widetilde{F}_{j,j+1}^{p-1/2}f_{j+1}^{p} + \widetilde{F}_{j,j-1}^{p-1/2}f_{j-1}^{p}) + (\widetilde{F}_{k,k+1}^{p-1/2}f_{k+1}^{p} + \widetilde{F}_{k,k-1}^{p-1/2}f_{k-1}^{p})}{V\overline{R} - V\overline{\Sigma}^{s}(\overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1/2} - \overline{\Psi}_{i,j,k}^{p-1}) + \widetilde{F}_{i,i+1}^{p-1/2} + \widetilde{F}_{i,i-1}^{p-1/2} + \widetilde{F}_{j,j+1}^{p-1/2} + \widetilde{F}_{j,j-1}^{p-1/2} + \widetilde{F}_{k,k+1}^{p-1/2} + \widetilde{F}_{k,k-1}^{p-1/2}}.$$

На первой внутренней итерации используется стандартное для трехмерной геометрии значение параметра $c_F = 1.5$. Затем это значение может быть увеличено, в зависимости от поведения относительной ошибки простой итерации δ^p в той точке (i_0, j_0, k_0) , где достигается $\max_{i,j,k} \left| \delta_{i,j,k}^p \right|$, и от поведения двух относительных ошибок Δ^p после применения метода ребаланса на двух соседних итерациях p и p-1. При этом:

$$\delta^{p} = \frac{\overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p-1/2} - \overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p-1}}{\overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p-1/2}}; \qquad \Delta^{p} = \frac{\overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p} - \overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p-1/2}}{\overline{\Psi}_{i_{0},j_{0},k_{0}}^{p-1/2}}.$$

Ускорение не используется и значение параметра c_F увеличивается на c_F , если выполняется хотя бы одно из трех условий:

а) $\delta^{p} \cdot \Delta^{p} < 0$, т.е. метод ребаланса и простая итерация действуют в противоположных направлениях;

- б) $\Delta^{p} \cdot \Delta^{p-1} < 0$, т.е. метод ребаланса дает поправки с разными знаками;
- в) $|\Delta^p| > |\Delta^{p-1}|$, т.е. метод ребаланса расходится, т.к. ошибка растет.

Несмотря на некоторую степень свободы в выборе значения параметра c_F , этот метод является надежным средством для решения задач глубокого

проникновения, особенно при высоких энергиях и высокой анизотропии рассеяния. В худшем случае решение сходится со скоростью не меньшей, чем без ускорения. Если значение параметра c_F становится слишком большим, то ускорения не происходит. Численные расчеты показали, что метод ребаланса эффективнее по времени счета DSA метода.

6. Ускорение внешних итераций для подкритических систем.

Для расчета подкритических режимов деления для ускорения внешних итераций используется метод *глобального* ребаланса. Суммируя уравнение переноса (4.1) по энергетическим группам, по ячейкам пространственной области G и по направлениям $\Omega_{m,l}$ с весом $W_{m,l}$, получим равенство:

$$L+T=D+Q. (6.1)$$

В (6.1) входят следующие слагаемые: L представляет собой утечку через границы области G, T - исчезновение частиц в результате взаимодействий внутри области, Q - результат суммирования распределенного внутреннего источника, D - результат суммирования источника деления:

$$Q = \sum_{g=1}^{N_n} \sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sum_{m,l} w_{m,l} Q_{m,l}^{g} , \qquad D = \sum_{h=1}^{N_n} \sum_{i,j,k} \chi_p^h \cdot v \Sigma_f^h \cdot \overline{\Psi}_{i,j,k}^h V_{i,j,k}$$

Итерационный цикл решения (6.1) можно написать следующим образом:

$$L^{q-1/2} + T^{q-1/2} = D^{q-1} + Q^q, (6.2)$$

где результат простой итерации обозначен номером q-1/2, как предварительный. Для того, чтобы сбалансировать потоки и источники, вводится множитель f_s , на который умножаются все потоки:

$$f_s(L^{q-1/2} + T^{q-1/2}) = f_s D^{q-1/2} + Q^q.$$
(6.3)

Исключая из (6.2) и (6.3) сумму $L^{q-1/2} + T^{q-1/2}$, получим формулу для вычисления множителя f_s :

$$f_s = \frac{Q^q}{Q^q - (D^{q-1/2} - D^{q-1})}.$$

Итерация q заканчивается перенормировкой потоков $\Psi_s^q = f_s \cdot \Psi_s^{q-1/2}$. Этот метод эффективен, если источник Q распределен по всей области расчета.

