

- ние уравнения переноса в одномерных задачах/Под ред. докт. физ.-мат. наук Т.А. Гермогеновой. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1981, с. 92.
2. Волощенко А.М., Костин Е.И., Панфилова Е.И., Уткин В.А. РОЗ-6 — система программ для решения уравнения переноса в одномерных геометриях. Версия 2. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1980.
 3. Дубинин А.А., Кураченко Ю.А. Исследование применимости метода последовательных столкновений в задачах о прохождении гамма-излучения: Препринт ФЭИ-1596. — Обнинск, 1984.
 4. Дубинин А.А., Кураченко Ю.А. Эффективные алгоритмы расчета характеристик полей гамма-излучения в радиационных защитах: Препринт ФЭИ-1658. — Обнинск, 1985.

5. Кураченко Ю.А. Полуэмпирический метод расчета полей излучений в защитных композициях. — В кн.: Численное решение уравнения переноса в одномерных задачах/Под ред. докт. физ.-мат. наук Т.А. Гермогеновой. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1981, с. 137.

Статья поступила в редакцию
30 мая 1986 г.

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика и техника ядерных реакторов,
1987, вып. 8, с. 28 — 32.

УДК 621.039.538

ОПТИМАЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СХЕМЫ РЕШЕНИЯ МНОГОГРУППОВОЙ ЗАДАЧИ О ПРОХОЖДЕНИИ ФОТОНОВ

А.А. Дубинин, Ю.А. Кураченко

Рассмотрены схемы комплексного использования эффективных алгоритмов решения многогруппового уравнения переноса. Приведены результаты решения конкретных задач о прохождении фотонов через слои защиты большой оптической толщины.

OPTIMAL COMPUTATION SCHEMES OF NUMERICAL CALCULATION FOR MULTIGROUP PHOTON TRANSPORT PROBLEM. A.A. DUBININ, Yu.A. KURACHENKO. The composite schemes of effective techniques for multigroup transport equation are considered. The numerical results of specific photon deep penetration problems are presented.

ВВЕДЕНИЕ

Комбинируя различные методики, каждая из которых применяется там и тогда, где и когда она максимально эффективна, можно резко сократить объем вычислений, необходимых для решения многогрупповой задачи переноса излучения. Комплексный подход, предложенный в данной работе, опробован на задаче о прохождении фотонов "реакторного" диапазона энергии. Фиксация типа излучения не является принципиальной: полученные выводы и рекомендации носят довольно общий характер и при соответствующих модификациях могут быть использованы для решения многогрупповых задач о прохождении нейтронов. То же самое можно сказать и о геометрии задачи, так как примененные способы комбинации методик в основном определяются энергетической переменной задачи.

В расчетных исследованиях комбинированных методик удовлетворительной считалась точность не менее 10%, достигнутая для интегральных характеристик излучения (типа мощности дозы и потока энергии), и порядка 10% для дифференциальных характеристик (типа групповых потоков и углового распределения) в задачах для слоев защиты большой оптической толщины вплоть до 20 — 30 длин свободного пробега частиц "ведущей" энергетической группы.

На предыдущем этапе работы [1, 2] было получено "внешнее" обоснование основной методики — метода последовательных столкновений — посредством сопоставления получаемых результатов с результатами расчетов по программе РОЗ-6 [3] и по методу моментов [4]. Поэтому в данной работе для контроля точности предлагаемых комбинаций используются результаты, полученные по основной методике при гарантирующих сходимости расчетных параметрах (числе итераций и сетках).

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим многогрупповые уравнения переноса фотонов, падающих вдоль нормали к внутренней поверхности плоскопараллельного слоя $x \in [x_0, H]$, который пока для простоты будем считать однородным:

$$\mu \frac{\partial \psi^j}{\partial x} + \Sigma^j \psi^j(x, \mu) = \sum_{i=1}^j \int_{-1}^1 d\mu' G^{i \rightarrow j}(\mu, \mu') \psi^i(x, \mu') + \sum_{i=1}^j F^i \exp[-\Sigma^i(x - x_0)] g^{i \rightarrow j}(\mu), \quad j = 1, \dots, J. \quad (1)$$

Здесь

$$G^{i \rightarrow j}(\mu, \mu') = \int_0^{2\pi} g^{i \rightarrow j}(\mu, \mu_s) d\varphi;$$

$g^{i \rightarrow j}(\mu_s)$ — групповая индикатриса комптоновского рассеяния,

$$\mu_s = \mu\mu' + \{(1 - \mu^2)[1 - (\mu')^2]\}^{1/2} \cos(\varphi - \varphi');$$

F^i — групповая интенсивность падающих частиц; остальные обозначения стандартны.

