

УДК 621.039.51

## Граничные условия в методе поверхностных гармоник

*А.В. Ельшин*<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup> ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», г. Сосновый Бор Ленинградской области, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия

### Аннотация

При проведении нейтронно-физического расчёта ядерного реактора, в частности, при вычислении пространственно-энергетического распределения нейтронов в диффузионном или более высоких приближениях уравнения переноса нейтронов (например, методом поверхностных гармоник), на границах реактора ставятся вакуумные граничные условия Марка или Маршака. В настоящей работе сравнивается применение этих условий на примере решения тестовой одногрупповой одномерной задачи методом сферических гармоник (до  $P_{97}$ -приближения) и в различных приближениях метода поверхностных гармоник.

**Ключевые слова:** Метод поверхностных гармоник, метод сферических гармоник, вакуумные граничные условия, условия Марка, условия Маршака, тестовая задача.

UDC 621.039.51

## Boundary conditions in surface harmonics method

*A.V. Elshin*<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup> FSUE "Alexandrov NITI", Sosnovy Bor, Leningrad region, Russia;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Russia

### Abstract

Mark and Marshak type vacuum boundary conditions are applied at the reactor boundary when computing the space-energy distribution of neutrons with the diffusion or higher approximations for neutron transport equations (e.g. using the surface harmonics method) in reactor neutron calculations. This paper compares application of these conditions to solution of a test one-group, one-dimensional problem using the spherical harmonics method (with up to  $P_{97}$ -approximations) and surface harmonics method with different approximations.

**Key words:** Surface harmonics method, spherical harmonics method, vacuum boundary conditions, Mark type conditions, Marshak type conditions, test problem.

### Введение

Для решения уравнения переноса нейтронов и определения в реакторе характеристик полей нейтронов, энерговыделения и коэффициента размножения нейтронов, наиболее применяемым подходом в настоящее время является метод гомогенизации [1, 2]. Развитием этого метода является метод поверхностных гармоник (МПГ) [2, 3]. В методе поверхностных гармоник на границах ячеек (фрагментов реактора) может использоваться сшивка не только плотности тока и потока нейтронов (как в диффузионном приближении), но и более высоких угловых моментов, причем вместо четных угловых моментов могут использоваться их линейные комбинации (как в четных приближениях метода сферических гармоник [4]).

На внешней границе реактора в МПГ в граничных условиях удобно использовать матрицу  $\Gamma$  связи вектора нечетных угловых моментов  $\mathbf{I}$  распределения нейтронов с вектором четных угловых моментов  $\Phi$  [5, 6],  $\Phi = -\Gamma\mathbf{I}$  (пояснения по использованию  $\Phi$  и  $\mathbf{I}$  приведены ниже). В литературе (например, [4]) известны граничные условия типа Марка и типа Маршака на границе реактора (вакуумные граничные условия), использующие разложение распределения нейтронов на границе реактора в ряд по сферическим гармоникам (в простейшем случае, по полиномам Лежандра).

В данной статье автор использует граничные условия Марка и Маршака по следующим причинам:

- в этом случае возможно оценить эффективность использования граничных условий Марка и Маршака в высоких  $P_N$ -приближениях метода сферических гармоник (что ещё не было сделано на момент выхода работы [4]);
- граничные условия Маршака и Марка можно записать в виде, используемом в МПГ:  $\Phi = -\Gamma\mathbf{I}$ ;
- с точки зрения точности расчёта представляется интересным выбор типа граничных условий (Марка или Маршака) в приближениях метода поверхностных гармоник, в которых на границах ячеек и реактора используются более высокие угловые моменты распределения нейтронов (а не только плотность потока и тока нейтронов).

Следует отметить, что граничные условия вида  $\Phi = -\Gamma\mathbf{I}$  при  $\Gamma \rightarrow \infty$  дают граничные условия зеркального отражения, а при  $\Gamma \rightarrow 0$  – условия равенства нулю четных угловых моментов распределения нейтронов на границе реактора. С помощью этой матрицы можно также смоделировать граничные условия альбедного типа на границе с отражателем (смотрите, например, работу [7]).

В настоящей работе приведены матрицы  $\Gamma$  для вакуумных граничных условий Марка и Маршака, в том числе для четных  $P_N$ -приближений (и четных приближений МПГ). На примере тестовых (однотиповых, одномерных) задач, использованных в [8], проведено сравнение результатов расчётов с использованием граничных условий Марка и Маршака в четных и нечетных  $P_N$ -приближениях (до  $N = 97$ ) метода сферических гармоник (МСГ), а также в различных приближениях (четных и нечетных, до  $L^{MPG} = 9$ ) метода поверхностных гармоник.