7. Ускорение внешних итераций для задач на K_{eff}.

В пакете «РЕАКТОР» для ускорения внешних итераций до недавнего времени использовался метод полиномов Чебышева. Для использования этого метода ускорения надо предварительно оценить отношение двух наибольших собственных чисел матрицы перехода A, что является затруднительным. С другой стороны, этот алгоритм слишком чувствителен к вычислительной погрешности [12]. В настоящее время используется эффективный алгоритм ускорения внешних итераций в задачах на K_{eff} , основанный на δ^2 - процессе [12]. Этот метод ускорения можно использовать при решении задач на K_{eff} для решения, как систем уравнений переноса, так и диффузионных систем.

Система уравнений переноса (1.1) (или уравнений диффузии) для расчета *К*_{eff} может быть записана в операторном виде:

$$(\mathbf{L} - \mathbf{P})\Psi = \frac{1}{K_{eff}} \cdot \chi \cdot \mathbf{B} \cdot \overline{\Psi} (\mathbf{W} - \Sigma_{tr})\Phi = \frac{1}{K_{eff}} \cdot \chi \cdot \mathbf{B} \cdot \Phi),$$

где L - оператор переноса (или W - оператор диффузии), Р или Σ_{tr} - оператор перехода, χ - спектральный оператор, В - оператор деления, $\overline{\Psi}$ или Φ - плотность потока частиц. Преобразуем эту систему к виду:

$$\mathbf{A}^{-1}\cdot D=\frac{1}{K_{eff}}D,$$

где $\mathbf{A}^{-1} \cdot D = (\mathbf{L} - \mathbf{P}) \Psi$ и $D = \chi \cdot \mathbf{B} \cdot \overline{\Psi}$ (или $\mathbf{A}^{-1} \cdot D = (\mathbf{W} - \Sigma_{tr}) \Phi$ и $D = \chi \cdot \mathbf{B} \cdot \Phi$). В конечномерном пространстве A - матрица, D - вектор, компонентами которого являются значения плотности источника деления в каждой пространственной точке $D_{i,j,k} = \sum_{i=1}^{N_n} v \Sigma_f^h \overline{\Psi}_{i,j,k}^h$.

Рассмотрим степенной метод [20] вычисления $K_{eff} \approx K^q$ и плотности источника деления $D \approx D^q$:

$$D^{q} = \frac{1}{K^{q-1}} \mathbf{A} \cdot D^{q-1}, \quad q = 1, 2, ...; \quad K^{0} = 1; \quad K^{q} = K^{q-1} \frac{\left\| D^{q} \right\|}{\left\| D^{q-1} \right\|}.$$

Установлено, что многогрупповая система диффузионных уравнений [21] и система уравнений переноса [22] всегда имеют положительное решение и такое решение единственно. Для любого произвольного положительного начального приближения D^0 этот метод сходится [23]. Будем считать, что система собственных функций φ_l , l = 0,1,...,L матрицы А полна, а все ее собственные числа λ_l положительны и $0 \le \lambda_L \le ... \le \lambda_1 < \lambda_0 = K_{eff}$. В конечномерном пространстве число собственных значений λ_l и собственных функций φ_l матрицы перехода А совпадает с числом пространственных точек. Представим ошибку начального приближения в точке (i, j, k) в виде ряда по собственным функциям матрицы А :

$$\varepsilon_{i,j,k}^{0} = D_{i,j,k}^{0} - D_{i,j,k}^{\infty} = \sum_{l=0}^{L} a_{l} \varphi_{li,j,k} - a_{0} \varphi_{0i,j,k}$$

В каждой пространственной точке все собственные функции вносят вклад в ошибку. Величина этого вклада зависит от номера итерации, от ошибки начального приближения и от матрицы перехода. Запишем выражение для ошибки, накопленной за *q* итераций:

$$\varepsilon_{i,j,k}^{q} = D_{i,j,k}^{q} - D_{i,j,k}^{\infty} = \frac{1}{\underbrace{K^{q-1} \cdot K^{q-2} \cdot \ldots \cdot K^{1}}_{K^{q}}} \sum_{l=0}^{L} a_{l} (\lambda_{l})^{q} \varphi_{li,j,k} - a_{0} \varphi_{0i,j,k} .$$
(7.1)

Так как все члены ряда (7.1) за исключением первого члена стремятся к нулю $\frac{(\lambda_l)^q}{K^q} \to 0$ при $q \to \infty$, $l \neq 0$, то с увеличением числа итераций постепенно ошибка $\mathcal{E}_{i,j,k}^q$ уменьшается. Члены с наименьшими собственными значениями исчезают быстрее.

