

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Kar

Szatmáry Zoltán

Reaktorfizikai számítások

Egyetemi jegyzet

Budapest, 2010

1. HATÁSKERESZTMETSZETEK

A jelen fejezetben összefoglaljuk a reaktorfizikai számításokban felhasznált hatáskeresztmetszetek és a velük összefüggő mennyiségek (szórási magfüggvények, csoportállandók stb.) eredetét és előállításának a módját.

1.1. Evaluált hatáskeresztmetszetek

Még kidolgozandó!!!

1.2. Rugalmas szórási magfüggvények a lassulási tartományban

A reaktorfizika elemeiben [Brf] meghatároztuk a rugalmas szórási magfüggvényt a tömegközépponti rendszerben izotrop szórás esetében:

$$\Sigma_{s0}(E' \to E) = \frac{\Sigma_s(E')}{E'(1-\alpha)},$$
 ha $\alpha E' \le E \le E'$ (12.1)

ahol

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2.$$

A (12.1) alatti feltételnek eleget nem tevő *E*-re (vagyis amikor $E < \alpha E'$ vagy E > E') a magfüggvény 0. A gyakorlat igényeit is kielégítő reaktorfizikai számításokban ez a magfüggvény kevés, mert elengedhetetlen a szórási anizotrópia kellő részletességgel való leírása. Ebben az alfejezetben az ezzel kapcsolatos ismereteket foglaljuk össze.

Emlékeztetünk rá, hogy a (12.1)-ben felírt magfüggvény fizikai jelentése szerint $\Sigma_{s0}(E' \rightarrow E)dE$ annak a rugalmas szórásnak a hatáskeresztmetszete, amelyben a szóródás előtt *E'* energiájú neutron szóródás utáni energiája az (*E*, *E*+d*E*) intervallumba esik – feltéve, hogy a szórás a tömegközépponti rendszerben (TKR) izotrop. A szórás a laboratóriumi rendszerben (LR) mindig anizotrop, amit legegyszerűbb a neutron szóródás előtti és utáni sebességének irányát is kifejező magfüggvénnyel leírni:

$$\Sigma_{s}(E' \to E, \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}') dE d\mathbf{\Omega} = \Sigma_{s}(E' \to E, \mu_{0}) dE d\mathbf{\Omega}$$
(12.2)

annak a szórásnak a hatáskeresztmetszete, amelyben a szóródás előtt E' energiájú és Ω' sebességirányú neutron szóródás utáni energiája az (E, E+dE) intervallumba, sebességiránya pedig az Ω körüli d Ω térszögbe esik (vö. 12.1. ábra). Ezt a magfüggvényt eleve annak figyelembevételével írtuk fel, hogy nem függ külön-külön a két sebességiránytól, hanem csak az általuk bezárt θ szögtől.¹



12.1. ábra. Neutron szóródása a laboratóriumi rendszerben

1.2.1. Általános megjegyzések

Jóllehet a neutronszórás kvantummechanikai jelenség, a reaktorfizikában ezt legfeljebb csak a termalizáció tárgyalásakor vesszük tekintetbe, amikor a (12.2) szerinti magfüggvény az adekvát formalizmus. A lassuláselméletben mindig elhanyagoljuk a kvantummechanikai eredetű határozatlanságot. (Néha a termalizáció elméletében is alkalmazzuk ezt a közelítést.) Ekkor viszont (12.2)-vel szemben komoly ellenvetés, hogy a szórási magfüggvény csak formálisan függ külön-külön *E*-től és μ_0 -tól.

¹ Kivételek – például – az egykristályok, de ezek reaktorfizikai szerepe nem számottevő.

A reaktorfizikai elemeiből [Brf] ugyanis tudjuk, hogy adott E' mellett E kiszámítható az

$$\frac{E}{E'} = \frac{1}{2} [(1+\alpha) + (1-\alpha)\mu_{\rm c}]$$
(12.3)

képlet alapján, ahol μ_c a szórási szög koszinusza TKR-ben. μ_0 és μ_c között az alábbi összefüggés áll fenn [Brf]:

$$\mu_0 = \frac{A\mu_c + 1}{\sqrt{A^2 + 2A\mu_c + 1}} \,. \tag{12.4}$$

A 12.2. *ábrá*n bemutatjuk ezt a függvényt a szóró mag *A* tömegszámának néhány értékére.² Látható, hogy ez szigorúan monoton növekvő függvény, amelynek ennél fogva létezik az inverze:

$$\mu_{\rm c} = \frac{\mu_0^2 - 1 + \mu_0 \sqrt{A^2 + \mu_0^2 - 1}}{A}.$$
(12.5)

E' és μ_0 függvényében tehát *E* egyértelműen kiszámítható, vagyis a szórási magfüggvényt $\Sigma_s(E',\mu_0)$ alakban kell felírnunk, amely μ_0 szerint valóságos sűrűségfüggvény: $\Sigma_s(E',\mu_0)d\mu_0$ annak a szórásnak a hatáskeresztmetszete, amelyben a szórási szög koszinusza LR-ben μ_0 és $\mu_0+d\mu_0$ közé esik. Ha mégis fenn akarjuk tartani a (12.2) szerinti írásmódot, akkor figyelembe kell vennünk, hogy a szórási magfüggvény az *E* változó szerint csak akkor sűrűségjellegű mennyiség, ha a magfüggvényben szerepeltetünk egy *E* szerinti δ -függvényt. Ez azonban kivezet a disztribúcióelmélet területére. Az, hogy melyik alakot célszerűbb alkalmazni, függhet a számítási módszertől.



12.2. ábra. A μ_0 és μ_c közötti függvénykapcsolat (12.4) szerint

Monte Carlo számításokban a szórási magfüggvény alapján sorsoljuk a szóródás utáni energiát és sebességirányt. Ekkor a $\Sigma_{s}(E',\mu_0)$ alak teljesen megfelelő:

a Σ_s(E', μ₀)/Σ_s(E') eloszlásból sorsolunk egy μ₀-at, és abból kapunk egy θ szórási szöget (vö. 12.1. ábra);

² A hidrogénen való szóródás (A = 1) több tekintetben is speciális eset, ezért ezzel külön részben foglalkozunk (lásd I.2.6. szakasz).

- a (12.3) és (12.5) képletek alapján ebből kiszámítjuk a szóródás utáni *E* energiát;
- végül a (0, 2π) intervallumban egyenletes eloszlásból sorsolunk egy φ azimutszöget (vö. 12.1. ábra).

Ehhez hasonlóan építhetők fel az S_N egyenletek is (V. fejezet). A P_L közelítés (4. fejezet), illetve a diffúzióelmélet (3. fejezet) esetében azonban a (12.2) szerinti alak egyértelműen leegyszerűsíti a levezetéseket. Ennek az alábbi oka van.

A transzportegyenletben a neutronlassulást

$$L(E, \mathbf{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} \Sigma_{s}(E', \mu_{0}) \mathcal{O}(E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}', \qquad (12.6a)$$

illetve

$$L(E,\mathbf{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}E' \int_{4\pi} \Sigma_{\mathrm{s}}(E' \to E, \mu_0) \Phi(E',\mathbf{\Omega}') \mathrm{d}\mathbf{\Omega}'$$
(12.6b)

alakú integrálok írják le, ahol $\Phi(E, \Omega)$ a neutronfluxus. A (12.6a) szerinti integrál kiszámításával a későbbiekben foglalkozunk. Előbb a (12.6b) integrált beszéljük meg. A fluxust általában sorba fejtjük a gömbfüggvények szerint:

$$\boldsymbol{\Phi}(E,\boldsymbol{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\boldsymbol{\Omega}) \boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(E).$$
(12.7)

Az $Y_{\ell m}$ gömbfüggvényeket a (IV.1.2) képletekkel definiáljuk. A sorfejtési együtthatókat a

$$\boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(E) = \int_{4\pi} \boldsymbol{\Phi}(E, \boldsymbol{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\boldsymbol{\Omega}) \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}$$

integrálok adják. Hasonló sorfejtést alkalmazunk a (12.6b) szerint kiszámított függvényre is:

$$L(E, \mathbf{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) L_{\ell m}(E), \qquad (12.8)$$

ahol

$$L_{\ell m}(E) = \int_{4\pi} L(E, \mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} .$$

A szórási magfüggvény (12.6b) szerinti alakjának az az előnye, hogy – legalábbis formálisan – sorba fejthetjük a $P_{\ell}(\mu_0)$ Legendre-polinomok szerint:

$$\Sigma_{s}(E' \to E, \mu_{0}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) P_{\ell}(\mu_{0}), \qquad (12.9a)$$

ahol

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \Sigma_s(E' \to E, \mu_0) P_\ell(\mu_0) d\mu_0 . \qquad (12.9b)$$

Ha ezt a sort (12.6b)-be helyettesítjük, továbbá figyelembe vesszük a

$$P_{\ell}(\mu_0) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}')$$

addíciós tételt, akkor a következőt kapjuk:

$$L(E, \mathbf{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) P_{\ell}(\mu_{0}) \mathcal{P}(E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' =$$

$$= \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}') \mathcal{P}(E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' =$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) \int_{0}^{\infty} dE' \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \mathcal{P}_{\ell m}(E').$$

(12.8) szerint ez azt jelenti, hogy

$$L_{\ell m}(E, \mathbf{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \mathcal{P}_{\ell m}(E') dE'. \qquad (12.10)$$

Konkrét számításokban a (12.7) és (12.9a) sorokat mindig levágjuk valamilyen, alkalmasan választott $\ell = L$ indexű tag után ("P_L közelítés"), tehát (12.9a) jobb oldalát *E*-nek és μ_0 -nak sima, akárhányszor differenciálható függvényével közelítjük:

$$\Sigma_{s}(E' \to E, \mu_{0}) \cong \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) P_{\ell}(\mu_{0}).$$

A bal oldalon egy δ -függvényt tartalmazó magfüggvény van, vagyis egy disztribúciót próbálunk egy sima függvénnyel közelíteni. A dolog mégsem abszurd, hiszen – mint nevük is mutatja – az utóbbi formula két oldalán szereplő *mag*függvények csak integráljel alatt szerepelnek. Így tehát valójában a baloldali magfüggvényhez tartozó *funkcionálokat* közelítjük más alakú *funkcionálokkal*, ami matematikailag korrekt.

A δ -függvény nélkül felírt magfüggvényt is sorba fejthetjük a Legendre-polinomok szerint:

$$\Sigma_{s}(E',\mu_{0}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E') P_{\ell}(\mu_{0}).$$
(12.9c)

Amikor ezt a sorfejtést a következő alfejezetben alkalmazzuk, a sorfejtési együtthatóként szereplő $\Sigma_{s\ell}(E')$ függvényeket csak akkor tudjuk használni a P_L közelítésben, ha explicit módon E' és E függvényeként adjuk meg őket, hiszen (12.10)-ben erre van szükség. Egyáltalán nem triviális azonban, hogy lehet ezt (12.9c)-ből kiindulva elérni. Mindenesetre a neutronszórás-kísérletek a magfüggvényt a (12.9c) szerinti alakban szolgáltatják. Ugyanakkor a szóráselméleti számítások μ_0 helyett a tömegközépponti rendszerhez tartozó μ_c függvényében adják meg ugyanezt. A két reprezentáció közötti átszámítás módját a következő szakaszban tárgyaljuk.

Ezt megelőzően azonban megmutatjuk, milyen matematikai nehézségekkel jár, ha a szórási magfüggvényt ilyen alakban akarjuk a P_L közelítés egyenleteibe helyettesíteni, vagyis a neutronlassulást a (12.6a) képlet szerint írjuk le. Amikor itt integrálunk, mindazokat a *szóródás előtti E'* neutronenergiákat és Ω' sebességirányokat veszszük számba, amelyek a *szóródás után* az *E* neutronenergiára és Ω sebességirányra vezethetnek. E' számára az $(E, E/\alpha)$ intervallum jön szóba, (12.6a)-ban a 0-tól ∞-ig való integrálás csak szimbolikus. Ami Ω' -t illeti, a helyzet a 12.3. *ábrá*n látható, amely a 12.1. *ábra* módosított változata: a megfelelő sebességirányok az ábrán bejelölt d Ω' kúpszögben vannak. A két határoló kúp nyílásszöge θ és θ + d θ , ahol

$$\cos\theta = \mu_0 = \frac{1}{2} \left[(A+1)\sqrt{\frac{E}{E'}} - (A-1)\sqrt{\frac{E'}{E}} \right]$$
(12.11)

és d θ megfelel a dE' differenciálnak. Ezt a képletet – némi számolás után – úgy kapjuk, hogy (12.4)-ben μ_c -t (12.3)-ból helyettesítjük be. Látható, hogy μ_0 csökken, amikor E' nő, így pozitív dE'-hez negatív d μ_0 és pozitív d θ tartozik.