Граничные условия Маршака в плоском случае записываются в виде интегральных равенств (для простоты в статье рассматривается односкоростное уравнение):

$$\int_0^1 \Phi(x_L, \mu) P_i(\mu) d\mu = 0, \quad \int_{-1}^0 \Phi(x_R, \mu) P_i(\mu) d\mu = 0, \quad (1)$$

где

- $P_i(\mu)$  – полином Лежандра,  $\mu = \Omega_x$  (проекция единичного вектора  $\Omega$  -направления полета нейтрона на ось  $x$ ),  $x_L$  и  $x_R$  – левая и правая граница «реактора»;
- $i = 1, 3, 5, \dots, N$  – степень полинома Лежандра (как правило, используются нечетные  $N$ , поэтому на каждой границе ставится  $(N + 1)/2$  граничных условий);
- $\Phi(x_L, \mu)$  и  $\Phi(x_R, \mu)$  – угловые распределения (плотности потока) нейтронов на левой и правой границе реактора.

Граничные условия Марка записываются в виде равенства нулю плотности потока нейтронов для некоторых выделенных направлений:

$$\Phi(x_L, \mu_i) = 0, \mu_i > 0; \quad \Phi(x_R, \mu_i) = 0, \mu_i < 0, \quad (2)$$

В нечетных  $P_N$ -приближениях в качестве выделенных направлений рекомендуется [6] брать нули полинома Лежандра  $(N+1)$ -го (четного) порядка. Так как полином Лежандра степени  $N+1$  имеет  $(N+1)$  корней (отрицательные и положительные корни расположены симметрично), это обеспечивает по  $(N+1)/2$  условий на каждой границе, что и требуется для замыкания системы дифференциальных уравнений в нечетных  $P_N$ -приближениях метода сферических гармоник.

Ниже в формулах будут использоваться следующие обозначения для векторов нечетных  $\mathbf{I}$  и четных  $\mathbf{\Phi}$  угловых моментов на границе системы:

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} \Phi_1(x_L) \\ \dots \\ \Phi_{2j-1}(x_L) \\ \dots \\ \Phi_{2J-1}(x_L) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Phi} = \begin{pmatrix} \Phi_0(x_L) \\ \dots \\ \Phi_{2(j-1)}(x_L) \\ \dots \\ \Phi_{2J}(x_L) \end{pmatrix}$$

где  $j$  – номер строки,  $J = N/2$  для четных  $N$  и  $J = (N-1)/2$  для нечетных  $N$ .

В четных приближениях приходится использовать комбинации векторов двух последовательных четных моментов. В работах [2, 9] эти комбинации названы уровнями  $\tilde{\Phi}$ .

Вектор уровней  $\tilde{\Phi}$  получается умножением вектора четных моментов слева на прямоугольную матрицу  $\mathbf{Y}$ :

$$\tilde{\Phi} = \mathbf{Y}\mathbf{\Phi}, \quad \text{где } \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 2j-1 & 2j & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2J-1 & 2J \end{pmatrix}.$$

## 1. Граничные условия Маршака

Матрицы  $\mathbf{\Gamma}$  для граничных условий Маршака получены в работе [10], тем не менее, для полноты и иллюстрации подхода ниже приведены основные формулы и итоговые соотношения.

### 1.1 Нечетные $P_N$ -приближения

Подставляя в граничные условия (1) плотность потока нейтронов на левой границе в виде разложения по полиномам Лежандра (на правой границе выкладки аналогичны):

$$\Phi(x_L, \mu) = \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} \Phi_n(x_L) P_n(\mu),$$

и записывая отдельно суммирование по четным и нечетным индексам ( $i = 1, 2, \dots, (N+1)/2$ ), используя, где можно, нормировку полиномов Лежандра, получим

$$\sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left[ (4j-3) p_{ij} \Phi_{2(j-1)}(x_L) + \Phi_{2j-1}(x_L) \delta_{ij} \right] = 0$$

где

$$p_{ij} = \int_0^1 P_{2i-1}(\mu)P_{2(j-1)}(\mu)d\mu ; \delta_{ij} - \text{дельта-символ Кронекера.}$$

Используя ранее введенные векторы  $\mathbf{I}$  нечетных и  $\mathbf{\Phi}$  четных моментов размерности  $(N+1)/2$  из последнего соотношения имеем  $\mathbf{A}_{odd}\mathbf{\Phi} + \mathbf{I} = 0$ , где матрица  $\mathbf{A}_{odd}$  размерности  $(N+1)/2 \times (N+1)/2$  имеет элементы  $(\mathbf{A}_{odd})_{ij} = (4j-3)p_{ij}$ .

Тогда искомое соотношение (граничные условия) записывается в виде:

$$\mathbf{\Phi} = -\mathbf{\Gamma}_{odd}\mathbf{I}, \text{ где } \mathbf{\Gamma}_{odd} = \mathbf{A}_{odd}^{-1}. \tag{3}$$

При этом, например, для 5-го приближения матрица  $\mathbf{A}_{odd}$  имеет вид:

$$\mathbf{A}_{odd} = \begin{pmatrix} 0.50000 & 0.62500 & -0.18750 \\ -0.12500 & 0.62500 & 0.63281 \\ 0.06250 & -0.19531 & 0.63281 \end{pmatrix}.$$

Из этой матрицы получаем  $\mathbf{\Gamma}_{odd}$  для  $P_1, P_3$  и  $P_5$ -приближений.