Часто на практике возникают случаи, когда в процессе итераций с ростом q приближение K^q к собственному значению практически не меняется, а в источнике еще велика относительная ошибка:

$$\varepsilon_{rel}^{q} = (K_{\max}^{q} - K_{\min}^{q}) / K^{q}, \ K_{\max}^{q} = K^{q-1} \max_{i,j,k} \frac{D_{i,j,k}^{q}}{D_{i,j,k}^{q-1}}, \ K_{\min}^{q} = K^{q-1} \min_{i,j,k} \frac{D_{i,j,k}^{q}}{D_{i,j,k}^{q-1}}$$

Это означает, что расчет вышел на псевдо-асимптотический режим, т.е. близкие по величине собственные значения матрицы А получаются в качестве решения $K^q \neq K_{eff}$. В таком случае возникает необходимость в ускорении, чтобы сдвинуть итерационный процесс с мертвой точки. Если предположить, что сходимость достигнута, то на асимптотике будут справедливы два выражения для доминантного соотношения $\Lambda = \lambda_1 / \lambda_0$:

$$\frac{D_{i,j,k}^{\infty} - D_{i,j,k}^{q}}{D_{i,j,k}^{\infty} - D_{i,j,k}^{q-1}} = \Lambda^{q} _{\mathsf{H}} \frac{D_{i,j,k}^{q} - D_{i,j,k}^{q-1}}{D_{i,j,k}^{q-1} - D_{i,j,k}^{q-2}} = \Lambda^{q}, \text{ где } \Lambda^{q} \approx \lambda_{1} / K^{q-1}$$

Из этих соотношений следует формула:

$$D_{i,j,k}^{\infty} = D_{i,j,k}^{q} + \kappa^{q} (D_{i,j,k}^{q} - D_{i,j,k}^{q-1}), \qquad (7.2)$$

где символом κ^q обозначено значение параметра экстраполяции:

$$\kappa^q = \frac{\Lambda^q}{1 - \Lambda^q} \tag{7.3}$$

Алгоритм ускорения внешних итераций основан на линейной экстраполяции источника деления в каждой точке пространства по формулам (7.2) и (7.3). Одновременно экстраполируются скалярные потоки по такой же формуле. Для вычисления доминантного соотношения Λ^q более удобно использовать глобальную величину ошибки E^q :

$$\Lambda^{q} = \frac{E^{q}}{E^{q-1}}, \qquad E^{q} = \sum_{i,j,k} \left| D_{i,j,k}^{q} - D_{i,j,k}^{q-1} \right|.$$

Так как экстраполяция источника вводит дополнительное возмущение, необходимо продолжить процесс внешних итераций. Такой выход на псевдоасимптотический режим может повторяться несколько раз, пока относительная ошибка расчета K_{eff} ни достигнет заданной малой величины, а значение K_{min}^{q} практически ни совпадет со значениями K_{eff} и K_{max}^{q} .

Экспериментальным путем подтверждено, что этот алгоритм ускорения внешних итераций является эффективным. Например, при решении реальной задачи для системы многогрупповых диффузионных уравнений расчет ускорился в несколько раз. Важно правильно эмпирически подобрать критерии применения процедуры экстраполяции. Очевидно, что для значений $\Lambda^q < 1$ и $\Lambda^q > 1$ экстраполяцию не надо делать. Экстраполяция делается, если три последовательные оценки параметра экстраполяции \mathcal{K}^q по (7.3) близки между собой, например, удовлетворяют следующему критерию:

$$1 - \frac{\min(\kappa^{q}, \kappa^{q-1}, \kappa^{q-2})}{\max(\kappa^{q}, \kappa^{q-1}, \kappa^{q-2})} < 0.2.$$

Кроме того, значение κ^q подбирается таким образом, чтобы плотность источника деления не изменилась больше, чем на заданную максимальную величину.