12.3. ábra. Neutron szóródása a laboratóriumi rendszerben

Mivel a szórási magfüggvény független a 12.3. *ábrá*n látható kúpok tengelye körüli φ azimutszögtől, (12.6a)-ban az Ω' szerinti integráláskor a φ szerinti integrálás valójában csak a fluxusra vonatkozik, de a θ (vagy μ_0) szerinti integráláskor már figyelembe kell venni a magfüggvény szögfüggését is. E' és μ_0 között μ_0 minden értékére fenn kell állnia a (12.11) összefüggésnek, így a (12.6)-ban formálisan jelölt E' szerinti integrálásra nem kerül sor – hacsak nem akarunk E' szerint egy δ -függvényt bevezetni. Mivel most ezt el akarjuk kerülni, a (12.6a) képletet a következő alakba írjuk át:

$$L(E,\mathbf{\Omega}) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}\mu_0 \Sigma_{\mathrm{s}}(E',\mu_0) \int_{0}^{2\pi} \Phi(E',\mathbf{\Omega}') \mathrm{d}\varphi,$$

ahol E' helyére a (12.11) képlet megfordítását kell helyettesíteni. Mint mondtuk, ezt a (12.10)-ben szereplő magfüggvényeket tartalmazó alakra szeretnénk átírni, itt jobb az E' szerinti integrálásra áttérni:

$$L(E,\mathbf{\Omega}) = \int_{E}^{E/\alpha} dE' \frac{d\mu_0}{dE'} \Sigma_{s}(E',\mu_0) \int_{0}^{2\pi} \Phi(E',\mathbf{\Omega}') d\varphi,$$

ahol μ_0 helyébe a (12.11) képletet kell helyettesíteni. Ezen a formulán nem nyilvánvaló, hogyan lehet ennek a (12.87) egyenlet szerinti sorfejtését elvégezni. Nem is haladunk ezen az úton tovább. Mindössze annyit kívántunk érzékeltetni, miért részesítjük előnyben a disztribúcióelméleti megközelítést.

1.2.2. Átszámítás a TKR- és az LR-beli szögeloszlások között

A (12.6a)-ban szereplő $\Sigma_s(E',\mu_0)$ rugalmas szórási magfüggvényt célszerű a szórási hatáskeresztmetszet és a szögeloszlás (χ) szorzatára bontani:

$$\Sigma_{s}(E',\mu_{0}) = \Sigma_{s}(E')\chi(E',\mu_{0}).$$

Mint jelöltük, a szögeloszlás függ a szóródó neutron E' energiájától. Sorba fejtjük a Legendre-polinomok szerint:

$$\chi(E',\mu_0) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \omega_\ell(E') P_\ell(\mu_0).$$
(12.12)

Mivel $\ell > 0$ -ra $P_{\ell}(\mu_0)$ integrálja zérus, ez az eloszlás akkor van 1-re normálva, ha itt $\omega_0 = 1$. Ha a (12.12) sort (12.9c)-vel összevetjük, akkor látjuk, hogy

 $\Sigma_{s}(E')\omega_{\ell}(E') = (2\ell+1)\Sigma_{s\ell}(E').$

Megemlítjük, hogy $\omega_1 = 3\overline{\mu}_0$, ahol $\overline{\mu}_0$ a szórási szög koszinuszának az átlaga LRben. A többi sorfejtési együttható fizikai jelentése kevésbé szemléletes. Az alábbi módon számíthatók ki:

$$\omega_{\ell}(E') = (2\ell+1) \int_{-1}^{1} \chi(E',\mu) P_{\ell}(\mu) \, \mathrm{d}\mu, \qquad (\ell=0,\,1,\,2,\,\ldots).$$
(12.13)

Az ω_{ℓ} együtthatók *E'*-től való függésének illusztrálására a 12.4*a*.–12.4*d*. *ábrák*on bemutatjuk ω_{ℓ} -t rendre deutériumra, berilliumra, grafitra és vasra. Látható, hogy egyrészt jelentős az anizotrópia, másrészt az együtthatók energiafüggése a MeV-es energiatartományban számottevő.



12.4a. ábra. Az ω_{ℓ} sorfejtési együtthatók deutériumra (A = 2)



12.4d. ábra. Az ω_{ℓ} sorfejtési együtthatók vasra (A = 55)

A TKR-nek és LR-nek megfelelő eloszlásokat a "c", illetve "(0)" felső indexszel különböztetjük meg egymástól. A két eloszlás közötti kapcsolatot a

$$\chi^{\mathrm{c}}(E',\mu_{\mathrm{c}})\,\mathrm{d}\mu_{\mathrm{c}}=\chi^{(0)}(E',\mu_{0})\,\mathrm{d}\mu_{0}$$

feltételből számítjuk ki:

$$\chi^{\rm c}(E',\mu_{\rm c}) = \chi^{(0)}(E',\mu_0) \frac{\mathrm{d}\mu_0}{\mathrm{d}\mu_{\rm c}}, \qquad (12.14)$$

amelynek jobb oldalán μ_0 helyére a (12.4) képletet kell helyettesíteni. Sorfejtési együtthatói (12.13) analógiájára:

$$\omega_{\ell}^{c}(E') = (2\ell + 1) \int_{-1}^{1} \chi^{c}(E', \mu_{c}) P_{\ell}(\mu_{c}) d\mu_{c} = (2\ell + 1) \int_{-1}^{1} \chi^{(0)}(E', \mu_{0}) P_{\ell}(\mu_{c}) d\mu_{0}$$

Az utolsó integrálban μ_c helyére (12.4) inverze, vagyis (12.5) helyettesítendő. A fenti integrálba behelyettesítjük a (12.12) szerinti sort:

$$\omega_{\ell}^{c}(E') = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{1} \sum_{k=0}^{\infty} \omega_{k}^{(0)}(E') P_{k}(\mu_{0}) P_{\ell}(\mu_{c}) d\mu_{0} = \sum_{k=0}^{\infty} [\mathbf{T}^{-1}]_{\ell k} \omega_{k}^{(0)}(E'), \quad (12.15)$$

ahol a $[\mathbf{T}^{-1}]_{\ell k}$ együttható a \mathbf{T}^{-1} mátrix (ℓ, k) eleme:

$$\left[\mathbf{T}^{-1}\right]_{\ell k} = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{1} P_k(\mu_0) P_\ell(\mu_c) \,\mathrm{d}\mu_0 \,. \tag{12.16}$$

Emlékeztetünk rá, hogy az integrálban μ_c helyére a (12.5) képletet kell helyettesíteni:

$$\left[\mathbf{T}^{-1}\right]_{\ell k} = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{1} P_k(\mu_0) P_\ell\left(\frac{\mu_0^2 - 1 + \mu_0 \sqrt{A^2 + \mu_0^2 - 1}}{A}\right) d\mu_0.$$

A (12.16)-ból következik, hogy a **T** mátrix elemei nem függnek *E'*-től. A (12.16) szerinti mátrixelemeket a $\gamma = 1/A$ paraméter függvényében számították ki. $\gamma < 0,5$ -re (tehát hidrogénre nem) használható az alábbi mátrix:

$$\mathbf{T}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -2\gamma & 1 - \frac{\gamma^2}{5} & \frac{2\gamma}{5} & \frac{3\gamma^2}{35} & 0 & 0 & \dots \\ 3\gamma^2 & -2\gamma & 1 - \frac{9\gamma^2}{7} & \frac{6\gamma}{7} & \frac{8\gamma^2}{21} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{16\gamma^2}{5} & -\frac{12\gamma}{5} & 1 - \frac{14\gamma^2}{5} & \frac{4\gamma}{3} & \frac{10\gamma^2}{11} & \dots \\ 0 & 0 & \frac{30\gamma^2}{7} & -\frac{20\gamma}{7} & 1 - \frac{370\gamma^2}{77} & \frac{20\gamma}{11} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$
(12.18a)

Megjegyezzük, hogy ez a mátrix a rugalmas szóráson kívül egyéb magreakciókra is használható, ha benne a

$$\gamma = \frac{1}{A} \sqrt{\frac{E_{\rm r}}{E_{\rm r} + Q}} \tag{12.17}$$

paraméter szerepel, ahol E_r a neutron és a szóró mag relatív mozgásának az energiája, Q a reakcióenergia. Rugalmas szórás esetében Q = 0, tehát ekkor $\gamma = 1/A$. A (12.15) szerinti transzformáció megfordítása

$$\omega_{\ell}^{(0)}(E') = \sum_{k=0}^{\infty} T_{\ell k} \, \omega_{k}^{c}(E').$$
(12.19)

A transzformációs mátrix a (12.18a) mátrix inverze:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 2\gamma & 1 - \frac{3\gamma^2}{5} & -\frac{2\gamma}{5} & \frac{9\gamma^2}{35} & 0 & 0 & \dots \\ \gamma^2 & 2\gamma & 1 - \frac{11\gamma^2}{7} & -\frac{6\gamma}{7} & \frac{16\gamma^2}{21} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{8\gamma^2}{5} & \frac{12\gamma}{5} & 1 - \frac{46\gamma^2}{15} & -\frac{4\gamma}{3} & \frac{50\gamma^2}{33} & \dots \\ 0 & 0 & \frac{18\gamma^2}{7} & \frac{20\gamma}{7} & 1 - \frac{390\gamma^2}{77} & -\frac{20\gamma}{11} & \dots \\ \dots & \dots & & \end{bmatrix}$$
(12.18b)

1.2.3. A rugalmas szórási magfüggvény sorfejtése

Az alábbiakban kiszámítjuk a rugalmas szórási magfüggvény sorfejtési együtthatóit a (12.9) képletek alapján. Először felírjuk az integrál alatt szereplő szögfüggő magfüggvényt. Mint az 1.2.1. szakaszban kifejtettük, ez tartalmazni fog egy δ -függvényt.

A (12.1) magfüggvényt azzal a feltevéssel kaptuk, hogy a rugalmas szórás TKR-ben izotrop, vagyis a μ_c szerinti sűrűségfüggvény egyenletes: $\chi(E',\mu_c) = 1/2$. Most elejtjük ezt a feltevést. A keresett magfüggvényt átírjuk a

$$\Sigma_{s}(E' \to E, \mu_{c}) = \Sigma_{s}(E')g(E' \to E, \mu_{c})$$

alakba, ahol

$$g(E' \to E, \mu_{\rm c}) dE d\mu_{\rm c}$$

két esemény együttes bekövetkezésének a valószínűsége: (1) a szóródás utáni energia az (*E*, *E*+d*E*) intervallumba, ÉS (2) a szórási szög koszinusza (μ_c , μ_c +d μ_c) közé esik TKR-ben. A (2) esemény valószínűsége – definíció szerint – $\chi(E',\mu_c)d\mu_c/2\pi$.³ *Feltéve*, hogy a (2) esemény bekövetkezik, megkeressük az (1) esemény (feltételes) valószínű-ségét. Ha μ_c adott, a szóródás utáni energiát (12.3)-ból számíthatjuk ki:

³ Azért osztunk 2 π -vel, mert a későbbiekben az egységnyi *térszög*re vonatkozó valószínűségre lesz szükségünk, amit $\chi(E', \mu_c)/2\pi$ ad meg.

$$E(\mu_{\rm c}) = \frac{E'(1+\alpha)}{2} + \frac{E'(1-\alpha)}{2}\mu_{\rm c},$$

tehát az (1) esemény biztosan bekövetkezik, ha a szóródás utáni E energia kielégíti az

$$E \le E(\mu_{\rm c}) \le E + {\rm d}E$$

egyenlőtlenséget. A keresett feltételes valószínűség ekkor 1, egyébként pedig 0. Mivel e kijelentés tetszőlegesen kicsi dE mellett is érvényes, az (1) eseménynek a (2) eseményre vonatkozó feltételes valószínűségét a

$$P\{(1)(2)\} = \delta(E - E(\mu_c)) dE = \delta\left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \frac{E'(1-\alpha)}{2}\mu_c\right) dE$$

kifejezés adja meg. Az (1) és (2) események *együttes* bekövetkezésének a valószínűsége az előbbi két valószínűség szorzata, tehát

$$g(E' \to E, \mu_{\rm c}) = \frac{\chi(E', \mu_{\rm c})}{2\pi} \delta \left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \frac{E'(1-\alpha)}{2} \mu_{\rm c} \right)$$

A transzportegyenletben a magfüggvényt inkább μ_0 függvényében felírva használjuk, ezért célszerű ezt μ_0 -ra átírni:

$$g(E' \to E, \mu_0) = \frac{\chi(E', \mu_c)}{2\pi} \frac{d\mu_c}{d\mu_0} \delta\left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \frac{E'(1-\alpha)}{2}\mu_c\right),$$
 (12.20)

ahol μ_c helyébe (12.5)-öt kell helyettesíteni. Ennek felhasználásával számíthatjuk ki a keresett együtthatókat, vagyis a rugalmas szórási magfüggvény (12.9b) szerinti momentumait:

$$\begin{split} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) &= \int_{4\pi} \Sigma_s(E' \to E, \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}') P_\ell(\mu_0) d\mathbf{\Omega}' = \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 \frac{\Sigma_s(E')}{2\pi} \frac{d\mu_c}{d\mu_0} \delta \left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \frac{E'(1-\alpha)}{2} \mu_c \right) P_\ell(\mu_0) \chi(E', \mu_c) d\mu_0 \,. \end{split}$$

Mint korábban, ebben az integrálban is a (12.5) képlet helyettesítendő μ_c helyére. Az integrálást egyszerűsíthetjük, ha μ_0 -t μ_c -re helyettesítjük:

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \Sigma_s(E') \int_{-1}^1 \delta\left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \frac{E'(1-\alpha)}{2}\mu_c\right) P_\ell(\mu_0)\chi(E',\mu_c) d\mu_c.$$

Itt viszont μ_0 -t kell μ_c -vel kifejezni a (12.4) képlet szerint. Mivel *E'* a μ_c szerinti integrálás szempontjából állandó, $\Sigma_s(E')$ -t kiemelhettük az integráljel alól. A δ -függvény definíciója szerint az integrál értéke megegyezik a δ -függvény mellett álló függvénynek az integrálási változó olyan értéke mellett felvett értékével, amelyre a δ -függvény argumentuma eltűnik, de nulla az integrál, ha az integrálási változónak nincs ilyen értéke az integrálási tartományban. Nos, ez az állítás akkor igaz, ha a δ -függvény argumentumában az integrálási változó (esetünkben μ_c) együtthatója 1-gyel egyenlő. Most azonban nem ez a helyzet, tehát az integrált a

$$\mu = \frac{E'(1-\alpha)}{2}\mu_{\rm c}, \qquad \mu_{\rm c} = \frac{2\mu}{E'(1-\alpha)}, \qquad d\mu_{\rm c} = \frac{2d\mu}{E'(1-\alpha)}$$
(12.21)

helyettesítéssel ilyen alakúvá alakítjuk át:

_.(

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \frac{2\Sigma_s(E')}{E'(1-\alpha)} \int_{-\frac{E'(1-\alpha)}{2}}^{\frac{E'(1-\alpha)}{2}} \delta\left(E - \frac{E'(1+\alpha)}{2} - \mu\right) \chi\left(E', \frac{2\mu}{E'(1-\alpha)}\right) P_\ell(\mu_0) d\mu.$$

A szóródás utáni *E* energia szóba jövő értékeire fennállnak a következő egyenlőtlenségek: az alsó integrálási határnál a δ -függvény argumentuma $E - \alpha E' \ge 0$, a felső határnál pedig $E - E' \le 0$, tehát a szórás minden kimenetele esetén van olyan közbenső μ , amelyre az integrálban a δ -függvény argumentuma eltűnik. Így tehát az integrált úgy kapjuk meg, hogy a δ -függvény mellett álló χ -függvénybe μ -nek ezt a közbenső értékét helyettesítjük:

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \frac{2\Sigma_s(E')}{E'(1-\alpha)} \chi \left(E', \frac{2\mu}{E'(1-\alpha)}\right) P_\ell(\mu_0) \Big|_{\mu = E - \frac{E'(1+\alpha)}{2}} =$$
$$= \frac{\Sigma_s(E')}{E'(1-\alpha)} 2\chi(E', \mu_c) P_\ell(\mu_0), \qquad \text{ha} \qquad \alpha E' \le E \le E', \qquad (12.22a)$$

ahol χ argumentumában μ_c helyére

$$\mu_{\rm c} = \frac{2\mu}{E'(1-\alpha)} \bigg|_{\mu=E-\frac{E'(1+\alpha)}{2}} = \frac{2E/E' - (1+\alpha)}{1-\alpha}$$
(12.22b)

helyettesítendő (vö. (12.3)). Amikor μ_0 helyére a (12.4) képletet helyettesítjük, abban μ_c helyére szintén ezt kell írni. $\ell = 0$ helyettesítéssel kapjuk a (12.1) alatti magfüggvénynek anizotrop szórás mellett érvényes alakját:

$$\Sigma_{\rm s0}(E' \to E) = \frac{\Sigma_{\rm s}(E')}{E'(1-\alpha)} 2\chi(E',\mu_{\rm c}), \qquad \text{ha} \qquad \alpha E' \le E \le E', \qquad (12.23)$$

amelyben μ_c helyére a (12.22b) kifejezés helyettesítendő. Vegyük észre, hogy ha (12.23)-ba $\chi(E',\mu_c) = 1/2$ -et helyettesítünk, akkor visszakapjuk (12.1)-et.

Mind (12.22a)-ban, mind (12.23)-ban $\chi(E',\mu_c)$ helyére a

$$\chi(E',\mu_{\rm c}) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \omega_j^{\rm c}(E') P_j(\mu_{\rm c})$$

szögeloszlást kell helyettesíteni (vö. (12.12)). Végeredményben tehát

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \frac{\Sigma_{s}(E')}{E'(1-\alpha)} P_{\ell} \left(\frac{A\mu_{c}+1}{\sqrt{A^{2}+2A\mu_{c}+1}} \right) \sum_{j=0}^{\infty} \omega_{j}^{c}(E') P_{j}(\mu_{c}) \bigg|_{\mu_{c} = \frac{2E/E' - (1+\alpha)}{1-\alpha}}.$$
(12.24)

1.2.4. Áttérés letargiára

Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan kell a rugalmas szórási magfüggvény sorfejtési együtthatóit letargiára átírni. Mivel a kiindulási, (12.2) szerinti magfüggvény E szerint sűrűségjellegű mennyiség, ilyenek a sorfejtési együtthatók is. Ez azt jelenti, hogy letargiára a

$$\Sigma_{s\ell}(u' \to u) = \Sigma_{s\ell}(E' \to E)E, \qquad (\ell = 0, 1, 2, ...)$$
(12.25)

képlettel számíthatók át.

Ez önmagában is hasznos képlet, de segítségével az alábbiakban a magfüggvényeknek egy közelítő tulajdonságára mutatunk rá, amelyet kihasználunk a lassuláselméletben (2. fejezet): nem külön-külön függnek u'-től és u-tól, hanem csak az (u' - u) különbségtől. A (12.24) képletből következik, hogy a magfüggvény sorfejtési együtthatói minden ℓ -re

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \Sigma_s(E') \frac{f_\ell^E(E/E')}{E'}$$

alakúak, ahol *f* a fenti képletekből kiolvasható függvény. Ez annyiban közelítés, hogy az $\omega_j^c(E')$ együtthatóknak az E'-től való függését elhanyagoljuk. Ezt mindig megtehetjük például, amikor a szórás a TKR-ben izotrop. Az "E" felső index arra utal, hogy minden mennyiséget az energia függvényében fejezünk ki. Amikor a (12.25) képlet szerint letargiára térünk át, az alábbi helyettesítéseket alkalmazzuk:

$$E = E_0 e^{-u}$$
, $E' = E_0 e^{-u'}$, $E/E' = e^{-(u-u')}$.

Végeredményben a következőt kapjuk:

$$\Sigma_{\mathfrak{s}\ell}(u' \to u) = \Sigma_{\mathfrak{s}\ell}(E' \to E)E = \Sigma_{\mathfrak{s}}(E')\frac{f_{\ell}^{\mathrm{E}}(E/E')}{E'}E =$$
$$= \Sigma_{\mathfrak{s}}(u')f_{\ell}^{\mathrm{E}}(e^{-(u-u')}) \cdot e^{-(u-u')} = \Sigma_{\mathfrak{s}}(u')f_{\ell}^{\mathrm{u}}(u-u').$$

Az "u" felső index a letargiára való áttérésre utal. Ebből következik, hogy a letargia függvényében kifejezett szórási magfüggvény sorfejtési együtthatói minden ℓ -re a

$$\Sigma_{s\ell}(u' \to u) = \Sigma_s(u') \cdot g_\ell(u' - u)$$
(12.26)

alakban írhatók fel. Tekintve, hogy mindegy, milyen előjellel írjuk az (u' - u) különbséget a g_{ℓ} függvények argumentumában, megállapodhatunk abban, hogy a két letargiaértéket olyan sorrendben szerepeltetjük, mintha a "–" jel helyett "–>" állna. Mindjárt ezt a konvenciót alkalmaztuk (12.26)-ban.

A definícióból következik, hogy a (12.26) alatti magfüggvénynek u szerinti integrálja $\ell = 0$ esetében a szórási hatáskeresztmetszetet adja meg. Így fennáll, hogy

$$\int_{u'}^{u'+\varepsilon} g_0(u'-u) \, \mathrm{d}u = 1 \,. \tag{12.27a}$$

Ha itt az u - u' = x helyettesítést alkalmazzuk, azt kapjuk, hogy

$$\int_{0}^{\varepsilon} g_0(-x) dx = \int_{-\varepsilon}^{0} g_0(x) dx = 1.$$

Ugyanígy be lehet látni, hogy a függvénynek a másik változó szerinti integrálja is 1:

$$\int_{u-\varepsilon}^{u} g_0(u'-u) du' = 1.$$
(12.27b)

Hasonlóan, a logaritmikus energianövekmény is kétféleképpen írható fel:

$$\xi(u') = \int_{u'}^{u'+\varepsilon} (u-u')g_0(u'-u)du, \qquad (12.28a)$$

és

$$\xi(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} (u-u')g_0(u'-u)du'.$$
 (12.28b)

Gyakran van szükségünk

$$L_{\ell}(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \psi(E') dE'$$

alakú integrálok kiszámítására. A jelen szakasz befejezéseként megmutatjuk, hogyan lehet ezeket *E'* helyett μ_c szerinti integrálásra áthelyettesíteni. (12.3)-ból *E'* kifejezhető μ_c -vel:

$$E' = \frac{2E}{(1+\alpha)+(1-\alpha)\mu_{c}}, \qquad \qquad \frac{\mathrm{d}E'}{E'} = -\frac{(1-\alpha)\mathrm{d}\mu_{c}}{(1+\alpha)+(1-\alpha)\mu_{c}}.$$

Miközben E' az E és E/α határok között, μ_c 1-től –1-ig változik. Így a μ_c -re való helyettesítés módja:

$$L_{\ell}(E) = \int_{-1}^{1} \Sigma_{s\ell}(E') \psi(E') f_{\ell}^{E}(E/E') \Big|_{E' = \frac{2E}{(1+\alpha)+(1-\alpha)\mu_{c}}} \frac{(1-\alpha)d\mu_{c}}{(1+\alpha)+(1-\alpha)\mu_{c}}.$$

A μ_0 -ra való helyettesítés analóg. Hidrogén esetében természetesen figyelembe kell venni a 12.6. szakaszban írtakat, tehát az integrálás μ_0 esetében leszűkítendő a [0, 1] intervallumra.

1.2.5. TKR-ben lineárisan anizotrop szórás

Az előző részben kapott eredmények illusztrálására tekintsük a TKR-ben lineárisan anizotrop szórás speciális esetét:

$$\chi(E',\mu_{\rm c}) = \frac{1+3\overline{\mu}_{\rm c}\mu_{\rm c}}{2}.$$
(12.29)

Ezzel a szórás utáni *E* energia eloszlásfüggvénye [(vö. (12.22b)]:

$$g_0(E' \to E) = \frac{\Sigma_{s0}(E' \to E)}{\Sigma_s(E')} = \frac{2\chi(E', \mu_c)}{E'(1-\alpha)} = \frac{1+3\overline{\mu}_c \frac{2E/E' - (1+\alpha)}{1-\alpha}}{E'(1-\alpha)}.$$

Ebből a képletből következik, hogy a TKR-beli anizotrópia közvetlenül visszahat a lassulási magfüggvény izotrop részére is. Megmutatjuk, hogy ez a hatás rontja a mo-

derátorok lassítási képességét, mert az anizotrópia a leggyakrabban előre irányul $(\overline{\mu}_c > 0)$. Kiszámítjuk a logaritmikus energiacsökkenést:

$$\xi = \int_{\alpha E'}^{E'} g_0(E' \to E) \ln \frac{E'}{E} dE = \xi_0 + 3\overline{\mu}_c \int_{\alpha E'}^{E'} \frac{2E/E' - (1+\alpha)}{E'(1-\alpha)^2} \ln \frac{E'}{E} dE =$$

= $\xi_0 - 3\overline{\mu}_c \left[\frac{\alpha \ln \alpha}{(1-\alpha)^2} + \frac{1+\alpha}{2(1-\alpha)} \right],$ (12.30)

ahol

$$\xi_0 = 1 + \frac{\alpha \ln \alpha}{1 - \alpha}$$

a logaritmikus energiacsökkenésnek a TKR-ben izotrop szóráshoz tartozó része. A (12.30) alatti végeredményt 1/A szerint haladó sorba fejthetjük:

$$\xi = \xi_0 - \overline{\mu}_c \left(\frac{2}{A} - \frac{2}{A^3} + \dots \right), \tag{12.31}$$

amint némi számolás után levezethetjük. Mivel $\overline{\mu}_{c}$ függhet az E' energiától (vö. 12.4. ábrák), ξ szintén függhet E'-től.

Ha *A* elég nagy, akkor $\xi_0 \approx 2/A$, tehát $\xi \approx \xi_0 (1 - \overline{\mu}_c)$, vagyis az előre mutató anizotrópia rontja a lassítás hatékonyságát. Az anizotrópia mértéke úgy függ az *E'* energiától, hogy elegendően kis energián elhanyagolható, de *E'* növekedtével egyre nő. Emiatt nagy neutronenergián a rugalmas szórás hatékonysága jelentősen kisebb, mint kis energián. Nagy *E'*-re viszont jelentős a rugalmatlan szórás, és sok elemre hatékonyabb, mint a rugalmas szórás. Ez az oka annak, hogy a lassulási kódokban lényeges a rugalmatlan szórást figyelembe venni. Megjegyezzük továbbá, hogy (12.23) szerint a TKR-beli anizotrópia magasabb rendű tagjai ($\ell > 1$) szintén adnak járulékot a szórási magfüggvény izotrop részéhez és így ξ -hez is.

E rész befejezéséül megvizsgáljuk, hogyan hat a TKR-beli anizotrópia az LRbeli anizotrópiára. Ezt legegyszerűbben az LR-beli szórási szög koszinuszának az átlaga révén láthatjuk meg:

$$\overline{\mu}_{0} = \int_{-1}^{1} \mu_{0} \chi(E', \mu_{c}) d\mu_{c} = \int_{-1}^{1} \frac{A\mu_{c} + 1}{\sqrt{A^{2} + 2A\mu_{c} + 1}} \chi(E', \mu_{c}) d\mu_{c}.$$

Ha ide a (12.29) szerinti lineárisan anizotrop szögeloszlást helyettesítjük, némi számolás után azt kapjuk, hogy

$$\overline{\mu}_{0} = \frac{2}{3A} + \overline{\mu}_{c} \left(1 - \frac{3}{5A^{2}} \right).$$
(12.32)

A (12.31) formulával ellentétben ez pontos képlet, nem 1/A szerinti sorfejtés.