Элементы матрицы  $\mathbf{\Gamma}_{odd}$  для условий Маршака в нечетных приближениях приведены в табл. 1.

Таблица 1

Матрица  $\mathbf{\Gamma}_{odd}$  для условий Маршака в нечетных приближениях

$P_1$ -приближение	$P_3$ -приближение	$P_5$ -приближение
2.000000	1.600000    -1.600000 0.320000    1.280000	1.542857    -1.066667    1.523810 0.352653    0.975238    -0.58481 -0.043537    0.406349    1.160998

Из табл. 1 видно, что для  $P_1$ -приближения имеется предельный переход к диффузионному приближению  $\Phi_0 = -2\Phi_1$ .

Заметим, что при использовании нечетных  $P_N$ -приближений применение уровней необязательно, т.к. из-за того, что для последнего четного момента нет пары для формирования уровня, сшивка уровней сводится к сшивке четных угловых моментов.

### 1.2 Четные $P_N$ -приближения

В четных приближениях уместно использовать в выражении (1) полиномы Лежандра четного порядка, в результате получим:

$$\sum_{j=1}^{N/2+1} \Phi_{2(j-1)}(x_L)\delta_{ij} + \sum_{j=1}^{N/2} (4j-1)p_{ji}\Phi_{2j-1}(x_L) = 0, \tag{4}$$

Используя вектор нечетных угловых моментов  $\mathbf{I}$  размерности  $N/2$ , вектор четных моментов  $\mathbf{\Phi}$  размерности  $N/2+1$  и прямоугольную матрицу  $\mathbf{A}_{even}$  размерности  $(N/2+1) \times N/2$  с элементами  $(\mathbf{A}_{even})_{ij} = (4j-1)p_{ji}$ , из (4) имеем  $\mathbf{\Phi} = -\mathbf{A}_{even}\mathbf{I}$ . Умножая последнее соотношение слева на прямоугольную матрицу  $\mathbf{Y}$  (см. выше), получаем искомое соотношение:

$$\tilde{\Phi} = -\Gamma_{\text{even}} \mathbf{I}, \text{ где } \Gamma_{\text{even}} = \mathbf{Y} \mathbf{A}_{\text{even}}.$$

Для  $P_6$ -приближения (а также для  $P_2$  и  $P_4$ -приближений) имеем

$$\Gamma_{\text{even}} = \begin{pmatrix} 2.25 & 0.875 & -0.17187 \\ 0.875 & 4.59375 & 1.804688 \\ -0.17187 & 1.804688 & 7.089844 \end{pmatrix}.$$

В четных  $P_N$ -приближениях интегрирование в (1) с полиномом нечетного порядка не приводит к желаемому результату из-за невозможности от вектора четных моментов перейти к вектору уровней (так как матрица  $\mathbf{Y}$  прямоугольная и не имеет обратной).

Отметим, что в  $P_2$ -приближении имеем  $\tilde{\Phi}_0 = -2.25\Phi_1$ .

## 2. Граничные условия Марка

В данном параграфе новым является использование граничных условий Марка в четных  $P_N$ -приближениях метода сферических гармоник.

### 2.1 Нечетные $P_N$ -приближения

При постановке граничных условий Марка в нечетных  $P_N$ -приближениях (на каждой границе  $(N+1)/2$  условий) используют то, что полином Лежандра четного порядка  $P_{N+1}(\mu)$  имеет  $(N+1)/2$  «отрицательных» нулей и  $(N+1)/2$  нулей при положительных  $\mu$ . Если обозначить эти положительные корни (нули полинома)  $\mu_i^{N+1}$ , то граничные условия, используя (2), можно записать (на левой границе) следующим образом:

$$\sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} \Phi_n(x_L) P_n(\mu_i^{N+1}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, (N+1)/2.$$

Записывая отдельно суммирование по четным и нечетным индексам  $n$ , имеем:

$$\sum_{j=1}^{(N+1)/2} [4(j-1)+1] P_{2(j-1)}(\mu_i^{N+1}) \Phi_{2(j-1)}(x_L) + \sum_{j=1}^{(N+1)/2} [2(2j-1)+1] P_{2j-1}(\mu_i^{N+1}) \Phi_{2j-1}(x_L) = 0. \quad (5)$$

Используя ранее введенные векторы нечетных  $\mathbf{I}$  и четных  $\Phi$  моментов размерности  $(N+1)/2$  соотношение (5) запишем в матрично-векторной форме:

$$\mathbf{O}_{\text{odd}} \Phi + \mathbf{T}_{\text{odd}} \mathbf{I} = 0, \text{ или } \Phi = -\Gamma_{\text{odd}} \mathbf{I}, \text{ где } \Gamma_{\text{odd}} = \mathbf{O}_{\text{odd}}^{-1} \mathbf{T}_{\text{odd}}. \quad (6)$$

Элементы квадратных матриц  $\mathbf{O}_{\text{odd}}^{-1}$  и  $\mathbf{T}_{\text{odd}}$  вычисляются по формулам:

$$(\mathbf{O}_{\text{odd}})_{ij} = (4j-3)P_{2(j-1)}(\mu_i^{N+1}), \quad (\mathbf{T}_{\text{odd}})_{ij} = (4j-1)P_{2j-1}(\mu_i^{N+1}).$$

При использовании нечетных  $P_N$ -приближений применение уровней также необязательно, т.к. из-за того, что для последнего четного момента нет пары для формирования уровня, сшивка уровней сводится к сшивке четных угловых моментов.