В заключение заметим, что в [12] этот метод ускорения описан для решения систем линейных уравнений и называется δ^2 - процесс ускорения сходимости.

8. Результаты расчета реактора СВБР 75/100.

Описанные выше методы решения были реализованы в программных модулях пакета «РЕАКТОР» и отлажены на наборе тестовых задач.

Решение реальных задач на K_{eff} для системы уравнений переноса практически невозможно без предварительного вычисления хорошего начального приближения более быстрым способом, например, в диффузионном приближении. Тогда дальнейший расчет K_{eff} в кинетическом приближении осуществляется с небольшим числом внешних итераций благодаря использованию описанного выше метода ускорения.

В качестве примера на Рис. 1 показано поведение значений K^q на внешних итерациях при решении задачи на K_{eff} в диффузионном приближении в HEX-Z геометрии для 30 групп нейтронов. Задавалось небольшое число (девять) внутренних итераций в каждой группе. На Рис. 1 заметно влияние одного из применений экстраполяции источника деления при ускорении внешних итераций (кривая немонотонно изгибается и поднимается вверх к точному решению).



Рис. 1. Поведение приближенного значения *K*_{eff} на внешних итерациях в диффузионном приближении.

Результаты расчетов задач защиты реакторной установки СВБР 75/100 [14] по пакету «РЕАКТОР» показали хорошее совпадение с аналогичными расчетами по программе TORT [18]. Для сравнения использовались одинаковые константы, полученные по программе TRANSX 2.0 [19] для 30 нейтронных групп, 19 групп γ -квантов. В расчете использовалось S₈ - приближение метода дискретных ординат и РЗ - приближение сечений перехода. Пространственная сетка содержала 2417637 ячеек.

На Рис. 2 и Рис. 3 показаны результаты расчета плотности полного потока нейтронов в X-Y-Z геометрии, рассчитанные с использованием схемы WDIF в пакете «PEAKTOP» и по программе TORT соответственно.



Рис. 2. Плотность полного потока нейтронов (нейтр/см²с) в пакете «РЕАКТОР».



Рис. 3. Плотность полного потока нейтронов (нейтр/см²·сек) по программе TORT.

Из сравнения рисунков видно, что численные результаты, полученные по разным программам, практически совпадают. Другие аспекты сравнения алгоритмов и программ будут рассмотрены в последующих публикациях.

Заключение

Описанные выше методы решения уравнения переноса в многогрупповом приближении в трехмерной геометрии позволяют эффективно решать как реакторные задачи, так и задачи защиты в едином пакете программ «РЕАКТОР».

В заключение автор выражает благодарность Л.П. Бассу за полезные обсуждения и ряд ценных замечаний, а так же А.В. Воронкову и Е.А. Земскову за предоставленные для работы литературные источники.