Érdemes megjegyezni, hogy ez a szórási magfüggvényből is származtatható:

$$\frac{1}{\Sigma_{s}(E')}\int_{\alpha E'}^{E'}\Sigma_{s1}(E'\to E)\mathrm{d}E = \int_{\alpha E'}^{E'}\frac{2\chi(E',\mu_{c})}{E'(1-\alpha)}\mu_{0}\mathrm{d}E,$$

amint e (12.22a) alapján belátható. Mivel (12.22b) szerint

$$\frac{2\mathrm{d}E}{E'(1-\alpha)} = \mathrm{d}\mu_{\mathrm{c}}\,,$$

előző képletünk így írható:

$$\frac{1}{\Sigma_{\rm s}(E')}\int_{\alpha E'}^{E'}\Sigma_{\rm s1}(E'\to E)\,\mathrm{d}E = \int_{-1}^{1}\mu_0\,\chi(E',\mu_{\rm c})\,\mathrm{d}\mu_{\rm c} = \overline{\mu}_0\,,$$

ahol μ_0 (12.4)-ből helyettesítendő. Ezzel levezettük az alábbi, gyakran használt, ámde nem triviális képletet:

$$\Sigma_{\mathrm{sl}}(E') = \int_{\alpha E'}^{E'} \Sigma_{\mathrm{sl}}(E' \to E) \mathrm{d}E = \overline{\mu}_0 \Sigma_{\mathrm{s}}(E').$$

Legutóbbi képleteinkből a következők szűrhetők le:

- A TKR-beli anizotrópia növeli az LR-beli anizotrópiát (vö. (12.32)).
- ξ -hez hasonlóan az LR-beli anizotrópia mértéke is függ az E' energiától.

1.2.6. Lassulás hidrogénen (A = 1)

A hidrogénen való lassulás egyik különlegességét a *12.2. ábrá*n már láttuk: LR-ben csak előre való szórás van, tehát mindig $\mu_0 \ge 0$. Ezt beláthatjuk, ha (12.4)-ben A = 1-et helyettesítünk:

$$\mu_0 = \sqrt{\frac{\mu_c + 1}{2}} = \cos(\theta/2), \qquad \mu_c = \cos\theta.$$
(12.33)

További fontos körülmény, hogy a protonon való neutronszórás TKR-ben izotrop, vagyis $\chi^{c}(E',\mu_{c}) = 1/2$. Így (12.14)-ből levezethetjük, hogy

$$\chi^{(0)}(E',\mu_0) = \chi^{c}(E',\mu_c) \frac{\mathrm{d}\mu_c}{\mathrm{d}\mu_0} = \begin{cases} 2\mu_0 & \mu_0 \ge 0, \\ 0 & \mu_0 < 0, \end{cases}$$
(12.34)

mivel (12.5) szerint

$$u_{\rm c} = 2\mu_0^2 - 1$$

Ha ezt (12.13)-ba helyettesítjük, a Legendre-sorfejtési együtthatók a következőképpen adódnak:

$$\omega_{\ell}^{(0)} = 2(2\ell+1) \int_{0}^{1} \mu_0 P_{\ell}(\mu_0) \mathrm{d}\mu_0$$

Egyszerű számítással kapjuk értéküket:

ℓ	0	1	2	3	4	5	6
$\omega_\ell^{(0)}$	1	2	3/4	0	-3/8	0	13/48

A T mátrix (12.18b) szerinti felírásában az itt megadott számok írandók az első oszlopba. A mátrix többi oszlopa érdektelen, hiszen TKR-ben a szórás izotrop, vagyis $\omega_{\ell}^{c} \equiv 0$, ha $\ell > 0$. Végeredményben az LR-beli szögeloszlásra a következőt kapjuk:

$$\chi^{(0)}(\mu_0) = \frac{1}{2} \left(1 + 2\mu_0 + \frac{3}{4} P_2(\mu_0) - \frac{3}{8} P_4(\mu_0) + \frac{13}{48} P_6(\mu_0) + \dots \right).$$
(12.35)

Itt nem elírás, hogy nem jelöljük az E'-től való függést, mert ez a szögeloszlás E'-től független. A *12.5a. ábrán* bemutatjuk a (12.34) szerinti valódi szögeloszlást és a most kapott P₆-rendű sorfejtést. Láthatóan ez már elég pontos, viszont a

$$\chi^{(0)}(\mu_0) \approx \frac{1}{2}(1+2\mu_0)$$

szerinti P₁ közelítés lényegesen pontatlanabb. Az ábráról az is leszűrhető, hogy hidrogén esetében a szórás anizotrópiája nagyon jelentős.



12.5a. ábra. LR-beli szögeloszlás hidrogénen való szórás esetében



12.5b. ábra. LR-beli szögeloszlás 2 MeV-es neutronoknak deutériumon való szóródásakor

Összehasonlításul a *12.5b. ábrán* bemutatjuk ugyanezt a 2 MeV energiájú neutronok deutériumon való szóródására vonatkozóan. Látható, hogy a lineárisan anizotrop szórással való közelítés itt sem sokkal jobb, viszont maga a szögeloszlás jóval közelebb van az izotrophoz, mint a hidrogén esetében. 1.3. Rugalmatlan szóródási magfüggvény

Még kidolgozandó!!!

2. ASZIMPTOTIKUS LASSULÁSI KÓDOK

Ebben a fejezetben a kevéscsoport-állandók készítésére szolgáló aszimptotikus lassulási kódokról lesz szó. A tárgyalást a következő részekre osztjuk:

- a konzisztens P₁ és B₁ közelítés folytonos energiaváltozóval;
- a Greuling-Goertzel közelítés folytonos energiaváltozóval;
- áttérés többcsoport közelítésre a Magyarországon használatos GRACE program ismertetése révén;
- kitekintés egyéb, általánosan használt programokra;
- a kevéscsoport-állandók számítása;
- a diffúzióállandó problémája.

2.1. Konzisztens P1 és B1 közelítés

Az aszimptotikus közelítésben egy homogén reaktor ún. *aszimptotikus* tartományát tekintjük, amelyet úgy definiálunk, mint azt a tartományt, ahol érvényes a *reaktorfizika alaptétele*, tehát benne a fluxus a térváltozó és a többi változó szerint szeparálható. Ebből a definícióból következik, hogy az itt kialakuló neutronspektrum független a reaktor külső alakjától. Ezért a tárgyalás egyszerűsítése érdekében célszerű a legegyszerűbb geometriát alapul venni: két párhuzamos, az *x*- és *y*-irányban végtelen sík által határolt tartományt, ahol a fluxus csak a *z* koordinátától és az Ω vektor $\mu = \Omega_z$ komponensétől függ:⁴

$$\Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \Phi(z, E, \mu). \tag{21.1}$$

Az aszimptotikus tartományra vonatkozó feltevés pedig így írható:

$$\Phi(z, E, \mu) = \phi(z)\psi(E, \mu). \tag{21.2}$$

Mielőtt továbbmennénk, két megjegyzést kell tennünk. (1) A reaktorfizika alaptételét eredetileg a diffúzióelmélet keretében mondtuk ki [Brf]. Az alábbiakban erről nem lehet szó, ugyanis az aszimptotikus lassulási kódok éppen arra valók, hogy segítségükkel a diffúzióegyenlet együtthatóit, köztük a diffúzióállandót kiszámítsuk. Ennélfogva nem indulhatunk ki a diffúzióegyenletből, hanem csak a transzportegyenletből. (2) A (21.2) képlet szerinti szeparáció csak a diffúzióelméletben tárgyalt $\Phi(z, E)$ neutronfluxusra lehet érvényes, a szögfüggő fluxus esetében lehetetlen. Tekintsük ugyanis a 2.1. ábrát, amely a választott síkgeometriához tartozó fluxus térfüggését mutatja. Az ábrán látható, koszinusz alakú fluxus nyilván nem szeparálható, hiszen a szögeloszlás z > 0 esetében a $\mu > 0$ irányok, z < 0 esetében pedig a $\mu < 0$ irányok felé mutat anizotrópiát. Minden z-re tehát nem lehet azonos a szögeloszlás. En-

⁴ Az a körülmény, hogy a fluxus csak z-től és μ -től függ, még nem jelenti azt, hogy z és μ egységnyi megváltozására vonatkozna. A (21.1) szerinti felírás ellenére Φ az Ω körüli egységnyi *térszögre* és az Ω -ra merőleges egységnyi felületre vonatkozik.

nek megfelelően (21.2) nem tekinthető másnak, mint próbakifejezésnek. Ha több ilyen alakú megoldást találunk, akkor ezek lineáris kombinációjaként előállíthatjuk a valóságos fluxust megadó, térfüggő anizotrópiával rendelkező megoldást.



2.1. ábra. A szögfüggő fluxus anizotrópiájának helyfüggése

2.1.1. Definíciók

A fenti geometriában a transzportegyenlet így írható:

$$\mu \frac{\partial \Phi(z, E, \mu)}{\partial z} + \Sigma_{t}(E) \Phi(z, E, \mu) =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} [\Sigma_{0}(E' \to E) + 3\mu_{0} \Sigma_{1}(E' \to E)] \Phi(z, E', \mu') d\Omega' dE' +$$

$$+ \frac{f(E)}{4\pi k_{\text{eff}}} \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} \nu \Sigma_{f}(E') \Phi(z, E', \mu') d\Omega' dE' ,$$
(21.3)

ahol f(E) a hasadási spektrum, k_{eff} a sokszorozási tényező (sztatikus sajátérték), továbbá

$$\mu_0 = \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}' = \mu\mu' + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - {\mu'}^2} \cos(\varphi - \varphi')$$
(21.4a)

a szórási szög koszinusza a laboratóriumi rendszerben (LR),

$$\mathrm{d}\mathbf{\Omega}' = \mathrm{d}\mu'\mathrm{d}\varphi'\,,\tag{21.4b}$$

 φ a z-tengely körüli azimutszög. (21.3) szerint a $\Sigma(E' \rightarrow E, \mu_0)$ szórási magfüggvényt (rugalmas és rugalmatlan szórás együtt) lineáris anizotrópiával közelítjük. Reaktorok aktív zónája esetében ez általában elegendő. Ha d Ω' -t (21.4b)-ből (21.3)-ba helyettesítjük, akkor (21.4a) alapján beláthatjuk, hogy μ_0 -nak φ' szerinti integrálja $2\pi\mu\mu'$ -vel egyenlő. Ezt figyelembe véve (21.3) így írható:

$$\mu \frac{\partial \Phi(z, E, \mu)}{\partial z} + \Sigma_{t}(E)\Phi(z, E, \mu) = \frac{L_{0}(z, E) + 3\mu L_{1}(z, E) + F(z, E)}{4\pi}, \qquad (21.5)$$

ahol

$$L_0(z, E) = 2\pi \int_{0}^{\infty} \int_{-1}^{1} \Sigma_0(E' \to E) \Phi(z, E', \mu') d\mu' dE', \qquad (21.6a)$$

$$L_{1}(z,E) = 2\pi \int_{0}^{\infty} \int_{-1}^{1} \mu' \Sigma_{1}(E' \to E) \Phi(z,E',\mu') d\mu' dE', \qquad (21.6b)$$

$$F(z,E) = \frac{f(E)}{k_{\rm eff}} 2\pi \int_{0}^{\infty} \int_{-1}^{1} \nu \Sigma_f(E') \mathcal{P}(z,E',\mu') d\mu' dE'.$$
(21.6c)

Helyettesítsük most a (21.2) próbakifejezést a (21.5) egyenletbe. Ekkor a (21.6) képletek szerinti függvények szintén szeparálhatók:

$$L_0(z, E) = \phi(z)L_0(E),$$
 $L_1(z, E) = \phi(z)L_1(E),$ $F(z, E) = \phi(z)F(E).$

Az ennek figyelembevételével kapott egyenletet elosztjuk $\Phi(z) \cdot \mu \psi(\mu, E)$ -vel:

$$\frac{1}{\phi(z)}\frac{d\phi(z)}{dz} = \frac{-4\pi\Sigma_{t}(E)\psi(E,\mu) + L_{0}(E) + 3\mu L_{1}(E) + F(E)}{4\pi\mu\psi(E,\mu)}$$

A bal oldal csak z-től, a jobb oldal pedig csak μ -től és *E*-től függ, tehát az egyenlet csak úgy állhat fenn a változók minden értékére, ha mindkét oldal ugyanazzal az állandóval egyenlő. Jelöljük ezt $\pm iB$ -vel, amivel:

$$\frac{\mathrm{d}\phi(z)}{\mathrm{d}z} = \pm \mathrm{i}B\phi(z),\tag{21.7a}$$

vagyis

$$\phi(z) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}Bz} \,, \tag{21.7b}$$

ahol *B* (egyelőre ismeretlen) állandó. A +*B*-hez és –*B*-hez tartozó megoldások lineárisan függetlenek, és ezek lineáris kombinációja fogja adni a keresett megoldást. A $\phi(z)$ -re kapott két függvényt eleve úgy írtuk fel, hogy egymás komplex konjugáltjai legyenek, mert így létezik olyan lineáris kombinációjuk, amely minden *z*-re valós. A szögtől és energiától függő rész ugyanakkor a következő egyenletet elégíti ki:

$$\left[\mathcal{L}_{t}(E)\pm iB\mu\right]\psi_{\pm}(E,\mu) = \frac{L_{0}^{\pm}(E)+3\mu L_{1}^{\pm}(E)+F_{\pm}(E)}{4\pi},$$
(21.8)

ahol a következő jelöléseket vezettük be:

$$L_0^{\pm}(E) = \int_0^\infty \Sigma_0(E' \to E) \psi_{\pm}(E') dE', \qquad (21.9a)$$

$$\psi_{\pm}(E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \psi_{\pm}(E,\mu) d\mu$$
, (21.9b)

$$L_1^{\pm}(E) = \int_0^\infty \Sigma_1(E' \to E) J_{\pm}(E') \mathrm{d}E' , \qquad (21.9c)$$

$$J_{\pm}(E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \mu \psi_{\pm}(E,\mu) d\mu, \qquad (21.9d)$$

$$F_{\pm}(E) = \frac{f(E)}{k_{\text{eff}}} \int_{0}^{\infty} \nu \Sigma_{f}(E') \psi_{\pm}(E') dE'. \qquad (21.9e)$$

Mint már jeleztük, a valóságnak megfelelő szögfüggő fluxus csak a fenti két megoldás szuperpozíciója lehet:

$$\Phi(z, E, \mu) = a_{+}\psi_{+}(E, \mu)e^{iBz} + a_{-}\psi_{-}(E, \mu)e^{-iBz}, \qquad (21.10)$$

ahol az a_+ és a_- együtthatók a fluxus normálása alapján határozhatók meg. Értéküknek természetesen biztosítaniuk kell, hogy a (21.10) szerint számított szögfüggő fluxus valós legyen.