Если в условиях Маршака мы можем получить одну «большую» матрицу, из которой можем вырезать нужную квадратную часть (от начала матрицы), то матрица Марка для каждого приближения индивидуальна <sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Автор благодарит студентов Института Ядерной Энергетики (филиал) СПбПУ Петра Великого Борисенко А.В. и Муравьеву К.В. за получение численных значений, приведенных далее в настоящей работе.

Вид матрицы  $\Gamma_{odd}$  для условий Марка в нечетных приближениях представлен в табл. 2.

Таблица 2

Матрица  $\Gamma_{odd}$  для условий Марка в нечетных приближениях

$P_1$ -приближение	$P_3$ -приближение	$P_5$ -приближение
1.732266	1.563802   -1.13743 0.333008   1.068431	1.529853   -0.98731   0.94162 0.358049   0.940091   -0.58481 -0.04536   0.422579   0.966512

В  $P_1$ -приближении мы также не имеем предельного перехода к диффузионному приближению: вместо диффузионного  $\Phi_0 = -2\Phi_1$  имеем  $\Phi_0 = -1.73\Phi_1$ , вследствие чего можем ожидать, что в низших приближениях метода сферических гармоник (а также, метода поверхностных гармоник) расчёты с применением условий Марка будут занижать собственное значение по сравнению с условиями Маршака.

### 2.2 Четные $P_N$ -приближения

В четном  $P_N$ -приближении имеется столько же линейно независимых решений (и неизвестных коэффициентов перед ними), сколько в предыдущем нечетном – поэтому в граничных условиях используются комбинации четных моментов распределения (уровни) нейтронов, а на каждой границе необходимо поставить  $N/2$  условий.

Для формирования вектора уровней необходимо записывать  $N/2+1$  уравнений, чтобы, используя матрицу  $\mathbf{Y}$ , перейти к вектору уровней размерности  $N/2$ . Можно в качестве выделенных  $\mu_i$  использовать  $\mu_i^{N+2}$  – нули полинома  $P_{N+2}(\mu)$ , то есть, следующего четного полинома.

Этих нулей  $N+2$ , поэтому на каждой границе можем записать по  $\frac{N+2}{2} = \frac{N}{2} + 1$  уравнений.

В любом случае можем записать, например, на левой границе  $(N+2)/2$  уравнений типа (5):

$$\sum_{j=1}^{N/2+1} [4(j-1)+1]P_{2(j-1)}(\mu_i^{N+2})\Phi_{2(j-1)}(x_L) + \sum_{j=1}^{N/2} [2(2j-1)+1]P_{2j-1}(\mu_i^{N+2})\Phi_{2j-1}(x_L) = 0,$$

или, в матричном виде:

$$\mathbf{O}_{even} \Phi + \mathbf{T}_{even} \mathbf{I} = 0. \tag{7}$$

Важно отметить, что элементы матриц  $\mathbf{O}_{even}$ ,  $\mathbf{T}_{even}$  вычисляются по тем же формулам раздела 2.1, что и для матриц  $\mathbf{O}_{odd}$ ,  $\mathbf{T}_{odd}$ , но матрица  $\mathbf{O}_{even}$  – квадратная размерностью  $\frac{N+2}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right)$ , а  $\mathbf{T}_{even}$  – прямоугольная (строк  $(N+2)/2$ , а столбцов  $N/2$ ).

Из (7) можем записать  $\Phi = \mathbf{O}_{even}^{-1} \mathbf{T}_{even} \mathbf{I}$ , а после умножения матрицы  $\Phi$  на прямоугольную матрицу  $\mathbf{Y}$  слева получаем искомое соотношение ( $\tilde{\Phi} = \mathbf{Y}\Phi$ ):

$$\tilde{\Phi} = -\Gamma_{even} \mathbf{I}, \text{ где } \Gamma_{even} = \mathbf{Y} \mathbf{O}_{even}^{-1} \mathbf{T}_{even}.$$

Для приближений до  $P_6$  компоненты матрицы приведены в табл. 3.

Таблица 3

Матрица  $\Gamma_{odd}$  для условий Марка в четных приближениях

$P_2$ -приближение	$P_4$ -приближение	$P_6$ -приближение
2.229819	2.245951 0.892876 0.892694 4.510589	2.248708 0.880126 -0.1846 0.880234 4.572526 1.860078 -0.18489 1.859594 6.933029

В  $P_2$ -приближении имеем  $\tilde{\Phi}_0 = -2.23\Phi_1$ . Можем отметить, что в низших четных приближениях метода сферических гармоник условия Марка будут несколько предпочтительнее, чем условия Маршака.