Уравнения (1) дополним граничными условиями:

$$\psi^j(x, \mu) \Big|_{x=x_0, \mu>0} = 0; \quad \psi^j(x, \mu) \Big|_{x=N, \mu<0} = 0. \quad (2)$$

Представим $\psi^j(x, \mu)$ в виде ряда по столкновениям, выделив N первых столкновений:

$$\psi^j(x, \mu) = \sum_{n=1}^N \psi_n^j(x, \mu) + \psi_{\text{res}}^j(x, \mu), \quad (3)$$

где

$$\psi_{\text{res}}^j(x, \mu) \equiv \sum_{n=N+1}^{\infty} \psi_n^j(x, \mu).$$

Подстановка ряда (3) в уравнения (1) и соответствующая группировка членов приводит к следующим уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi_n^j}{\partial x} + \Sigma^j \psi_n^j(x, \mu) &= S_{n-1}^j(x, \mu), \quad n = 1, \dots, N; \\ \mu \frac{\partial \psi_{\text{res}}^j}{\partial x} + \Sigma^j \psi_{\text{res}}^j(x, \mu) &= \int_{-1}^1 d\mu' G^{j \rightarrow j}(\mu, \mu') \times \\ &\times \psi_{\text{res}}^j(x, \mu') + S_N^j(x, \mu) \end{aligned} \right\} j = 1, \dots, J, \quad (4a)$$

где

$$\begin{aligned} S_0^j(x, \mu) &\equiv \sum_{i=1}^j F^i g^{i \rightarrow j}(\mu) \exp[-\Sigma^j(x - x_0)]; \\ S_1^j(x, \mu) &\equiv \int_{-1}^1 d\mu' G^{j \rightarrow j}(\mu, \mu') \psi_1^j(x, \mu') + \sum_{i=1}^{j-1} \int_{-1}^1 d\mu' G^{i \rightarrow j}(\mu, \mu') \times \\ &\times \psi_1^i(x, \mu'); \\ S_k^j(x, \mu) &\equiv \int_{-1}^1 d\mu' G^{j \rightarrow j}(\mu, \mu') \psi_k^j(x, \mu'), \quad k = 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (5)$$

Разложение по столкновениям подсказывает традиционный способ решения задачи — метод последовательных столкновений (МПС), состоящий в решении уравнений (4a) для N первых столкновений в предположении $\psi_{\text{res}}^j(x, \mu) = 0$. Далее рассмотрены альтернативные комплексные алгоритмы, позволяющие получить решение исходной задачи при существенно меньших затратах.

Формально уравнения (1) и (4a), (4б) сводятся к двум типам:

уравнению с "назависимым" источником (4a)

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \Sigma \psi(x, \mu) = S(x, \mu); \quad (6)$$

уравнению, содержащему источник, зависящий от решения

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \Sigma \psi(x, \mu) = S(x, \mu) + Q[\psi], \quad (7)$$

где $Q[\psi] \equiv \int_{-1}^1 d\mu' G(\mu, \mu') \psi(x, \mu')$, $G(\mu, \mu')$ — внутригрупповая индикатриса рассеяния (несущественные индексы пока опущены).

Ясно, что наличие члена $Q[\psi]$ порождает основные трудности при решении как исходных уравнений (1), так и уравнений для остатка ряда по столкновениям (4б).

2. МЕТОД "РАССЕЯНИЕ ПРЯМО-ВПЕРЕД"

Упростим уравнение (7), сделав следующее предположение. Пусть фотоны, рассеявшиеся в пределах энергетического интервала данной группы, не изменяют направление своего движения, т.е.

$$G^{j \rightarrow j}(\mu, \mu') = \Sigma_s^{j \rightarrow j} \delta(\mu' - \mu). \quad (8)$$

Тогда уравнение (7) существенно упростится и по форме совпадет с уравнением (6):

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \tilde{\Sigma} \psi(x, \mu) = S(x, \mu), \quad (9)$$

где $\tilde{\Sigma}$ — групповое сечение увода:

$$\tilde{\Sigma}^j \equiv \Sigma^j - \Sigma_s^{j \rightarrow j}. \quad (10)$$

Изложенная методика "рассеяние прямо-вперед" (МПВ), основанная на предположении (8), применима для высокоэнергетических частиц с анизотропной индикатрисой рассеяния и достаточно "узких" энергетических групп. Преимущество методики МПВ перед МПС очевидно: решение для данной группы по методике МПВ достигается однократным интегрированием; методика же МПС_N требует N итераций, где N — число учитываемых столкновений в группе.

Применение методики МПВ для расчета характеристик излучения в нижележащих энергетических группах приводит к значительному завышению результатов. В то же время для нижележащих групп индикатриса рассеяния (и соответственно решение) слабее зависит от угла и сброс энергии при рассеянии обычно гораздо меньше энергетической ширины группы. Для этих групп целесообразно выделить несколько первых столкновений по схеме (4a) и учесть остаток ряда (4б), например, с помощью низших приближений метода сферических гармоник.