2.1.2. P1 és B1 közelítés

A (21.2) alatt bevezetett $\psi(\mu, E)$ függvényt sorba fejtjük a Legendre-polinomok szerint:

$$\psi(E,\mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \psi_{\ell}(E) P_{\ell}(\mu), \qquad (21.11)$$

ahol

$$\psi_{\ell}(E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \psi(E,\mu) P_{\ell}(\mu) d\mu.$$
 (21.12)

A fenti jelölésekkel:

$$P_0(\mu) = 1;$$
 $\psi_0(E) = \psi(E)$ (21.13a)

és

$$P_1(\mu) = \mu;$$
 $\psi_1(E) = J(E).$ (21.13b)

Az aszimptotikus reaktorelméletben egyenletrendszert vezetünk le a $\psi_{\ell}(E)$ sorfejtési együtthatókra. Ha (21.11)-ben csak az $\ell \leq L$ tagokat tartjuk meg, P_L közelítésről beszélünk. A P_L egyenletek levezetése általánosítható 1, 2 és 3 dimenzióra (IV. fejezet). Az aszimptotikus elméletben azonban van ezeknek egy olyan változata is, amely nem vihető át véges dimenziószámra. Ezek a B_L egyenletek, amelyek bizonyos tekintetben pontosabbak a P_L egyenleteknél. Az alábbiakban elsősorban a P₁ és B₁ egyenletekkel foglalkozunk, mert ezek elégségesek a kevéscsoport diffúzióegyenlet együtthatóinak a számításához. Két ismeretlenük van: a $\psi(E)$ fluxus és a J(E) áram.

P₁ közelítés

A P₁ közelítés abban áll, hogy a (21.11) szerinti sorban a harmadiktól kezdve mindegyiket ($\ell > 1$) elhanyagoljuk:

$$\psi(E,\mu) \cong \frac{1}{4\pi} \psi(E) + \frac{3}{4\pi} \mu J(E).$$
(21.14)

Helyettesítsük ezt (21.8)-ba. Az így kapott egyenletet először integráljuk Ω szerint, majd megszorozzuk μ -vel és utána ismét integráljuk Ω szerint.⁵ Elemi számítások után kapjuk:

$$\Sigma_{t}(E)\psi_{\pm}(E)\pm iBJ_{\pm}(E) = L_{0}^{\pm}(E) + F_{\pm}(E), \qquad (21.15a)$$

$$\Sigma_t(E) J_{\pm}(E) \pm \frac{\mathrm{i}B}{3} \psi_{\pm}(E) = L_1^{\pm}(E).$$
(21.15b)

⁵ Az Ω szerinti integrálás esetünkben 2π -vel való szorzást és μ szerint való integrálást jelent.

Itt figyelembe vettük a (21.9) egyenleteket. (21.15a) és (21.15b) a P₁ közelítés alapegyenletei. Érvényességük elsősorban a (21.14) sorfejtés pontosságától függ. A jobb oldalon szereplő $L_0(E)$, $L_1(E)$ és F(E) fizikai jelentése rendre az izotrop, illetve az anizotrop lassulás, valamint a hasadások által létrehozott neutronforrásnak az E körüli egységnyi energiaintervallumra vonatkozó része.

B₁ közelítés

A B₁ közelítés annyiban pontosabb, mint a P₁ közelítés, hogy érvényessége csak a szórási magfüggvény anizotrópiájára (21.3) szerint alkalmazott lineáris közelítés pontosságától függ. A megfelelő egyenleteket úgy kapjuk, hogy (21.8)-ból először kifejezzük a fluxust, és csak ezután számítjuk ki a sorfejtési együtthatókat. Tehát először felírjuk, hogy

$$\psi_{\pm}(E,\mu) = \frac{1}{4\pi} \frac{L_0^{\pm}(E) + F_{\pm}(E) + 3\mu L_1^{\pm}(E)}{\Sigma_{\pm}(E) \pm iB\mu},$$

majd ezt beszorozzuk $P_{\ell}(\mu)$ -vel, és integrálunk Ω szerint. Az eredmény:

$$\psi_{\ell}^{\pm}(E) = A_{\ell 0} \Big[L_0^{\pm}(E) + F_{\pm}(E) \Big] + 3A_{\ell 1} L_1^{\pm}(E), \qquad (21.16)$$

ahol

$$A_{\ell j} = A_{j\ell} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{P_{\ell}(\mu) P_{j}(\mu)}{\Sigma_{t}(E) \pm i B \mu} d\mu.$$
(21.17)

Ezek Σ_t ismeretében kiszámítható, *E*-től függő együtthatók.

Kiolvasható ebből a B₁ közelítés előnye: ha kiszámítjuk az $\ell = 0$ -nak és $\ell = 1$ nek megfelelő függvényeket (vagyis $\psi_0 = \psi(E)$ -t és $\psi_1 = J(E)$ -t), ebből az $\ell > 1$ -nek megfelelő ψ_ℓ függvények is kiszámíthatók (21.16) segítségével. Más szóval: a szögfüggő fluxusnak elég csak annyi sorfejtési együtthatóját kiszámítani, amilyen rendig figyelembe vesszük a szórási magfüggvény anizotrópiáját (a B₁ közelítés esetében tehát az első rendig).

Az alábbiakban felírjuk a kiszámítandó $\psi(E)$ és J(E) függvényekre vonatkozó egyenleteket. Legyen tehát (21.16)-ban $\ell = 0$ és $\ell = 1$:

$$\psi_{\pm}(E) = A_{00} \left[L_0^{\pm}(E) + F_{\pm}(E) \right] + 3A_{01}L_1^{\pm}(E) , \qquad (21.18a)$$

$$J_{\pm}(E) = A_{10} \left[L_0^{\pm}(E) + F_{\pm}(E) \right] + 3A_{11} L_1^{\pm}(E) . \qquad (21.18b)$$

Ha figyelembe vesszük az $A_{\ell j}$ együtthatók konkrét alakját, ezek az egyenletek – kis eltéréssel – ugyanarra az alakra hozhatók, mint P₁ egyenletek. (21.17)-ből levezethetjük a következőket:

$$A_{00} = \begin{cases} \frac{1}{B} \operatorname{arctg}\left(\frac{B}{\Sigma_{t}}\right), & \text{ha } B^{2} > 0; \\ \frac{1}{2\kappa} \ln \frac{1 + \kappa/\Sigma_{t}}{1 - \kappa/\Sigma_{t}}, & \text{ha } \kappa^{2} = -B^{2} > 0; \end{cases}$$

$$A_{01} = A_{10} = \mp \frac{i}{B} (1 - A_{00} \Sigma_{t}), \qquad (21.19b)$$

$$A_{11} = \frac{\Sigma_{\rm t}}{B^2} \left(1 - A_{00} \Sigma_{\rm t} \right). \tag{21.19c}$$

A (21.19a)-ban megkülönböztetett két esetre (*B* valós, illetve képzetes) még visszatérünk. Az alábbi átrendezésekkel kapunk (21.15)-nek megfelelő alakú egyenleteket:

(21.15a):
$$\Sigma_{t}(E) \bullet (21.18a) + (\pm iB) \bullet (21.18b),$$

(21.15b):
$$(\pm iB) \bullet (21.18a) + \frac{A_{00}B^2}{1 - A_{00}\Sigma_t} \bullet (21.18b).$$

Elemi számítások után adódnak a *B*₁ egyenletek:

(-

$$\Sigma_{t}(E)\psi_{\pm}(E) \pm iBJ_{\pm}(E) = L_{0}^{\pm}(E) + F_{\pm}(E), \qquad (21.20a)$$

$$h(B, \Sigma_{t}) \cdot \Sigma_{t}(E) J_{\pm}(E) \pm \frac{\mathrm{i}B}{3} \psi_{\pm}(E) = L_{1}^{\pm}(E).$$
 (21.20b)

A $h(B,\Sigma_t)$ tényezőtől eltekintve ezek megegyeznek a (21.15) egyenletekkel. Végeredményben tehát elég a (21.20) alatti B₁ egyenletek megoldását beprogramozni, hiszen ebből a $h(B,\Sigma_t) = 1$ helyettesítéssel kiadódnak a P_1 egyenletek is. Befejezésül felírjuk a $h(B,\Sigma_t)$ tényezőt:

$$h(B, \Sigma_{t}) = \begin{cases} \frac{x^{2}}{3} \frac{\arctan(x)}{x - \arctan(x)}, & \text{ha } B^{2} > 0, \\ \frac{x^{2}}{3} \frac{\ln \frac{1+x}{1-x}}{\ln \frac{1+x}{1-x} - 2x}, & \text{ha } B^{2} < 0, \end{cases}$$
(21.21)

ahol $x = B/\Sigma_t$, ha *B* valós, és $x = \kappa/\Sigma_t$, ha *B* képzetes ($\kappa^2 = -B^2$).

Egyszerűen beláthatjuk, hogy h > 1, ha *B* valós. Ebből következik, hogy a B₁ közelítésben számolt neutronáram kisebb, mint amit P₁ közelítésben kapunk. Képzetes *B* esetében ennek a fordítottja igaz, mivel ekkor h < 1.

A +iB és –iB esetek összevetése

A (21.15) alatti jelölésekkel felírjuk a (21.20) alatti B₁ egyenleteket a "+" és "–" előjelek esetében. (Az egyszerűség kedvéért elhagyjuk az E argumentumot.) "+" egyenletek:

$$\begin{split} & \Sigma_{\rm t} \psi_+ + {\rm i} B J_+ = L_0^+ + F_+ \ , \\ & h \Sigma_{\rm t} J_+ + \frac{{\rm i} B}{3} \psi_+ = L_1^+ \ . \end{split}$$

Hasonlóan kapjuk a "-" egyenleteket:

$$\begin{split} & \varSigma_{\mathrm{t}} \psi_- -\mathrm{i} B J_- = L_0^- + F_- \ , \\ & h \varSigma_{\mathrm{t}} J_- - \frac{\mathrm{i} B}{3} \psi_- = L_1^- \ . \end{split}$$

Adott *B* mellett e két egyenletrendszer megoldása – egy tetszőlegesen választható, állandó szorzótényezőtől eltekintve – egyértelmű. Megmutatjuk, hogy az egyik megoldását egyszerűen megkaphatjuk a másik egyenletrendszer megoldásából. Szorozzuk meg ugyanis a "–" egyenletrendszer második egyenletét –1-gyel:

$$-h\Sigma_{\rm t}J_-+\frac{{\rm i}B}{3}\psi_-=-L_1^-\ .$$

Ebből látszik, hogy a

$$\psi_{-}(E) = \psi_{+}(E)$$
 és $J_{-}(E) = -J_{+}(E)$ (21.22)

függvények kielégítik a "–" egyenletrendszert, amiből következik, hogy elegendő csak a "+" vagy csak a "–" egyenleteket megoldani. A későbbiekben ismertetett GRACE program a "–" egyenleteket oldja meg. Ezért a 2.3. alfejezetben ezzel dolgozunk tovább.

A kapott eredményből további következtetéseket is levonhatunk. Legyen *B* valós. Ha $B \rightarrow 0$, akkor (21.15a) határértéke

$$\Sigma_{t}(E)\psi_{\pm}(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{0}(E' \to E)\psi_{\pm}(E')dE' + F_{\pm}(E).$$

Ez mind valós, mind képzetes $\psi_{\pm}(E)$ függvénnyel kielégíthető. Egyszerűbb a valós függvényt választani. Véges *B*-re a (21.20) egyenletek csak úgy elégülhetnek ki, ha $\psi_{\pm}(E)$ továbbra is valós, $J_{\pm}(E)$ pedig tiszta képzetes. (21.22) és (21.14) szerint ez azt jelenti, hogy P₁ közelítésben

$$\psi_{-}(E,\mu) = \psi_{+}^{*}(E,\mu),$$
 (21.23)

ahol a * felső index a komplex konjugáltat jelenti. (21.16) és (21.17) alapján belátható, hogy ez az összefüggés B₁ közelítésben is igaz.⁶ Ezt felhasználva kapjuk, hogy a (21.10) alatti fluxus csak úgy lehet valós, ha $a_+ = a$ és $a_- = a^*$, vagyis:

$$\Phi(z, E, \mu) = a\psi_{+}(E, \mu)e^{iBz} + a^{*}\psi_{-}(E, \mu)e^{-iBz}, \qquad (21.24)$$

ahol az a együttható értéke a fluxus normálásától függ.