Таким образом, в четных и нечетных приближениях метода сферических гармоник (и МПГ) имеем однозначные граничные условия Маршака и Марка. Следует отметить, что при использовании условий Маршака необходимо один раз с использованием численного интегрирования вычислить элементы  $p_{ij}$  (например, для  $P_{97}$ -приближения примерно 2500 чисел), и далее эту матрицу можно использовать для всех более низких приближений.

В случае применения условий Марка необходимо найти нули всех четных полиномов Лежандра (примерно 1250 значений при использовании приближений до  $N = 97$ ), вычислить значения полиномов для необходимых выделенных направлений (примерно 2 500 значений), и эти значения использовать для построения индивидуальных матриц  $\Gamma$  для каждого приближения путем матричных преобразований. В этом смысле, хотя исходное количество чисел для получения матрицы  $\Gamma$  одинаково (для обоих типов граничных условий), но само получение этой матрицы более громоздко в случае использования условий Марка. Если же матрицы для условий Марка получить один раз, а затем «хранить», то количество хранимых чисел будет примерно в 100 раз больше для нашего случая, когда  $N \leq 97$ .

### 3. Конечно-разностная запись граничных условий

Конечно-разностную запись граничных условий продемонстрируем сначала на одномерной геометрии. Используя результаты работы [9], трёхточечное уравнение (аналог конечно-разностной аппроксимации одномерного уравнения диффузии) для неструктурированной сетки, но симметричных ячеек можно записать в виде:

$$\sum_{i=k\pm 1} (\Psi_k + \Psi_i)^{-1} (\mathbf{R}_i \Phi_i - \mathbf{R}_k \Phi_k) - \Sigma_k \Phi_k + \mathbf{Q}_k = 0 \quad (8)$$

где

$\Phi_k, \Phi_i$  – искомые «плотности потока нейтронов» в соседних ячейках сетки;

$\mathbf{Q}_k$  – внешний «источник» нейтронов (если он есть);

$\Psi_k, \Psi_i, \Sigma_k, \mathbf{R}_i$  – коэффициенты уравнения (связаны с коэффициентами диффузии, сечениями поглощения нейтронов и коэффициентами неравномерности плотности потока нейтронов в ячейках).

Обычно систему конечно-разностных уравнений записывают в виде (смотрите, например, [11]):

$$-a_k \Phi_{k-1} + e_k \Phi_k - b_k \Phi_{k+1} = q_k,$$

после чего пишут громоздкие (особенно для не одномерного случая) формулы для вычисления коэффициентов этих уравнений. Уравнение (8) также можно записать в аналогичном виде (пишем в матричном виде, а не для одной группы нейтронов, как приведено в [11]):

$$-\mathbf{A}_k \Phi_{k-1} - \mathbf{B}_k \Phi_{k+1} + (\mathbf{C}_k + \Sigma_k \Phi_k) = \mathbf{Q}_k \quad (9)$$

$$\mathbf{a}_k = (\psi_{k-1} + \psi_k)^{-1}, \mathbf{A}_k = (\psi_{k-1} + \psi_k)^{-1} \mathbf{R}_{k-1} = \mathbf{a}_k \mathbf{R}_{k-1}, \text{ (кроме 1-й ячейки),}$$

$$\mathbf{B}_k = (\psi_k + \psi_{k+1})^{-1} \mathbf{R}_{k+1} = \mathbf{a}_{k+1} \mathbf{R}_{k+1} \text{ или } \mathbf{B}_{k-1} = \mathbf{a}_k \mathbf{R}_k, \text{ (кроме } K\text{-й, граничной ячейки).}$$

Для удобства программирования этих формул для граничных ячеек целесообразно нумерацию в массиве коэффициентов  $\mathbf{B}_k$  начать с нуля, при этом вычислять  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{a}_1 \mathbf{R}_1$ ,  $\mathbf{a}_1 = (\Gamma_0 + \psi_1)^{-1}$ .

Аналогично, размерность массива для коэффициентов  $\mathbf{A}_k$  целесообразно увеличить до  $K+1$ , при этом  $\mathbf{A}_{K+1} = \mathbf{a}_{K+1} \mathbf{R}_K$ ,  $\mathbf{a}_{K+1} = (\psi_K + \Gamma_{K+1})^{-1}$ . Тогда всегда в соотношении (9) имеем:

$$\mathbf{C}_k = \mathbf{A}_{k+1} + \mathbf{B}_{k-1}.$$

Для двумерной геометрии формулы получаются аналогичными. В работе [10] для прямоугольной сетки пятиточечные уравнения записываются в виде ( $i$  – индекс ячеек по оси  $x$ ,  $j$  – индекс ячеек по оси  $y$ ):

$$-a_{ij} \Phi_{i+1,j} - b_{ij} \Phi_{i-1,j} - c_{ij} \Phi_{i,j+1} - d_{ij} \Phi_{i,j-1} + e_{ij} \Phi_{i,j} = q_{ij},$$

с громоздкими формулами (зависящими, в том числе, от размеров ячеек) для вычисления коэффициентов этих уравнений.