3. МЕТОД СФЕРИЧЕСКИХ ГАРМОНИК

Применим к уравнению (7) метод сферических гармоник (МСГ). Решение будем искать в виде ряда

$$\psi^j(x, \mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \Phi_k^j(x) P_k(\mu). \quad (11)$$

Выполнив стандартные процедуры МСГ, получим систему уравнений:

$$m \frac{d\Phi_{m-1}^j}{dx} + (m+1) \frac{d\Phi_{m+1}^j}{dx} + (2m+1) \Sigma^j \Phi_m^j(x) = (2m+1) [S_m^j(x) + Q_m^j(x)]. \quad (12)$$

Здесь

$$S_m^j = 2\pi \int_{-1}^1 S^j(x, \mu) P_m(\mu) d\mu; \quad (13)$$

$$Q_m^j = 2\pi \Phi_m^j \int_{-1}^1 g^{j \rightarrow j}(\xi) P_m(\xi) d\xi \equiv \Phi_m^j \Sigma_{S_m}^{j \rightarrow j}.$$

В уравнениях (12) положим $m = 0, 1$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\Phi_1^j}{dx} + [\Sigma^j - \Sigma_{s_0}^{j \rightarrow j}] \Phi_0^j(x) &= S_0^j(x); \\ \frac{1}{3} \frac{d\Phi_0^j}{dx} + \frac{2}{3} \frac{d\Phi_2^j}{dx} + [\Sigma^j - \Sigma_{s_1}^{j \rightarrow j}] \Phi_1^j(x) &= S_1^j(x). \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Пренебрегая производной второго момента $d\Phi_2^j/dx = 0$, получим уравнения P_1 -приближения МСГ:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\Phi_1^j}{dx} + \Sigma_0^j \Phi_0^j(x) &= S_0^j(x); \\ \frac{1}{3} \frac{d\Phi_0^j}{dx} + \Sigma_1^j \Phi_1^j(x) &= S_1^j(x). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Уравнения (14) могут быть записаны и следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\Phi_1^j}{dx} + \Sigma_0^j \Phi_0^j(x) &= S_0^j(x); \\ \beta^j(x) \frac{d\Phi_0^j}{dx} + \Sigma_1^j \Phi_1^j(x) &= S_1^j(x), \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

где

$$\beta^j(x) \equiv \frac{1}{3} [1 + 2\alpha^j(x)] \equiv \frac{1}{3} \left[1 + 2 \frac{d\Phi_2^j/dx}{d\Phi_0^j/dx} \right]. \quad (17)$$

Учет второго момента в уравнениях (14) должен, в принципе, повысить точность расчета по МСГ при большой оптической толщине слоя. Формально уравнения (15) и (16) близки, т.е. алгоритм решения уравнений (16) может быть получен незначительной модификацией алгоритма решения уравнений (15). Подход, демонстрируемый выражениями (16), (17), привлекателен еще и тем, что значение $\alpha^j(x)$ определяется отношением производных родственных величин, т.е. $\alpha^j(x)$ — слабо меняющаяся и по энергии, и по пространству функция. Последнее обстоятельство допускает известную свободу выбора "пробной функции" F^j для оценки $\alpha^j(x)$:

$$\alpha^j(x) \equiv \frac{d\Phi_2^j/dx}{d\Phi_0^j/dx} \approx \frac{dF_2^j/dx}{dF_0^j/dx}. \quad (18)$$

Налицо по крайней мере две возможности (см. (4а), (4б)):

P_{s_1} -приближение

$$\alpha^j(x) \approx \tilde{\alpha}^j(x) = \frac{d(S_N^j)_2/dx}{d(S_N^j)_0/dx};$$

$$(S_N^j)_0 \equiv 2\pi \int_{-1}^1 S_N^j(x, \mu) d\mu; \quad (19)$$

$$(S_N^j)_2 \equiv \pi \int_{-1}^1 (3\mu^2 - 1) S_N^j(x, \mu) d\mu;$$

P_{ψ_1} -приближение

$$\alpha^j(x) \approx \tilde{\alpha}^j(x) = \frac{d(\psi_N^j)_2/dx}{d(\psi_N^j)_0/dx};$$

$$(\psi_N^j)_0 \equiv 2\pi \int_{-1}^1 \psi_N^j(x, \mu) d\mu; \quad (20)$$

$$(\psi_N^j)_2 \equiv \pi \int_{-1}^1 (3\mu^2 - 1) \psi_N^j(x, \mu) d\mu.$$

Оба приближения, вообще говоря, завышают анизотропию по сравнению с P_1 -приближением, причем P_{ψ_1} -приближение — в большей степени. Но это завышение "работает" в нужную сторону, так как известно, что низшие приближения МСГ занижают значения потока на больших расстояниях от источника.