2.1.3. A P₁ és B₁ egyenletek megoldása

A továbbiakban a "±" indexet elhagyhatjuk, hiszen a fentiek szerint mindegy, hogy melyik előjel mellett oldjuk meg a B₁ egyenleteket. Mivel ezek (adott *B* mellett) k_{eff} -re vonatkozóan sajátérték-egyenletek, a fluxus normálása tetszőleges. Szokás szerint a következő normálást választjuk:

$$k_{\rm eff} = \int_{0}^{\infty} \nu \Sigma_{\rm f}(E') \psi(E') dE', \qquad (21.25a)$$

amivel

$$F(E) = f(E).$$
 (21.25b)

⁶ Ez az állítás nem triviális. Fontosnak tartjuk, hogy az Olvasó ezt a maga számára levezesse. Útmutatás: (1) A (21.17) alatt definiált együtthatók valósak, ha ℓ +*j* páros, és képzetesek, ha ℓ +*j* páratlan. (2) $L_0(E)$ valós, $L_1(E)$ képzetes. (3) Ezt figyelembe véve (21.16)-ból belátható, hogy $\psi_{\ell}(E)$ valós, ha ℓ páros, és $\psi_{\ell}(E)$ képzetes, ha ℓ páratlan. (4) Közülük a valósak nem változnak, a képzetesek viszont előjelet váltanak, amikor a "+" esetről a "–" esetre térünk át. (5) Ezután (21.11)-ből következik az állítás.

29

Ezzel (21.20) inhomogén integrálegyenlet-rendszerré alakul át, amelynek adott *B* mellett való megoldását a 2.3. alfejezetben részletezzük. Tételezzük fel, hogy rendelkezésünkre áll egy szubrutin, amely ezt a feladatot végrehajtja. Ezt a szubrutint általában kétszer szoktuk hívni:

(1) Először legyen B = 0, ami a minden irányban végtelen reaktornak felel meg. Ebben az esetben a (21.25a) képlet k_{∞} -t szolgáltatja, amely alapján eldönthetjük, hogy véges méretű reaktorra *B* valós vagy képzetes:

B valós, ha
$$k_{\infty} > 1$$
, *B* képzetes, ha $k_{\infty} < 1$.

- (2a) A második lépésben megkeressük *B*-nek azt az értékét, amelyre $k_{eff} = 1$. Ennek a négyzete adja az anyagi görbületi paramétert (B_m^2). A számításhoz szükséges iterációt később tárgyaljuk.
- (2b) Amikor *B* képzetes, az iterációt *B* helyett κ -ra vonatkozóan alkalmazzuk, ahol $\kappa^2 = -B^2$, vagyis $\kappa = iB$. Ezt a (21.20) alatti "+" egyenletekbe helyettesítve kapjuk:

$$\Sigma_{t}\psi_{+} - \kappa J_{+} = L_{0}^{+} + F_{+} , \qquad (21.26a)$$

$$h\mathcal{L}_{t}J_{+} - \frac{\kappa}{3}\psi_{+} = L_{1}^{+}.$$
(21.26b)

Mivel ezekben az egyenletekben nem szerepelnek komplex számok, a megoldás valós fluxust és valós áramot szolgáltat. A 2.1. ábrán és a (21.10) képletben ennek az felel meg, hogy a koszinusz függvény helyett z > 0 mellett $e^{-\kappa z}$, z < 0 mellett pedig $e^{+\kappa z}$ szerepel.

A (2a) bekezdésben említett iterációt az egycsoport-elméletből ismert

$$k_{\rm eff} = k_{\infty} P_{\rm NL} = k_{\infty} {\rm e}^{-M^2 B^2}$$

képletből vezetjük le. Ennek vesszük a logaritmusát, majd differenciálunk:

$$\frac{\Delta k_{\rm eff}}{k_{\rm eff}} = \Delta \ln P_{\rm NL} = -M^2 \Delta B^2$$

Ha $\Delta k_{\text{eff}} = 1 - k_{\text{eff}}$, akkor $\Delta B^2 = B_{\text{m}}^2 - B^2$, vagyis:

$$M^2 B_{\rm m}^2 = M^2 B^2 - \frac{1 - k_{\rm eff}}{k_{\rm eff}},$$

amiből az n-edik iterációs lépéshez a következő képletet nyerjük:

$$B_{n+1}^2 = B_n^2 - \frac{1 - k_{\text{eff},n}}{k_{\text{eff},n} \cdot M^2}.$$

Ez a képlet még nem használható, mert a B₁ közelítésben nem ismerjük az M^2 migrációs területet. Ezért szükséges még M^2 kiküszöbölése, ami a $P_{\rm NL}$ bennmaradási valószínűség segítségével lehetséges:

$$M^2 = -\frac{\ln P_{\rm NL}}{B^2}.$$

Ezt iterációs képletünkbe helyettesítve kapjuk a ténylegesen alkalmazott képletet:

$$B_{n+1}^{2} = B_{n}^{2} \left(1 + \frac{1 - k_{\text{eff},n}}{k_{\text{eff},n} \cdot \ln P_{\text{NL}}} \right).$$
(21.27a)

Befejezésül kiszámítjuk P_{NL} -t. A (21.20a) egyenletből látható, hogy a kiszökést az i $BJ_+(E)$ tag adja meg, ami – valós B esetén – a (21.20a) egyenlet alapján pozitív valós szám. Ebből következik, hogy

$$P_{\rm NL} = 1 - \int_{0}^{\infty} iBJ_{+}(E)dE = 1 + \int_{0}^{\infty} iBJ_{-}(E)dE. \qquad (21.27b)$$

Valós *B* mellett ez 1-nél kisebb, ahogy egy valószínűség jelentésű mennyiségtől el is várjuk. Képzetes *B*-re ehelyett

$$P_{\rm NL} = 1 + \int_{0}^{\infty} \kappa J(E) dE \qquad (21.27c)$$

írandó, amely 1-nél nagyobb. Ez is természetes: ekkor $k_{\infty} < 1$, tehát $k_{\text{eff}} = 1$ csak úgy biztosítható, hogy $P_{\text{NL}} > 1$. Ilyenkor persze P_{NL} nem értelmezhető bennmaradási való-színűségként.⁷

A (21.27) képletek szerinti iteráció a gyakorlatban nagyon gyorsan konvergál. A tapasztalat azt mutatja, hogy célszerű egy B_m^2 -nél kisebb B^2 -tel indítani.

2.1.4. Diffúzióállandó a P1 és B1 közelítés szerint

Amikor a diffúzióegyenletet a reaktorfizika elemeiben levezettük [Brf], azt kaptuk, hogy a diffúzióállandót a

$$D(E) = \frac{1}{3\Sigma_{\rm tr}(E)} \tag{21.28}$$

képlet adja meg. E képlet levezetésében elhanyagoltuk a $\Sigma_1(E' \rightarrow E)$ anizotrop lassulási magfüggvénynek megfelelő lassulást, vagyis az

$$L_1(E) = \int_0^\infty \Sigma_1(E' \to E) J(E') dE' \approx J(E) \int_0^\infty \Sigma_1(E' \to E) dE' = \Sigma_{s1}(E) J(E)$$

közelítést alkalmaztuk. Tudjuk azonban, hogy ez csak nehéz elemeken való lassulás esetében engedhető meg, viszont könnyű elemek (¹H, ²H, ⁹Be) esetében a gyakorlatban nem elhanyagolható számítási hibához vezet. Fenti levezetéseinkben ezért tartottuk meg konzekvensen az anizotrop lassulási tagot. Felmerül viszont a kérdés, hogyan kell ebben az esetben a diffúzióállandót definiálni. A kevéscsoport-állandók számításának ez az egyik legnehezebb elvi problémája.

A jelen fejezetben tekintett homogén reaktorban az alábbi megfontolást alkalmazzuk. A diffúzióállandó a (21.24) szerinti szögfüggő fluxusnak Ω -ra vett integráljára, tehát a

⁷ Szubkritikus reaktorban csak úgy lehetséges önfenntartó láncreakció, hogy külső neutronforrás táplálja. Kritikus állapotról ebben az esetben csak akkor beszélhetünk, ha a tekintett tartomány mellett egy $k_{\infty} > 1$ tulajdonságú zóna van, ahonnan a tekintett tartományba irányuló nettó befolyás van.

$$\Phi_{1}(z,E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \left[a \cdot \psi_{+}(E,\mu) \cdot e^{iBz} + a^{*} \cdot \psi_{-}(E,\mu) \cdot e^{-iBz} \right] d\mu = (21.29)$$

$$= a \cdot \psi_{+}(E) \cdot e^{iBz} + a^{*} \cdot \psi_{-}(E) \cdot e^{-iBz} = \psi_{+}(E) \cdot \left(a \cdot e^{iBz} + a^{*} \cdot e^{-iBz} \right)$$

függvényre vonatkozik. Φ mellett az "1" index a P₁ vagy B₁ közelítés "1" indexére utal. Az ennek megfelelő áram a fentiek alapján így írható:

$$J_{1}(z, E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \left[a \cdot \psi_{+}(E, \mu) \cdot e^{iBz} + a^{*} \cdot \psi_{-}(E, \mu) \cdot e^{-iBz} \right] \mu d\mu =$$
(21.30)
= $a \cdot J_{+}(E) \cdot e^{iBz} + a^{*} \cdot J_{-}(E) \cdot e^{-iBz} = J_{+}(E) \cdot \left(a \cdot e^{iBz} - a^{*} \cdot e^{-iBz} \right).$

A D(E) diffúzióállandót úgy definiáljuk, hogy Φ_1 és J_1 között fennálljon a Fick-törvény:

$$J_1(z,E) = -D(E) \frac{\partial \Phi_1(z,E)}{\partial z} = -\mathbf{i}BD(E)\psi_+(E) \cdot \left(a \cdot e^{\mathbf{i}Bz} - a^* \cdot e^{-\mathbf{i}Bz}\right).$$

Ha ezt (21.30)-cal összevetjük, azt kapjuk, hogy

$$J_{+}(E) = -\mathrm{i}BD(E)\psi_{+}(E),$$

vagyis

$$D(E) = \frac{iJ_{+}(E)}{B\psi_{+}(E)} = \frac{-iJ_{+}(E)}{-B\psi_{+}(E)} = \frac{iJ_{-}(E)}{-B\psi_{-}(E)} = \frac{-iJ_{-}(E)}{B\psi_{-}(E)},$$
(21.31)

tehát a diffúzióállandót mind a "–", mind a "+" egyenletrendszer megoldásából hasonló képlettel tudjuk megkapni.

Az aszimptotikus lassulási kódok általában a (21.31) formulával számítják ki homogén közegek diffúzióállandóját. Levezetésünkből következik, hogy ez a formula biztosítja, hogy a Fick-törvény minden *E* energián teljesüljön, ami azonban csak az aszimptotikus elmélet keretében lehet szigorúan érvényes. Különböző anyagi minőségű közegek határának a közelében már csak közelítés, de általában elfogadott közelítés.

2.2. Lassulási modellek

A (21.9) képletekben szereplő $L_0(E)$ és $L_1(E)$ lassulási források kiszámítására több közelítést lehet alkalmazni. A mai számítástechnikai lehetőségek lehetővé teszik a legegyszerűbbet is: közvetlenül és közelítés nélkül kiszámítani ezeket a mennyiségeket. Ma is használatban vannak azonban olyan programok, amelyek közelítő modelleket használnak. Közülük a legközönségesebb a Greuling-Goertzel közelítés. A szórási magfüggvény konkrét alakjával az I. fejezetben foglalkozunk. A későbbiek szempontjából egyszerűbb a szórási magfüggvényt a szórás utáni energia valószínűségi sűrűségfüggvénye segítségével felírni:

$$\Sigma_{s\ell}(E' \to E) = \Sigma_s(E') \cdot g_\ell(E' \to E), \qquad (22.1)$$

amelyet letargiára is átírhatunk (vö. (12.26)):

$$\Sigma_{s\ell}(u' \to u) = \Sigma_s(u') \cdot g_\ell(u' \to u) \approx \Sigma_s(u') \cdot g_\ell(u' - u).$$
(22.2)

Utóbbi képletünkben annyi a közelítés, hogy a (12.14) szerinti sorfejtésben az ω_{ℓ} együtthatókat a letargiától függetlennek vesszük.

2.2.1. A Greuling-Goertzel egyenletek

A Greuling-Goertzel közelítés tárgyalásához áttérünk a letargiaváltozóra, vagyis a $\Sigma_{s_{\ell}}(E' \rightarrow E)$ magfüggvények helyett $\Sigma_{s_{\ell}}(u' \rightarrow u)$ -t írunk ($\ell = 0$ és 1). Bevezetjük a lassulási sűrűségeket:

$$q_{\ell}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} \mathrm{d}u' \psi_{\ell}(u') \int_{u}^{u'+\varepsilon} \Sigma_{s\ell}(u' \to u'') \mathrm{d}u'' , \qquad (22.3)$$

ahol $\varepsilon = -\ln \alpha$, továbbá a $\psi_{\ell}(u)$ függvényeket a (21.11) és (21.12) képletekben definiáltuk. Az $\ell = 0$ eset a szórás izotrop részéhez, az $\ell = 1$ eset pedig a szórás lineárisan anizotrop részéhez tartozik. (22.3)-at *u* szerint deriválva beláthatjuk, hogy a (21.9) képletekkel definiált mennyiségek és a lassulási sűrűség között fennáll az

$$L_{\ell}(u) = \Sigma_{s\ell}(u) \psi_{\ell}(u) - \frac{\mathrm{d}q_{\ell}(u)}{\mathrm{d}u}$$
(22.4)

összefüggés, ahol

 $\mathcal{\Sigma}_{\mathrm{s0}}\!\left(\!u\right)\!\equiv\!\mathcal{\Sigma}_{\mathrm{s}}\!\left(\!u\right)$

és

$$\Sigma_{\rm s1}(u) = \overline{\mu}_0 \Sigma_{\rm s}(u).$$

A lassulási sűrűségek közelítő meghatározása érdekében olyan függvényeket keresünk, amelyek kielégítenek

$$q_{\ell}(u) + a_{\ell} \frac{\mathrm{d}q_{\ell}(u)}{\mathrm{d}u} = b_{\ell} \Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell}(u)$$
(22.5)

alakú egyenleteket, amelyekben a_{ℓ} és b_{ℓ} alkalmasan megválasztott, *u*-tól esetleg függő együtthatók. A Greuling-Goertzel közelítés abban áll, hogy ezeket az alábbi módon határozzuk meg.