Получаемые в МПГ уравнения (для симметричных прямоугольных ячеек)

$$\sum_{k=\pm 1} (\psi_{xi+k,j} + \psi_{xi,j})^{-1} (\mathbf{R}_{i+k,j}^x \Phi_{i+k,j} - \mathbf{R}_{i,j}^x \Phi_{i,j}) + \sum_{k=\pm 1} (\psi_{yi,j+k} + \psi_{yi,j})^{-1} (\mathbf{R}_{i,j+k}^y \Phi_{i,j+k} - \mathbf{R}_{i,j}^y \Phi_{i,j}) - \Sigma_{i,j} \Phi_{i,j} + \mathbf{Q}_{i,j} = 0$$

тоже можно записать в аналогичном виде (пишем в матричном виде, а не для одной группы нейтронов, как написано в [11]):

$$-\mathbf{A}_{ij}^x \Phi_{i-1,j} - \mathbf{B}_{ij}^x \Phi_{i+1,j} - \mathbf{A}_{ij}^y \Phi_{i,j-1} - \mathbf{B}_{ij}^y \Phi_{i,j+1} + (\mathbf{C}_{ij}^x + \mathbf{C}_{ij}^y + \Sigma_{i,j} \Phi_{i,j}) = \Sigma_{i,j} \Phi_{i,j} + \mathbf{Q}_{i,j} \quad (10)$$

Формулы для коэффициентов уравнений по  $x$  и по  $y$  имеют однотипный вид ( $k=i,j$ ,  $a = x$ ,  $k\pm 1 = i\pm 1,j$  или  $a = y$ ,  $k\pm 1 = i,j\pm 1$ ):

$$\mathbf{a}_k^a = (\psi_{ak-1} + \psi_{ak})^{-1}, \mathbf{A}_k^a = (\psi_{ak-1} + \psi_{ak})^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^a = \mathbf{a}_k^a \mathbf{R}_{k-1}^a, \text{ (кроме 1-й ячейки),}$$

$$\mathbf{B}_k^a = (\psi_{ak} + \psi_{ak+1})^{-1} \mathbf{R}_{k+1}^a = \mathbf{a}_{k+1}^a \mathbf{R}_{k+1}^a \text{ или } \mathbf{B}_{k-1}^a = \mathbf{a}_k^a \mathbf{R}_k^a, \text{ (кроме } K\text{-й ячейки).}$$

Опять же, для удобства программирования этих формул для граничных ячеек целесообразно нумерацию элементов в массиве коэффициентов  $\mathbf{B}_k^a$  начать с нуля (при этом вычислять

$$\mathbf{B}_0^a = \mathbf{a}_1^a \mathbf{R}_1^a, \mathbf{a}_1^a = (\Gamma_0^a + \psi_1^a)^{-1}.$$



Аналогично, размерность массива для  $A_k^a$  целесообразно увеличить до  $K+1$ , при этом  $A_{K+1}^a = a_{K+1}^a R_K^a$ ,  $a_{K+1}^a = (\Psi_K^a + \Gamma_{K+1}^a)^{-1}$ .

Тогда всегда  $C_{ij}^x = A_{i+1,j}^x + B_{i-1,j}^x$ ,  $C_{ij}^y = A_{i,j+1}^y + B_{i,j-1}^y$ , а систему уравнений (10) можно решать известными и описанными в [11] для уравнения диффузии способами (методом простых итераций, методом итераций Гаусса-Зайделя, методом точечной или линейной релаксации, методом переменных направлений и так далее).

#### 4. Сравнение граничных условий Марка и Маршака

Для численной иллюстрации и сравнения результатов расчёта с использованием граничных условий Маршака и Марка в четных и нечетных приближениях метода сферических и поверхностных гармоник воспользуемся результатами работы [12].

Рассмотрим наиболее трудную для методов тестовую задачу из работы [8] – расчёт коэффициента размножения нейтронов в плоской геометрии для системы из последовательно расположенных пластин из  $U$  и  $U-Pu$ , разделённых слоями  $Na$ , схематически представленной ниже на рисунке (ячейки, используемые в МПП, помечены индексом «Cell»). В настоящей статье результаты приведены для системы с 5-ю слоями  $U$  (количество  $U-Pu$  пластин на единицу меньше – 4).