Описанные методики позволяют конструировать различные расчетные "цепочки", оптимизация которых может существенно снизить затраты на решение многогрупповой задачи. Общая схема "цепочки" из предлагаемых методик такова:

$$\text{МПВ}^{i \div j_1} + \text{МПС}_{N_1}^{j_1 + i \div j_2} + [\text{МПС}_{N_2} + P_{\psi_1}]^{j_2 + i \div j_3} + \quad (21)$$

$$+ [\text{МПС}_{N_3} + P_{s_1}]^{j_3 + i \div j_4} + [\text{МПС}_{N_4} + P_1]^{j_4 + i \div j_5} + P_1^{j_5 + i \div J}.$$

В выражении (21) верхние индексы указывают диапазоны энергетических групп, для которых применяются соответствующие методики. Ясно, что реальный расчет обязательно должен начинаться с методики МПВ, некоторые звенья могут отсутствовать в расчете и т.д.

4. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МПС_N И МПВ

Решение уравнений типа (6) с граничными условиями типа (2) наиболее эффективно для плоскопараллельной геометрии методом характеристик (МХ). Возможны два подхода (для простоты изложения рассмотрим однородный слой $x \in [x_0, H]$).

1. Обращение дифференциального оператора:

$$\psi(x, \mu > 0) = - \frac{1}{\mu} \int_{x_0}^x S(x', \mu) \exp\left(-\frac{\Sigma(x-x')}{\mu}\right) dx'; \quad (22)$$

$$\psi(x, \mu < 0) = \frac{1}{|\mu|} \int_x^H S(x', \mu) \exp\left(-\frac{\Sigma(x' - x)}{|\mu|}\right) dx'. \quad (23)$$

Это методика MXS (S – интегральная). Интегрирование выполняется вдоль характеристик для дискретного набора независимых пространственных узлов.

2. "Разностная" методика MXD (D – дифференциальная); решение на сетке $\{x_m\}$, $m = 0, \dots, M$, $x_M = H$, получается последовательным переходом по узлам от x_0 к x_M (для $\mu > 0$) и в обратном направлении (для $\mu < 0$):

$$\psi(x_{m+1}, \mu > 0) = \psi(x_m, \mu) \exp\left(-\frac{\Sigma}{\mu} \Delta x_{m+1}\right) + \frac{1}{\mu} \int_{x_m}^{x_{m+1}} S(x', \mu) \times \exp\left(-\frac{\Sigma(x_{m+1} - x')}{\mu}\right) dx'; \quad (24)$$

$$\psi(x_0, \mu) = 0, \quad m = 0, 1, \dots, M - 1;$$

$$\psi(x_m, \mu < 0) = \psi(x_{m+1}, \mu) \exp\left(-\frac{\Sigma}{|\mu|} \Delta x_{m+1}\right) + \frac{1}{|\mu|} \int_{x_m}^{x_{m+1}} S(x', \mu) \times \exp\left(-\frac{\Sigma(x' - x_m)}{|\mu|}\right) dx'; \quad (25)$$

$$\psi(x_M, \mu) = 0, \quad m = M - 1, \dots, 0.$$

Вычисления по обеим методикам выполняются для набора характеристик $\{\mu_i\}$, $i = 1, \dots, I$. Реализованы линейная, экспоненциальная и кубическая сплайн-интерполяции подынтегральной функции на отрезке интегрирования (MXS) или на шаге расчетной сетки (MXD).

Соотношение затрат на вычисления по методикам $t(\text{MXS})/t(\text{MXD}) \approx N/4$ говорит в пользу методики MXD. Но методика MXS обладает определенными достоинствами, важнейшее из которых – отсутствие корреляции между узлами вычисления интегралов: нет накопления ошибки вычислений, узлы вычислений могут быть расположены произвольно.

Алгоритмы MXS и MXD наделены простейшими адаптивными свойствами, позволяющими сокращать затраты на решение задачи.

1. Вычисление интегралов (22), (23) по методике MXS выполняется до их сходимости, а не до формального верхнего предела.

2. В алгоритме MXD активно используются следующие обстоятельства:

а) выраженный пространственный максимум функции распределения источников (положение которого определяется "номером" столкновения) и строго экспоненциальный спад функции распределения на расстоянии 1,5 – 2 длины свободного пробега от этого максимума к поверхности $x = H$; алгоритм "отслеживает" положение максимума и автоматически увеличивает шаг после его прохождения;

б) консервативность углового распределения функции источников в пространственных узлах (для фиксированных номеров столкновения и группы). Алгоритм ав-

томатически "вырезает" значимую часть пучка характеристик, для которых только и выполняются вычисления.

Уменьшение затрат на вычисление достигается также в результате оптимального выбора структуры и размерности сетки характеристик. Показано [1, 2], что при использовании специально усредненной по полярному углу индикатрисы комптоновского рассеяния составная сетка характеристик, ориентированная в направлении преимущественного переноса $\mu \sim 1$, при суммарной размерности 9 гауссовых узлов (распределенных в трех подынтервалах) является универсальной для задач переноса фотонов "реакторного" диапазона энергии. Такая сетка обеспечивает требуемое качество расчета вплоть до значительных толщин слоя: 20 – 30 длин свободного пробега частиц ведущих групп.