A (22.3) egyenletben a magfüggvényt a (22.2) szerinti tényezőkre bontjuk:

$$q_{\ell}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} \mathrm{d}u' \Sigma_{\mathrm{s}}(u') \psi_{\ell}(u') \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u' \to u'') \mathrm{d}u'' , \qquad (22.6)$$

és az *u*' szerinti integrálban sorfejtést alkalmazunk:

$$q_{\ell}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} du' \bigg[\Sigma_{s}(u) \psi_{\ell}(u) + (u'-u) \frac{d}{du} (\Sigma_{s}(u) \psi_{\ell}(u)) + \dots \bigg] \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u' \to u'') du'' =$$
$$= G_{1\ell}(u) \Sigma_{s}(u) \psi_{\ell}(u) + G_{2\ell}(u) \frac{d}{du} (\Sigma_{s}(u) \psi_{\ell}(u)) + \dots$$

ahol

$$G_{1\ell}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} \mathrm{d}u' \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u' \to u'') \mathrm{d}u''$$
(22.7a)

és

$$G_{2\ell}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} \mathrm{d}u'(u'-u) \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u' \to u'') \,\mathrm{d}u''.$$
(22.7b)

E mennyiségek számítására és értelmezésére még visszatérünk. $q_{\ell}(u)$ -nak most kapott sorfejtését a (22.5) egyenletbe helyettesítjük:

$$q_{\ell} + a_{\ell} \frac{\mathrm{d}q_{\ell}}{\mathrm{d}u} = G_{1\ell} \Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell} + G_{2\ell} \frac{\mathrm{d}(\Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell})}{\mathrm{d}u} + a_{\ell} \left[\frac{\mathrm{d}G_{1\ell}}{\mathrm{d}u} \Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell} + G_{1\ell} \frac{\mathrm{d}(\Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell})}{\mathrm{d}u} + \frac{\mathrm{d}G_{2\ell}}{\mathrm{d}u} \frac{\mathrm{d}(\Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell})}{\mathrm{d}u} + G_{2\ell} \frac{\mathrm{d}^{2}(\Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell})}{\mathrm{d}u^{2}} \right].$$

Az "*u*" argumentumot a rövidség kedvéért nem írtuk ki. Az itt szereplő második deriváltat elhagyhatjuk, hiszen a neki megfelelő rendű tagokat már $q_{\ell}(u)$ eredeti sorfejtésében is elhagytuk. Elhanyagoljuk továbbá a $dG_{2\ell}/du$ deriváltat. Ezzel legutóbbi eredményünket így írhatjuk:

$$q_{\ell} + a_{\ell} \frac{\mathrm{d}q_{\ell}}{\mathrm{d}u} = \left(G_{1\ell} + a_{\ell} \frac{\mathrm{d}G_{1\ell}}{\mathrm{d}u}\right) \Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell} + \left(G_{2\ell} + a_{\ell} G_{1\ell}\right) \frac{\mathrm{d}(\Sigma_{\mathrm{s}} \psi_{\ell})}{\mathrm{d}u}.$$
 (22.8)

 a_{ℓ} -t úgy választjuk meg, hogy a $\Sigma_{s} \psi_{\ell}$ szórási sűrűség deriváltja a jobb oldalról eltűnjön:

$$a_{\ell}(u) = -\frac{G_{2\ell}(u)}{G_{1\ell}(u)},$$
(22.9)

hiszen ekkor az egyenlet felveszi a (22.5) szerint kívánt alakját. Ha ezt (22.8) jobb oldalába helyettesítjük, az egyenletet a következő alakra hozhatjuk:

$$q_{\ell}(u) + a_{\ell}(u)\frac{\mathrm{d}q_{\ell}(u)}{\mathrm{d}u} = G_{1\ell}(u)\Sigma_{\mathrm{s}}\psi_{\ell}(u)\left(1 - \frac{\mathrm{d}a_{\ell}(u)}{\mathrm{d}u}\right).$$
(22.10)

Itt figyelembe vettük (22.9)-et:

$$\frac{\mathrm{d}a_{\ell}}{\mathrm{d}u} = -\frac{\mathrm{d}G_{2\ell}}{\mathrm{d}u}\frac{1}{G_{1\ell}} + \frac{G_{2\ell}}{G_{1\ell}^2}\frac{\mathrm{d}G_{1\ell}}{\mathrm{d}u} = -\frac{\mathrm{d}G_{2\ell}}{\mathrm{d}u}\frac{1}{G_{1\ell}} - \frac{a_{\ell}}{G_{1\ell}}\frac{\mathrm{d}G_{1\ell}}{\mathrm{d}u}$$

A $dG_{2\ell}/du$ deriváltat fentebb már elhanyagoltuk, vagyis

$$a_{\ell} \frac{\mathrm{d}G_{1\ell}}{\mathrm{d}u} \approx -G_{1\ell} \frac{\mathrm{d}a_{\ell}}{\mathrm{d}u}$$

Befejezésül kiszámítjuk a "G" együtthatókat – legalábbis közelítőleg. (22.2) szerint a (22.7) egyenletekben szereplő $g_{\ell}(u' \rightarrow u)$ közelítőleg csak a letargiák különbségétől függ:

$$g_{\ell}(u' \to u) \approx g_{\ell}(u' - u). \tag{22.11}$$

Ezt kihasználva a (22.7) képletek jobb oldalán parciálisan tudunk integrálni. Vegyük például (22.7a)-t:

$$G_{1\ell}(u) \approx \int_{u-\varepsilon}^{u} du' \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u'-u'') du'' = \left[(u'-u) \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}(u'-u'') du'' \right]_{u'=u-\varepsilon}^{u} - \int_{u-\varepsilon}^{u} du'(u'-u) \left\{ g_{\ell}(u'-u'-\varepsilon) + \int_{u}^{u'+\varepsilon} g_{\ell}'(u'-u'') du'' \right\} =$$
$$= -\int_{u-\varepsilon}^{u} du' (u'-u) \left\{ g_{\ell}(-\varepsilon) + \left[-g_{\ell}(u'-u'') \right]_{u''=u}^{u'+\varepsilon} \right\} =$$
$$= \int_{u-\varepsilon}^{u} (u-u') g_{\ell}(u'-u) du'.$$

 ℓ = 0-ra ennek egyszerű fizikai értelme van (vö. (I.2.19b)):

$$G_{10}(u) = \int_{u-\varepsilon}^{u} (u-u')g_0(u'-u) \, \mathrm{d}u' = \xi(u).$$
(22.12)

Hasonlóan beláthatjuk, hogy

$$G_{2\ell}(u) = -\int_{u-\varepsilon}^{u} \frac{(u-u')^2}{2} g_{\ell}(u'-u) du'.$$
 (22.13)

Ennek megfelelően az izotrop lassulási sűrűségre vonatkozó Greuling-Goertzel egyenlet ($\ell = 0$) szokásos alakja (22.10) helyett a következő:

$$q_0(u) + a_0(u)\frac{dq_0(u)}{du} = \xi(u)\Sigma_s(u)\psi_0(u)\left(1 - \frac{da_0(u)}{du}\right).$$
 (22.14)

A $q_1(u)$ lineárisan anizotrop lassulási sűrűségre vonatkozó egyenlet hasonló alakú:

$$q_1(u) + a_1(u)\frac{\mathrm{d}q_1(u)}{\mathrm{d}u} = G_{11}(u)\Sigma_{\mathrm{s}}(u)\psi_1(u)\left(1 - \frac{\mathrm{d}a_1(u)}{\mathrm{d}u}\right),\tag{22.15}$$

amely formálisan megegyezik a (22.5) egyenlettel. A fentiekben láttuk, hogy $\psi_1(u)$ a J(u) árammal van kapcsolatban. Két utóbbi egyenletünkből kiolvasható, hogy

$$b_{\ell}(u) = G_{1\ell}(u) \left(1 - \frac{\mathrm{d}a_{\ell}(u)}{\mathrm{d}u}\right), \qquad \ell = 0 \text{ és } 1.$$
 (22.16)

A későbbiek szempontjából tanulságos az a és b együtthatókat legalább abban az esetben kiszámítani, amikor u-tól függetlenek. (22.12)-ből, illetve (12.24)-ből látszik, hogy ebben az esetben

$$b_0 \equiv G_{10} = \xi = \frac{2}{A} - \frac{4}{3A^2} + \frac{2}{3A^3} + \dots$$

$$b_{1} \equiv G_{11} = \int_{u-\varepsilon}^{u} (u-u') \left[(A+1)e^{-\frac{u-u'}{2}} - (A-1)e^{\frac{u-u'}{2}} \right] \frac{e^{-(u-u')}}{2(1-\alpha)} du' =$$
$$= \int_{E}^{E/\alpha} \left[(A+1)\sqrt{\frac{E}{E'}} - (A-1)\sqrt{\frac{E'}{E}} \right] \ln \frac{E'}{E} \frac{EdE'}{2E'^{2}(1-\alpha)} = \frac{2(A+1)}{1-\alpha} \int_{\sqrt{\alpha}}^{1} (\sqrt{\alpha} - x^{2}) \ln x \, dx \, .$$

Az integrál értékét 1/A szerint haladó hatványsorba lehet fejteni:

$$b_1 = \frac{4}{1-\alpha} \left[\frac{1+\sqrt{\alpha}+\alpha}{9} - \sqrt{\alpha} + \frac{\ln\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}} \left(\frac{\alpha^{3/2}}{3} - \alpha \right) \right] = -\frac{2}{3A} + \frac{4}{3A^2} - \frac{8}{15A^3} + \dots$$

(22.13) szerint G_{20} az egy rugalmas ütközésben fellépő letargiaváltozás négyzetes átlagának a fele. Egyszerű számítással kapjuk:

$$G_{20} = -\int_{u-\varepsilon}^{u} \frac{(u-u')^2}{2} \frac{e^{-(u-u')}}{1-\alpha} du' = \xi - \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\alpha}{1-\alpha}$$

(22.9) szerint tehát

$$a_0 = 1 - \frac{\varepsilon^2}{2\xi} \frac{\alpha}{1 - \alpha} \, .$$

Deutériumra (A = 2-re) ennek az értéke 0,40; nagy A-ra pedig:

$$a_0 \cong \frac{4}{3A} - \frac{4}{9A^2} + \frac{44}{135A^3} + \dots$$

A fentiekhez hasonló módon kapjuk, hogy

$$G_{21} = -\frac{2(A+1)}{1-\alpha} \int_{\sqrt{\alpha}}^{1} (x^2 - \sqrt{\alpha}) (\ln x)^2 dx$$

Ezt az integrált is ki lehet értékelni analitikusan:

$$G_{21} = \frac{4}{1-\alpha} \left[\frac{2(1+\sqrt{\alpha}+\alpha)}{27} - 2\sqrt{\alpha} + \frac{2\ln\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}} \left(\frac{\alpha^{3/2}}{9} - \alpha \right) - \frac{(\ln\sqrt{\alpha})^2}{1-\sqrt{\alpha}} \left(\frac{\alpha^{3/2}}{3} - \alpha \right) \right] = -\frac{4}{3A^2} + \frac{32}{15A^3} - \frac{68}{45A^4} + \dots,$$

amivel *a*¹ aszimptotikája

$$a_1 = \frac{G_{21}}{G_{11}} \cong \frac{2}{A} + \frac{4}{5A^2} + \frac{34}{15A^3} + \dots$$

A fentiekben közölt sorfejtések nagy *A*-ra (mintegy 100 felett) nélkülözhetetlenek. A *G* tényezők kiszámítására szolgáló integrálok, illetve azok analitikus kifejezései 1/*A*-val nagyon gyorsan csökkennek. Például *G*₂₁-nek első négy 1/*A* szerinti deriváltja eltűnik az $A \rightarrow \infty$ határesetben, és ez sok különböző előjelű mennyiség összegeként adódik így. Ezért kiszámításuk során numerikus nehézségek merülhetnek fel. Befejezésül megjegyezzük, hogy a fenti számítások analitikusan elvégezhetők akkor is, amikor a rugalmas szórás TKR-ben anizotrop. Természetesen ekkor sokkal bonyolultabb képletek jönnek ki, amelyek használatakor szintén fellépnek az említett numerikus problémák.

2.2.2. Egyéb lassulási modellek

A Greuling-Goertzel közelítés nem az egyetlen közhasználatú lassulási modell. A jelen szakaszban először ezek némelyikét ismertetjük, majd megvizsgáljuk érvényességük határait.

Mindenekelőtt meg kell jegyeznünk, hogy vannak programok, amelyek a neutronlassulást a tényleges szórási magfüggvények segítségével írják le. Érvényességükön nincs mit vizsgálni. A ma használatos programok nagy része azonban olyan időszakban készült, amikor a számítógépi lehetőségek a lassulásnak ilyen kezelését még nem tették lehetővé. Ezért dolgozták ki *akkor* a (22.5) alakú modelleket. Mivel azonban e programok ma is használatban vannak, nem kerülhetjük meg az ilyen típusú modellek érvényességének az elemzését. Az egyszerűség kedvéért a lassulásnak csak az izotrop részét ($\ell = 0$) tekintjük, és feltesszük, hogy a szórás TKR-ben izotrop. Ekkor mind *a*, mind *b* állandó, vagyis *u*-tól független.

Három (22.5) alakú modellt említünk meg. Mindegyiket az a és b paraméterek konkrét értékének a megadásával definiáljuk:

(1) Fermi-modell

Nagy tömegszámú moderátorok esetében megengedhető a Placzek-tranziensek elhanyagolása. Ekkor a = 0 és $b = \xi$, vagyis

$$q(u) = \xi \Sigma_s(u) \psi(u). \tag{22.17}$$

Az így kapott *Fermi-modell*t használják általában az alumíniumnál nehezebb elemekre (A > 27).