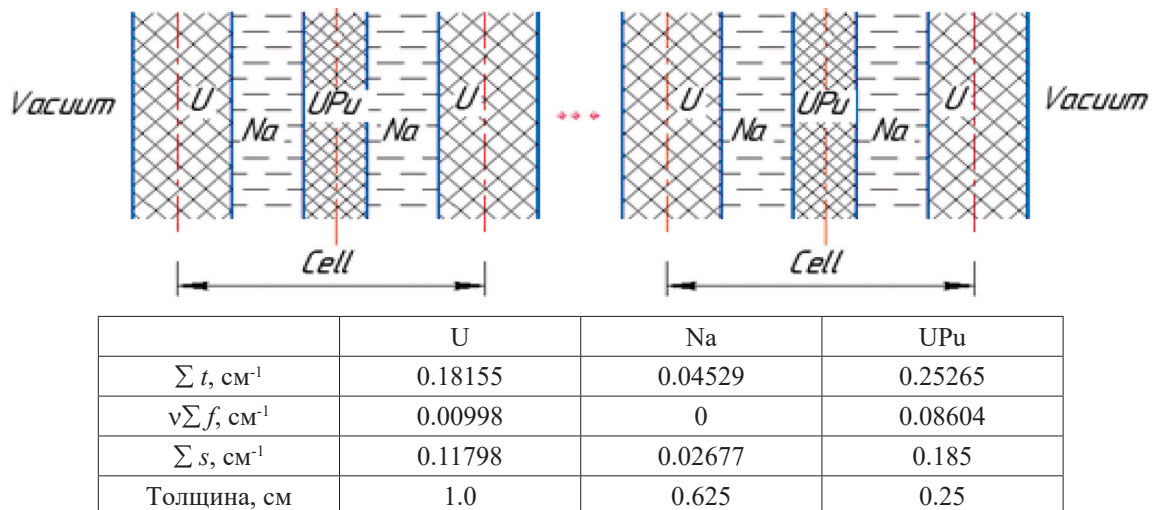


Рисунок. Геометрия и свойства материалов в тестовой задаче

При решении односкоростных одномерных (плоских, многослойных) задач методом сферических гармоник можно численно найти корни характеристического уравнения, аналитически записать решение в каждом слое системы в виде линейной комбинации независимых ( $N+1$  для нечетных или  $N/2$  для четных приближений) решений. Коэффициенты линейной комбинации (и коэффициент размножения – собственное число задачи) находятся из решения системы линейных уравнений сшивки распределения нейтронов (угловых моментов) на границах слоев и граничных условий (типа Маршака или Марка). В качестве реперного принимается результат, полученный в  $P_{97}$ -приближении.

В методе поверхностных гармоник, как и в методе гомогенизации, слои (периодически повторяющиеся) объединяются в ячейки, распределение нейтронов в ячейке строится в виде линейной комбинации небольшого количества пробных функций, каждая из которых вычисляется в  $P_{97}$ -приближении и удовлетворяет некоторым неоднородным граничным условиям.

Коэффициенты линейной комбинации (и коэффициент размножения – собственное число задачи) находятся из решения системы линейных уравнений сшивки распределения нейтронов (угловых моментов) на границах ячеек и граничных условий (типа Маршака или Марка). Важно, что на границах ячеек сшиваются только низшие угловые моменты, до  $L^{МПГ}$ , включительно ( $L^{МПГ} \leq 9$ ), поэтому границы ячеек рекомендуется выбирать там, где угловое распределение нейтронов можно описать небольшим количеством угловых моментов.

Отметим, что для рассматриваемой задачи сетка для МПГ будет нерегулярной – наряду с четырьмя ячейками одинаковых размеров на краях системы будут урановые ячейки другого размера, но МПГ легко справляется с такой ситуацией. В нижеследующей табл. 4 приведены и четные МПГ-приближения, чтобы показать (по аналогии с методом сферических гармоник) различия между результатами, полученными при сшивке на границах ячеек «чистых» четных моментов (нечетные приближения), и полученными при сшивке в четных приближениях «уровней» (комбинаций соседних четных моментов).

Из данных табл. 4 видны ожидаемые результаты в части метода сферических гармоник, а именно: в нечетных приближениях условия Марка несколько проигрывают условиям Маршака (до 1% в коэффициенте размножения в  $P_1$ -приближении, но с ростом номера приближения этот проигрыш становится совершенно незначимым – около 0.02% в  $P_9$ -приближении).

Таблица 4

Отклонение коэффициента размножения от реперного значения (в  $10^{-5}$ )

№	Вариант с 5 U-пластинами				Вариант с 11 U-пластинами			
	Маршак		Марк		Маршак		Марк	
	МСГ	МПГ	МСГ	МПГ	МСГ	МПГ	МСГ	МПГ
1	-4014.7	-1850.6	-4993.8	-2772.9	-2351.3	-797.5	-2939.2	-1366.4
2	13288.3	2100.3	13153.1	2054.7	19863.3	521.0	19839.0	488.9
3	-1913.0	-338.1	-2233.0	-639.6	-1314.3	-72.6	-1412.0	-169.4
4	12182.4	462.8	12146.9	420.1	10395.2	89.4	10378.3	69.9
5	-1425.2	-94.6	-1537.4	-201.7	-1142.6	-19.7	-1173.7	-50.5
6	7779.3	142.5	7753.2	113.1	6756.8	32.1	6747.1	21.5
7	-1213.4	-34.5	-1260.4	-79.8	-1028.5	-8.8	-1042.3	-22.5
8	5534.8	55.8	5517.3	36.7	4859.7	15.8	4853.9	9.5
9	-1071.7	-15.1	-1095.0	-37.7	-928.0	-4.7	-928.0	-12.1
10	4192.4	–	4180.5	–	3707.0	–	3703.2	–
30	840.7	–	839.9	–	763.0	–	763.0	–
31	-322.5	–	-321.8	–	-287.8	–	-287.8	–
45	-159.1	–	-159.3	–	-142.8	–	-142.8	–
46	402.1	–	401.8	–	368.2	–	368.2	–
56	284.4	–	284.2	–	261.6	–	261.6	–
57	-87.9	–	-88.2	–	-79.3	–	-79.3	–
72	184.9	–	184.8	–	171.0	–	170.9	–
73	-36.5	–	-36.8	–	-33.1	–	-33.1	–
96	118.2	–	118.1	–	109.8	–	109.8	–
97	0.0	–	-0.1	–	0.0	–	-0.1	–

В четных приближениях МСГ условия Марка чуть предпочтительнее (улучшение меньше 0.02%), но отличия от репера по модулю существенно (в разы) больше, чем в предыдущих нечетных приближениях (и сходимость видится более медленной).