5. РЕШЕНИЕ P₁-УРАВНЕНИЙ

Разностные аналоги уравнений (16) получаются на равномерной по слою сетке $\{x_k\}$, $k = 0, \dots, K$, включающей узлы на поверхностях слоев; в пределах слоя величины Σ_0 и Σ_1 постоянны. На эту же сетку интерполируется решение ψ или источник S , полученные по методике МПС. Требуемые производные аппроксимируются по формулам "сглаживающего" дифференцирования:

$$\left(\frac{dF_{0,2}}{dx}\right)_k = \begin{cases} (2 \Delta x)^{-1} [-3F_k + 4F_{k+1} - F_{k-2}], & k = 0; \\ (12 \Delta x)^{-1} [F_{k+3} - 6F_{k+2} + 18F_{k+1} - 10F_k - 3F_{k-1}], & k = 1; \\ (12 \Delta x)^{-1} [F_{k-2} - F_{k+2} - 8(F_{k-1} - F_{k+1})], & k = 2, \dots, K - 2; \\ (12 \Delta x)^{-1} [3F_{k+1} + 10F_k - 18F_{k-1} + 6F_{k-2} - F_{k-3}], & k = K - 1; \\ (2 \Delta x)^{-1} [F_{k-2} - 4F_{k-1} + 3F_k], & k = K \end{cases} \quad (26)$$

(нумерация в пределах слоя).

Запишем систему P₁-уравнений, переобозначив для удобства моменты $\omega \equiv \Phi_0, \nu \equiv \Phi_1$:

$$\left. \begin{aligned} \nu' + \Sigma_0 \omega &= S_0; \\ \beta \omega' + \Sigma_1 \nu &= S_1 \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

с граничными условиями P₁-приближения:

$$\frac{1}{2} \omega + \nu = 0, \quad x = x_0; \quad \frac{1}{2} \omega - \nu = 0, \quad x = H. \quad (28)$$

Для получения разностных аналогов системы (27), (28) необходимо проинтегрировать оба уравнения (27) по отрезку $x \in [x_{k-1}, x_k]$. Запишем интеграл для первого члена левой части второго уравнения:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \beta \omega' dx = \beta \omega \Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - \int_{x_{k-1}}^{x_k} \omega \beta' dx. \quad (29)$$

Как уже упоминалось, β — слабая функция x , поэтому положим:

$$\beta'(x \in [x_{k-1}, x_k]) \approx \text{const для } x \in [x_{k-1}, x_k] = (\beta_k - \beta_{k-1}) / \Delta x_k. \quad (30)$$

При интегрировании уравнений (27) применим квадратную формулу Эйлера, обеспечивающую при достаточной гладкой подынтегральной функции локально четвертый порядок точности:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} z dx = \frac{z_{k-1} + z_k}{2} \Delta x_k + \frac{(\Delta x_k)^2}{12} \left[\left(\frac{dz}{dx} \right)_{k-1} - \left(\frac{dz}{dx} \right)_k \right] + O[(\Delta x_k)^5]. \quad (31)$$

После группировки членов получаем:

$$\left. \begin{aligned} \frac{P_k}{\beta_k} \nu_k - \frac{P_{k-1}}{\beta_{k-1}} \nu_{k-1} + \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Delta x_k}{2} (\omega_k + \omega_{k-1}) &= Q_{0k}; \\ \omega_k P_k - \omega_{k-1} P_{k-1} + \frac{\Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k}{2} (\nu_k + \nu_{k-1}) &= Q_{1k}. \end{aligned} \right\} (32)$$

В уравнениях (32):

$$P_k = \beta_k + \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Sigma_{1k-1/2} (\Delta x_k)^2}{12}; \quad P_{k-1} = \beta_{k-1} + \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Sigma_{1k-1/2} (\Delta x_k)^2}{12};$$

$$Q_{0k} = \bar{S}_{0k} + \frac{\Sigma_{0k-1/2} (\Delta x_k)^2}{12} \left[\frac{S_{1k}}{\beta_k} - \frac{S_{1k-1}}{\beta_{k-1}} \right];$$

$$Q_{1k} = \bar{S}_{1k} + \frac{\Sigma_{1k-1/2} (\Delta x_k)^2}{12} [S_{0k} - S_{0k-1}];$$

$$\bar{S}_{0k} = \int_{x_{k-1}}^{x_k} S_0(x) dx = \frac{S_{0k} - S_{0k-1}}{\ln \frac{S_{0k}}{S_{0k-1}}} \Delta x_k;$$

$$\bar{S}_{1k} = \int_{x_{k-1}}^{x_k} S_1(x) dx = \frac{S_{1k} + S_{1k+1}}{2} \Delta x_k.$$

Дробный индекс соответствует тому, что величина Σ_0 или Σ_1 берется в середине интервала интегрирования. Отметим, что знакопостоянная функция S_0 аппроксимируется на интервале экспонентой, знакопеременная функция S_1 — линейной по x функции.