Литература

- A.V. Voronkov, A.N. Chebeskov, E.P. Sychugova, I.Y. Krivitsky, E.V. Matveeva, Y.N. Mironovich, A.D. Knipe. Low Reactivity Sodium-Void Benchmark Study in an Annular Heterogeneous Assembly. *Proceeding of the International Topical Meeting on Sodium Cooled Fast Reactor Safety*, IPPE, Obninsk, 1994.
- А.В. Воронков, Л.П. Басс, Е.П. Сычугова. Пакет программ KINRZ для решения многогруппового уравнения переноса нейтронов и γ – квантов в двумерной R-Z геометрии методом дискретных ординат. Препринт ИПМ PAH, 1999, №83.
- 3. А.В. Воронков, Е.П. Сычугова, Е.В. Матвеева, А.Н. Чебесков. Расчетные исследования натриевого пустотного коэффициента реактивности (НПЭР), измеренного в экспериментах «ZEBRA». Препринт ИПМ РАН, 1996, №65.
- 4. А.В. Воронков, Е.П. Сычугова. Решение уравнения переноса нейтронов в двумерной R-Z и трехмерной X-Y-Z геометриях методом дискретных ординат. Препринт ИПМ РАН, 1995, №6.
- 5. А.В. Воронков, Е.П. Сычугова. Алгоритм решения многогруппового стационарного уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов на сетках, согласованных со структурой расчетной области в двумерной R-Z геометрии методом дискретных ординат. М. *Препринт ИПМ РАН*, 2000, №79.
- 6. А.В. Воронков, Е.П. Сычугова, А.С. Голубев. Решение стационарного уравнения переноса нейтронов в трехмерной Hex-Z геометрии. *Отиет ИПМ РАН*, 2004, № 7-03-2004 (37с.)
- 7. E.M. Gelbard and L.A. Hegeman. The Synthetic Method as Applied the S_n Equations. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 37, 288, 1969.
- М.В. Масленников, А.В. Воронков, Б.З. Оссерович, Г.И. Тошинский, В.В. Чекунов, В.Е. Коробицын. TRIANG – программа расчета на треугольной сетке в малогрупповом диффузионном приближении. Отчет ИПМ АН СССР и ФЭИ, Москва, 1975, (198с.)
- 9. W.A. Rhoades, W.W. Engle, Jr. A New Weighted Difference Formulation for Discrete Ordinates Calculations. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, vol. 27, 776-777, 1977.
- 10.W. H. Reed. The Effectiveness of acceleration Techniques for Iterative Methods in Transport Theory. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 45, 245, (1971).
- 11.W.A. Rhoades. Improvements in Discrete Ordinates Acceleration. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 39, 753, 1981.
- 12.Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. Численные методы. Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 3-е издание, дополненное и переработанное, Москва, 2004.
- 13.А.В. Воронков, Е.П. Сычугова, П.Б. Афанасьев, А.В. Дедуль, В.В.Кальченко. Трехмерные расчеты радиационной защиты в пакете программ РЕАКТОР-ГП. Тезисы доклада на IX Российской научной конференции «Радиационная защита и радиационная безопасность в

ядерных технологиях» 24-26 октября 2006 г., Федеральное Агентство по Атомной Энергии, ГНЦ РФ Физико-Энергетический Институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск, с. 52-54.

- 14.Е.В. Аверченков, П.Б. Афанасьев, А.В. Дедуль, В.В. Кальченко, А.В.Воронков, Е.П. Сычугова. Трехмерные расчеты радиационной защиты реакторной установки СВБР 75/100. Тезисы доклада на IX Российской научной конференции «Радиационная защита и радиационная безопасность в ядерных технологиях» 24-26 октября 2006 г., Федеральное Агентство по Атомной Энергии, ГНЦ РФ Физико-Энергетический Институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск, с. 255-257.
- 15.Е.В. Аверченков, П.Б. Афанасьев, А.В. Дедуль, В.В. Кальченко, А.В.Воронков, Е.П. Сычугова. Совместные расчеты «РЕАКТОР» + «ЗАЩИТА» реакторной установки СВБР 75/100 в трехмерной геометрии. *Тезисы докладов на 17-м семинаре «НЕЙТРОНИКА – 2006» Нейтроннофизические проблемы атомной энергетики*, 30 октября -03 ноября 2006, г. Обнинск.
- 16. «Вычислительные методы в физике реакторов», Сб. статей под ред. Х. Гринспена, К. Келбера, Д. Окрента, Москва, Атомиздат, 1972.
- 17.B.G. Carlson «A Method of Characteristics and Other Improvements in Solution Methods for the Transport Equation», *Nucl. Sci. Eng.*, v. 61, 408 (1976).
- 18.DOORS3.2 One, Two- and Tree Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code System. *RSIC Computer Code Collection CCC-650*, 1998.
- 19.R. E. MacFarlane "TRANSX-2: Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes", *LA-12312-MS*, (1992).
- 20.Шишков Л.К. Методы решения диффузионных уравнений двумерного ядерного реактора, *Атомиздат*, Москва, 1976.
- 21.Habetler G.J., Martino M.A. Existence Theorems and Spectral Theory for the Multigroup Diffusion Model, *Appl. Math.*, v. 11, 127 (1961).
- 22.Шихов С.Б. Вопросы математической теории реакторов. Линейный анализ, *Атомиздат*, Москва, 1973.
- 23.Варга Р.С. Численные методы решения многомерных многогрупповых диффузионных уравнений.-В кн.: Теория ядерных реакторов. Пер. с англ. Под ред. Г.А. Батя, *Госатомиздат*, Москва, 1963 с.193.