Что касается метода поверхностных гармоник, то в нечетных приближениях картина аналогична МСГ (условия Маршака предпочтительнее), но в четных приближениях в соответствии с данными табл. 4 условия Марка работают лучше, чем условия Маршака. При этом, отличия коэффициента размножения от репера по модулю меньше, чем в предыдущем нечетном МПГ-приближении с условиями Марка (а до  $L^{МПГ} \leq 6$  выигрывают и у граничных условий Маршака). Но четные приближения МПГ (и МСГ) обычно не используют, так как в четных приближениях наблюдается разрыв четных угловых моментов, в том числе, полной (проинтегрированной по направлениям полета нейтронов) плотности потока нейтронов, а это, как правило, неприемлемо для пользователей (не физично, т.е. не соответствует действительности).

Таким образом, результаты таковы, что условия Маршака, как правило, предпочтительнее использовать в методах сферических и поверхностных гармоник. Однако, при расчёте коэффициента размножения нейтронов в методе поверхностных гармоник, который, как правило, будет применяться в невысоких приближениях, условия Марка вполне конкурентоспособны с условиями Маршака (если забыть о нефизичных разрывах плотности потока нейтронов на границах ячеек).

## Заключение

В работе получены численные значения, необходимые для постановки граничных условий Марка и Маршака в виде матрицы связи четных и нечетных угловых моментов распределения нейтронов  $\Phi = -\Gamma I$  на границе системы.

Показано, что условия Маршака, как правило, предпочтительнее в методах сферических и поверхностных гармоник.

При расчёте коэффициента размножения в четных приближениях метода поверхностных гармоник, который, как правило, будет применяться в невысоких приближениях, условия Марка вполне конкурентоспособны с условиями Маршака.

## Литература

1. *Smith K.S.* Spatial Homogenization Methods for Light Water Reactor Analysis by. – Massachusetts Inst. Technol., Boston, 1980.
2. *Laletin N.I.* Basic principles for Developing Equations for Geterogeneous Reactor A. Modification of Homogenization method // Nuclear Science and Engineering. – 1983. – V. 85. – P. 133–138.
3. *Ельшин А.В.* Уточнение метода гомогенизации гетерогенного реактора / А.В. Ельшин, Н.И. Лалетин //Атомная энергия. –1977. – Т. 43, вып. 4. – С. 247–253.
4. *Белл Д.* Теория ядерных реакторов / Д. Белл, С. Глесстон. – М.: Атомиздат, 1974. – 496 с.
5. *Лалетин Н.И.* Вывод конечно-разностных уравнений гетерогенного реактора 2. Квадратная, треугольная и двойная решётка блоков: препринт ИАЭ-3458/5 / Н.И. Лалетин, А.В. Ельшин. – М., 1981.

6. *Ельшин А.В.* Получение конечно-разностных уравнений гетерогенного реактора с пространственной кинетикой // *Атомная энергия.* – 2007. – Т.103, вып. 4. – С. 222–232.
7. *Ковалишин А.А.* Алгоритм и код для расчёта граничных условий в реакторах ВВЭР / *А.А. Ковалишин, Н.И. Лалетин* // *Материалы 12 семинара по проблемам физики реакторов, Москва, 2–6 сентября 2002.* – С. 155–157.
8. *Trahan T.J.* An Asymptotic Homogenized Neutron Diffusion Approximation / *T.J. Trahan, E.W. Larsen* // *II Numerical Comparison. Proc. Physor 2012 – Advances in Reactor Physics. – Linking Research, Industry, and Education, Knoxville, Tennessee, USA.*
9. *Ельшин А.В.* Конечно-разностные уравнения для распределения нейтронов и их ценности в трёхмерном гетерогенном реакторе с неструктурированной сеткой // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов.* – 2016. – Вып. 5. – С. 36–44.
10. *Ельшин А.В.* Вакуумные граничные условия в методе поверхностных гармоник / *А.В. Ельшин, Н.В. Тенищева* // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы.* – 2017. – Вып. 1. – С. 41–47.
11. *Шишков Л.К.* Методы решения диффузионных уравнений для двумерного ядерного реактора. – Москва, 1979.
12. Mark and Marshak boundary conditions in surface harmonics method / *A.V. El'shin, K. V. Muraveva, A.I. Borisenko, A.A. Kalutik* // *J. Phys.* – 2018. – Conf. Ser. 1133 012017.