Из уравнений (32) выразим ν_k, ν_{k-1} через ω_k, ω_{k-1} :

$$\nu_k = [Q_{0k} + \frac{2P_{k-1} Q_{1k}}{\beta_{k-1} \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k} - A_k \omega_k - B_k \omega_{k-1}] \times E_k^{-1}; \quad (33a)$$

$$\nu_{k-1} = [-Q_{0k} + \frac{2P_k Q_{1k}}{\beta_k \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k} + C_k \omega_k + D_k \omega_{k-1}] \times E_k^{-1}. \quad (33b)$$

Здесь

$$A_k = \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Delta x_k}{2} + \frac{2P_{k-1} P_k}{\beta_{k-1} \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k};$$

$$B_k = \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Delta x_k}{2} - \frac{2P_{k-1}^2}{\beta_{k-1} \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k};$$

$$C_k = \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Delta x_k}{2} - \frac{2P_k^2}{\beta_k \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k};$$

$$D_k = \frac{\Sigma_{0k-1/2} \Delta x_k}{2} + \frac{2P_k P_{k-1}}{\beta_k \Sigma_{1k-1/2} \Delta x_k}; \quad E_k = \frac{P_k}{\beta_k} + \frac{P_{k-1}}{\beta_{k-1}}.$$

В уравнении (33б) перейдем от $k-1$ к k и приравняем получившееся уравнение к уравнению (33а). Получим трехточечное уравнение для ω :

$$-a_k \omega_{k+1} + b_k \omega_k - c_k \omega_{k-1} = d_k, \quad k = 0, \dots, K. \quad (34)$$

Здесь нумерация сквозная для всей системы и K — полная размерность разностной сетки. Для получения коэффициентов в узлах на границах системы используются разностные аналоги граничных условий (28). Запишем коэффициенты для различного положения узла.

1. Узел на внутренней поверхности $k=0$:

$$a_0 = 0; \quad b_0 = \frac{1}{2} + \left[\frac{2P_0 P_1}{\beta_1 \Sigma_1 \Delta x} + \frac{\Sigma_0 \Delta x}{2} \right] \times G_1; \quad (35)$$

$$c_0 = \left[\frac{2P_1^2}{\beta_1 \Sigma_1 \Delta x} - \frac{\Sigma_0 \Delta x}{2} \right] \times G_1; \quad d_0 = \left[Q_{01} - \frac{2P_1 Q_{11}}{\beta_1 \Sigma_1 \Delta x} \right] \times G_1.$$

Здесь

$$G_1 = \left[2 + \frac{\Sigma_0 \Sigma_1 (\Delta x)^2}{12} \left(\frac{1}{\beta_0} + \frac{1}{\beta_1} \right) \right]^{-1}.$$

2. Узел на поверхности раздела слоев $k=l$:

$$a_l = \left[\frac{2P_{l+1}^2}{\beta_{l+1} (\Sigma_1 \Delta x)^+} - \frac{(\Sigma_0 \Delta x)^+}{2} \right] \times G_{l+1};$$

$$c_l = \left[\frac{2P_{l-1}^2}{\beta_{l-1} (\Sigma_1 \Delta x)^-} - \frac{(\Sigma_0 \Delta x)^-}{2} \right] \times G_l;$$

$$b_l = \left[\frac{2P_{l+1} P_l^+}{\beta_{l+1} (\Sigma_1 \Delta x)^+} + \frac{(\Sigma_0 \Delta x)^+}{2} \right] \times G_{l+1} + \left[\frac{2P_l^- P_{l-1}}{\beta_{l-1} (\Sigma_1 \Delta x)^-} + \frac{(\Sigma_0 \Delta x)^-}{2} \right] \times G_l;$$

$$d_l = \left[Q_{0l+1} - \frac{2P_{l+1} Q_{l+1}}{\beta_{l+1} (\Sigma_1 \Delta x)^+} \right] \times G_{l+1} + \left[Q_{0l} + \frac{2P_{l-1} Q_{l-1}}{\beta_{l-1} (\Sigma_1 \Delta x)^-} \right] \times G_l. \quad (36)$$

Здесь

$$G_{l+1} = \left\{ 2 + \frac{(\Sigma_0 \Sigma_1 (\Delta x)^2)^+}{12} \left[\frac{1}{\beta_{l+1}} + \frac{1}{\beta_l} \right] \right\}^{-1};$$

$$G_l = \left\{ 2 + \frac{(\Sigma_0 \Sigma_1 (\Delta x)^2)^-}{12} \left[\frac{1}{\beta_l} + \frac{1}{\beta_{l-1}} \right] \right\}^{-1}.$$

Комплексы со знаками + и - отвечают величинам, взятым соответственно для "правого" и "левого" слоя. Выражения для узлов внутри однородного слоя несколько упрощаются, но неравенство $a_l \neq c_l$ сохраняется. Отметим, что при $\beta = \text{const} = 1/3$ (т.е. "чистое" P_1 -приближение) коэффициенты a_l , b_l и c_l постоянны внутри однородного слоя и $a_l = c_l$.

3. Узел на внешней поверхности $k = K$:

$$a_K = \left[\frac{2P_{K-1}^2}{\beta_{K-1} \Sigma_1 \Delta x} - \frac{\Sigma_0 \Delta x}{2} \right] \times G_K; \quad b_K = \frac{1}{2} + \left[\frac{2P_{K-1} P_K}{\beta_{K-1} \Sigma_1 \Delta x} + \frac{\Sigma_0 \Delta x}{2} \right] \times G_K;$$

$$c_K = 0; \quad d_K = \left[Q_{0K-1} + \frac{2P_{K-1} Q_{1K-1}}{\beta_{K-1} \Sigma_1 \Delta x} \right] \times G_K. \quad (37)$$

Здесь

$$G_K = \left[2 + \frac{\Sigma_0 \Sigma_1 (\Delta x)^2}{12} \left(\frac{1}{\beta_K} + \frac{1}{\beta_{K-1}} \right) \right]^{-1}.$$

Уравнения (34) с коэффициентами (35) - (37) решаются методом матричной факторизации ("прогонки" [5]). После вычисления ω_k , $k = 0, \dots, K$ по формуле (33а) вычисляются значения ν_k , $k = 1, \dots, K-1$, а значения ν_0 и ν_K получаются непосредственно из граничных условий (28).

Если P_1 -алгоритм используется внутри "цепочки" (см. (21)), то из значений Φ_0 и Φ_1 , полученных по P_1 -схеме, восстанавливается решение

$$\psi(x, \mu) = \frac{1}{2} [\Phi_0(x) + 3\mu \Phi_1(x)], \quad (38)$$

необходимое для нижележащих групп.

6. ПРИМЕРЫ КОМПЛЕКСНОГО ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДИК

Для проведения расчетно-методических исследований по комбинированным методикам была создана программа ФОРАП. Программа написана на языке ФОРТРАН для ЭВМ БЭСМ-6; обладает собственным константным сервисом; параметры расчета (количество групп, размерности сеток и пр.) допускают широкие диапазоны варьирования.

В табл. 1 и 2 представлены некоторые результаты, полученные с помощью программы ФОРАП. Их совокупность иллюстрирует вывод о том, что оптимальное сочетание разработанных методик позволяет при расчете ограничиться минимальным количеством обращений к трудоемким методикам МПС_N, активно используя однократное интегрирование по методике МПВ и вычисления по гораздо менее трудоемким методикам МСГ. При оптимальном сочетании методик суммарное число итераций (т.е. количество интегрирований) в расчете примерно равно количеству энергетических групп.

Т а б л и ц а 1. Отношения групповых значений плотностей потоков (%; методики 2 - 8) к их точным значениям (отн.ед.; методика 1) на внешней поверхности слоя воды, облучаемого мононаправленным лучком фотонов с энергией 1 МэВ, и значения потока энергии фотонов

Номер комбинации методик	Номер энергетической группы и диапазон энергии, МэВ					Ф _Е , отн.ед.
	1 (1,25 - 0,75)	2 (0,75 - 0,35)	3 (0,35 - 0,15)	4 (0,15 - 0,08)	5 (0,08 - 0,04)	
<i>Толщина слоя воды 140,5 см (10 длин свободного пробега)</i>						
1	2,57	4,14	7,73	11,3	17,8	9,15
2	74	70	74	75	78	6,72
3	97	96	96	96	97	8,81
4	100	99	99	98	99	9,06
5	101	88	90	90	91	8,48
6	112	98	99	98	98	9,35
7	101	93	94	94	94	8,75
<i>Толщина слоя воды 351,25 см (25 длин свободного пробега)</i>						
1	4,70	8,91	17,4	26,5	43,7	19,6
2	23	21	22	23	24	4,41
3	60	60	62	63	64	12,1
4	87	86	87	88	88	17,1
5	101	75	78	78	78	16,2
6	237	157	159	154	150	34,1
7	102	83	84	84	84	17,2

Примечания: 1. В таблице пронумерованы следующие методики: МПС₅₀^{1±5} - "точное" решение (1); (МПС₁ + P₁)^{1±5} (2); (МПС₃ + P₁)^{1±5} (3); (МПС₅ + P₁)^{1±5} (4); (МПС₁ + P_{sl})^{1±5} (5); (МПС₁ + P_{ψ1})^{1±5} (6); (МПС₁ + P_{sl})¹ + (МПС₁ + P_{ψ1})^{2±5} (7).

2. Результаты получены при помощи различных комбинаций многогрупповых методик (при E₀ = 1 МэВ); интегрирование выполнялось по методике MXD.

Таблица 2. Отношения групповых значений плотностей потоков (%) методики 2 – 4 и 6 – 8 к их точным значениям (отн. ед.; методики 1, 5) на внешних поверхностях слоев железа и воды

Номер энергетической группы	Диапазон энергии, МэВ	Номер комбинации методик							
		1	2	3	4	5	6	7	8
		Железо (толщина слоя 85,7 см)				Вода (толщина слоя 823,7 см)			
1	9 – 7	3,73	99	106	106	4,91	97	108	108
2	7 – 5,5	3,39	96	107	107	3,12	95	110	110
3	5,5 – 4,5	2,85	96	106	106	2,06	95	110	110
4	4,5 – 3,5	3,61	95	107	107	2,14	95	111	111
5	3,5 – 2,5	4,58	94	108	98	2,37	94	108	110
6	2,5 – 1,75	4,60	91	109	96	2,20	94	108	111
7	1,75 – 1,25	4,10	89	110	95	1,92	94	107	111
8	1,25 – 0,75	5,76	85	112	97	2,71	94	106	114
9	0,75 – 0,35	7,10	90	122	101	3,27	96	109	125
10	0,35 – 0,15	4,31	94	145	105	2,37	99	116	174
						(2,39)			
	Φ_E , отн. ед.	120	114	129	124	97,4	93,0	106	107

Примечания: 1. В таблице пронумерованы следующие комбинации методик: $MPC_{25}^{1 \div 10}$ – "точное" решение (1); $(MPC_2 + P_1)^{1 \div 5} + (MPC_1 + P_1)^6 + P_1^{7 \div 10}$ (2); $MPC_1^{1 \div 10}$ (3); $MPC_1^{1 \div 4} + (MPC_1 + P_1)^{5 \div 7} + P_1^{7 \div 10}$ (4) – для железа и $(MPC_{10} + P_1)^{1 \div 4} + (MPC_{15} + P_1)^{5 \div 7} + (MPC_{25} + P_1)^8 + (MPC_{50} + P_1)^9 + (MPC_{75} + P_1)^{10}$ – "точное" решение (5); $(MPC_2 + P_1)^{1 \div 10}$ (6); $MPC_1^{1 \div 4} + (MPC_1 + P_1)^{5 \div 10}$ (7); $MPC_1^{1 \div 10}$ (8) – для воды.

2. Толщины слоев железа и воды соответствуют 20 длинам свободного пробега при энергии падающих фотонов $E_0 = 8$ МэВ. В нижней строке таблицы приведены значения потоков энергии Φ_E на внешних поверхностях. Результаты получены при помощи различных комбинаций многогрупповых методик; интегрирование выполнялось по методике MXS.

3. Значение в скобках для 10-й группы получено по комбинации $(MPC_5 + P_1)^{1 \div 10}$; во всех остальных группах значения, полученные по этой комбинации, совпадают с точными.

При расчете прохождения высокоэнергетических фотонов следует ориентироваться на методику МПВ в качестве ведущей; расчет прохождения фотонов с меньшей энергией целесообразно выполнять с привлечением методик МСГ. Как показывают результаты, в последнем случае также достаточно однократного интегрирования в группе.

Затраты на решение типичной задачи составляют от 30 до 60 с процессорного времени (транслятор FOREX, ИПМ АН СССР), причем затраты на собственно интегрирование весьма малы: однократное вычисление интегралов во всех пространственных узлах требует от 0,03 до 0,12 с (методика MXD).

Результаты, полученные в работе, позволяют выбрать ориентиры при реализации более сложных программных комплексов для решения практических задач.

Список литературы

1. Дубинин А.А., Кураченко Ю.А. Исследование применимости метода последовательных столкновений в задачах о прохождении гамма-излучения: Препринт ФЭИ-1596. – Обнинск, 1984.

2. Дубинин А.А., Кураченко Ю.А. Эффективные алгоритмы расчета характеристик полей гамма-излучения в радиационных защитах: Препринт ФЭИ-1658. – Обнинск, 1985.
3. Волощенко А.М., Костин Е.И., Панфилова Е.И., Уткин В.А. РОЗ-6 – система программ для решения уравнения переноса в одномерных геометриях. Версия 2. ИПМ АН СССР им. М.В. Келдыша, 1980.
4. Защита транспортных установок с ядерным двигателем/Под ред. В.В. Орлова и С.Г. Цыпина. – М.: ИЛ, 1961.
5. Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1971.

Статья поступила в редакцию
21 августа 1986 г.

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика и техника ядерных реакторов,
1987, вып. 8, с. 32 – 38.