(2) Wigner-modell

A reaktorfizika elemeiben a rezonancia-befogás tárgyalásakor a *Wigner-modell*t használtuk: $a = b = \xi$. Az alábbi analízisből következik majd, hogy ebben a modellben

$$q(u) = \xi \Sigma_{t}(u) \psi(u). \qquad (22.18)$$

Azt is meg fogjuk mutatni, hogy ez elsősorban a rezonanciák kezelésére alkalmas. Hidrogénre a modell egzakt [Brf].

(3) Greuling-Goertzel modell

A Geuling-Goertzel modellt részleteiben tárgyaltuk az előző részben. Nem ismételjük meg az a és b paraméterek ott megadott értékeit.

A (22.5) alakú modellek általános jellemzői

Az alábbi analízis kedvéért a szórást TKR-ben izotropnak tekintjük, és csak az $\ell = 0$ -hoz tartozó mennyiségekkel foglalkozunk. Az egyszerűség kedvéért el is hagyjuk a "0" indexet. A letargia eloszlásfüggvénye

$$g(u' \rightarrow u) = g(u' - u) = \frac{e^{-(u-u')}}{1-\alpha}$$
, ha $0 \le u - u' \le \varepsilon$
és 0 egyébként. Legyen továbbá

$$R(u' \to u) = R(u' - u) = \int_{u}^{u' + \varepsilon} g(u' \to u'') \, \mathrm{d}u'' = \frac{\mathrm{e}^{-(u - u')} - \alpha}{1 - \alpha}, \quad \mathrm{ha} \qquad 0 \le u - u' \le \varepsilon$$

és 0 egyébként. Ezekkel a jelölésekkel (22.6) így írható:



22.1. ábra. Az egzakt és a Greuling-Goertzel magfüggvény összehasonlítása (A = 12)

Belátjuk, hogy a (22.5) alakú modellek az alábbi alakú szórási magfüggvényeknek felelnek meg (u-tól független a és b esetén):

$$g^*(u'-u) = \frac{b}{a^2} e^{-(u-u')/a}$$
, ha $0 \le u-u'$ (22.19a)

és

$$R^*(u'-u) = \frac{b}{a} e^{-(u-u')/a}$$
, ha $0 \le u-u'$. (22.19b)

Ezek olyan magfüggvények, amelyek nemcsak legfeljebb ε értékű letargianövekedést engednek meg, hanem tetszőlegeset. A (22.5) alakú modellek tehát folytonos energiacserével helyettesítik a valóságban véges energiaugrásokban történő lassulást. Annak belátásához, hogy (22.5) tényleg ezeknek a magfüggvényeknek felel meg, ezeket a képleteket q(u) legutóbbi képletébe helyettesítjük:

$$q(u) = \int_{-\infty}^{u} \Sigma_{s}(u') \psi(u') R^{*}(u'-u) du'.$$
(22.20)

Ezt *u* szerint deriválva kapjuk a kívánt eredményt:

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}u} = \frac{b}{a} \Sigma_s \psi - \frac{q}{a},$$

ami nem más, mint (22.5). A Greuling-Goertzel és az egzakt magfüggvényt a 22.1. ábrán hasonlítjuk össze szénre (A = 12). Szemmel látható, hogy a két görbe alatti terület eltérő: az egzakt görbe alatti terület nyilván 1, viszont a Greuling-Goertzel görbe esetében a terület $\frac{b}{a} = 2 - \frac{2}{A} - \frac{1}{12A^2} + \dots$ Szénre vonatkozóan ez 1,83. (22.20) szerint megbecsülhetjük, milyen hatással van ez a lassulási sűrűségre. Ha a $\psi(u')$ függvényt állandónak vesszük, az egzakt magfüggvénnyel $q(u) = \xi \Sigma_s \psi$ -t kapunk, a (22.19b) magfüggvénnyel pedig $q^*(u) = b \Sigma_s \psi$ -t. Mivel $b = \xi$, ebben a közelítésben a két lassulási sűrűség megegyezik.

A későbbi analízis kedvéért a következőkben kiszámítjuk a végtelen méretű reaktorra érvényes rezonancia-kikerülési valószínűséget. A 2.1.2. szakasz jelöléseivel a végtelen méret azt jelenti, hogy B = 0. Ha a (21.15) egyenleteket (21.9a), (22.9c) és (22.4) felhasználásával átrendezzük, majd letargiaváltozóra átírjuk, a következő eredményt kapjuk:

$$\Sigma_{a}(u)\psi(u) = -\frac{\mathrm{d}q(u)}{\mathrm{d}u} + \delta(u).$$
(22.21)

Az egyszerűség kedvéért még azt a közelítést is alkalmazzuk, hogy a neutronforrás az u = 0 letargián monoenergetikus. Ezt fejezi ki a $\delta(u)$ forrástag. Ezt az egyenletet megszorozzuk *a*-val és hozzáadjuk a (22.5) egyenlethez:

$$[a\Sigma_{a}(u)+b\Sigma_{s}(u)]\psi(u)=q(u)+a\delta(u)$$

amiből a forrásletargiától távoli letargiákra kapjuk:

$$\psi(u) = \frac{q(u)}{a\Sigma_{a}(u) + b\Sigma_{s}(u)}.$$
(22.22)

Ha ezt (22.21)-be helyettesítjük, és feltesszük, hogy a forrás letargiáján nincs abszorpció ($\Sigma_a(0) = 0$), egyszerű levezetéssel kapjuk, hogy az U letargiáig való rezonancia-kikerülési valószínűség

$$p(0 \to U) = \exp\left\{-\int_{0}^{U} \frac{\Sigma_{a}(u)}{a\Sigma_{a}(u) + b\Sigma_{s}(u)} du\right\}.$$
(22.23)

Ez a képlet érvényes minden, (22.5) alakú lassulási modellre. Az alábbiakban két esetet vizsgálunk meg a fenti modellektől független módszerekkel, és megnézzük, a kapott végeredmény melyik modellnek felel meg.

Keskeny rezonancián való abszorpció

Egy Γ szélességű rezonanciát egy négyszög alakú csapdával közelítünk: ha lassulás közben a neutron ebbe eső letargiára tesz szert, Σ_a/Σ_t valószínűséggel abszorbeálódik. Ha a neutron utolsó ütközését egy ettől távoli u' < 0 letargián szenvedte, és a rezonanciát a $(0, \Gamma)$ intervallumba helyezzük, akkor az abszorpció valószínűsége

$$1-p=\int_{-\infty}^{0}\frac{\mathrm{d}u'}{\xi}\int_{0}^{\Gamma}\mathrm{d}u\frac{\Sigma_{\mathrm{a}}(u)}{\Sigma_{\mathrm{a}}(u)+\Sigma_{\mathrm{s}}(u)}g(u'-u)\approx\int_{-\infty}^{0}\frac{\mathrm{d}u'}{\xi}g(u')\int_{0}^{\Gamma}\mathrm{d}u\frac{\Sigma_{\mathrm{a}}(u)}{\Sigma_{\mathrm{a}}(u)+\Sigma_{\mathrm{s}}(u)},$$

mivel a rezonancián kívül $\Sigma_s \psi(u') = 1/\xi^8 g(u'-u)$ azért emelhető ki az *u* szerinti integrál alól, mert a rezonancia keskeny, továbbá ugyanezért írhatjuk, hogy

$$\int_{-\infty}^{0} g(u') \mathrm{d}u' = 1.$$

Ezzel a rezonancia-kikerülési valószínűséget közelítőleg a

$$p = 1 - \int_{0}^{\Gamma} \frac{1}{\xi} \cdot \frac{\Sigma_{a}(u)}{\Sigma_{a}(u) + \Sigma_{s}(u)} du \approx \exp\left\{-\int_{0}^{\Gamma} \frac{1}{\xi} \cdot \frac{\Sigma_{a}(u)}{\Sigma_{a}(u) + \Sigma_{s}(u)} du\right\}$$

alakra hozhatjuk. Ha több rezonanciát együtt tekintünk, akkor az eredő valószínűség

$$p(0 \to U) = \exp\left\{-\int_{0}^{U} \frac{\Sigma_{a}(u)}{\xi \Sigma_{a}(u) + \xi \Sigma_{s}(u)} du\right\}$$

alakban adódik, ami a Wigner-modellnek felel meg. Ez a modell tehát a rezonanciaabszorpció tárgyalására alkalmas elsősorban.

Kicsi és lassan változó $\Sigma_{\alpha}/\Sigma_{s}$ arány

Legyen $c(u) = \Sigma_a(u)/\Sigma_s(u)$ az *u* letargia lassan változó függvénye. Ebben az esetben (22.21) így írható:

$$\delta(u) - \frac{\mathrm{d}q(u)}{\mathrm{d}u} = c(u) \Sigma_{\mathrm{s}} \psi$$

Vegyük ehhez hozzá a lassulási sűrűség definícióját:

$$q(u) = \int_{0}^{u} \Sigma_{s} \psi(u') R(u'-u) \,\mathrm{d}u'.$$

Ha e két egyenletből kiküszöböljük a $\Sigma_s \psi$ szórási sűrűséget, a forrásletargiától távol a

$$q(u) = -\int_{0}^{u} \frac{1}{c(u')} \frac{dq(u')}{du'} R(u'-u) du'$$

eredményt kapjuk. Az aszimptotikus megoldást keressük a

$$q_{\rm asz.}(u) = \exp\left\{-\int_{0}^{u} m(u'') du''\right\}$$
(22.24)

alakban, ahol m(u) egy később meghatározandó, szintén lassan változó függvény. Ezt a próbakifejezést az előbbi egyenletbe helyettesítve és kihasználva, hogy c(u) és m(u)lassan változó függvények (vagyis az integrál alól kiemelhetők), a következő egyenletet kapjuk m(u)-ra:

$$m(u) \int_{0}^{u} R(u'-u) \exp\left\{ \int_{u'}^{u} m(u'') du'' \right\} du' \approx c(u).$$
(22.25)

⁸ Ez a forrásenergiától távol, abszorpciómentes közegben kialakuló szórási sűrűség.

Látszik, hogy m(u) is kicsi, ha c(u) kicsi. Ezért első közelítésben az integráljel alatti exponenciális kifejezést 1-nek vehetjük, és így

$$m(u)\int_{0}^{u}R(u'-u)\mathrm{d}u'=m(u)G_{10}=m(u)\xi\approx c(u).$$

Magasabb rendű közelítést kapunk, ha az exponenciálist az első rendig sorba fejtjük. Az első rendű tagban alkalmazzuk a

$$\int_{u'}^{u} m(u'') \mathrm{d}u'' \approx (u - u') m(u)$$

közelítést. Ezzel azt kapjuk, hogy

$$m(u)(G_{10}-m(u)G_{20}) \approx c(u)$$

(vö. (22.7b)). A (22.9) képlet alapján ezt tovább alakíthatjuk:

$$m(u)(\xi + m(u)\xi \cdot a) \approx m(u)(\xi + c(u)\cdot a) \approx c(u),$$

vagyis

$$m(u) \approx \frac{c}{\xi + ca} = \frac{\Sigma_a}{\xi \Sigma_s + a\Sigma_a} = \frac{\Sigma_a}{b\Sigma_s + a\Sigma_a}$$

mivel a tekintett esetben $b = \xi$. Ezt (22.24)-be helyettesítve kapjuk a rezonanciakikerülési valószínűséget:

$$p(0 \rightarrow U) = \exp\left\{-\int_{0}^{U} \frac{\Sigma_{a}(u)}{a\Sigma_{a}(u) + b\Sigma_{s}(u)} du\right\},\$$

ami éppen a Greuling-Goertzel közelítésnek felel meg (vö. (22.23)). Ezt a közelítést tehát a rezonanciáktól távoli letargiákon célszerű alkalmazni, ahol valóban fel lehet tételezni, hogy a Σ_a/Σ_s arány kicsi és lassan változik. A rezonanciák közelében viszont valami speciális eljárásra van szükség.

2.3. Áttérés a sokcsoport-közelítésre

A konzisztens B_1 és P_1 egyenleteket sokcsoport-közelítésben oldjuk meg. Az alábbiakban ezt a Magyarországon kifejlesztett GRACE program ismertetése révén tárgyaljuk. Mint már a 2.1. alfejezetben említettük, ez a program (21.20)-ban a "–" egyenleteket oldja meg:

$$\Sigma_{t}(E)\psi_{-}(E) - iBJ_{-}(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{0}(E' \to E)\psi_{-}(E')dE' + F_{-}(E),$$

$$h(B, \Sigma_{t}) \cdot \Sigma_{t}(E)J_{-}(E) - \frac{iB}{3}\psi_{-}(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{1}(E' \to E)J_{-}(E')dE'$$

A 2.1.2. részben megmutattuk, hogy $\psi_{-} = \psi_{+}$ és $J_{-} = -J_{+}$. Ezért a "–" indexet ψ mellől elhagyhatjuk, viszont *J* esetében célszerű megtartani.

g	$E_g(eV)$	u_g	Δu_g
1	$7,189 \cdot 10^{6}$	0,33003	0,33003
2	$5,169 \cdot 10^{6}$	0,65991	0,32988
3	$3,716 \cdot 10^{6}$	0,98994	0,33003
4	$2,671 \cdot 10^{6}$	1,32013	0,33019
5	$1,920 \cdot 10^{6}$	1,65026	0,33013
6	$1,382 \cdot 10^{6}$	1,97978	0,32952
7	9,926·10 ⁵	2,31001	0,33023
8	$8,2085 \cdot 10^5$	2,50000	0,18999
9	$5,130 \cdot 10^5$	2,97006	0,47006
10	$3,688 \cdot 10^5$	3,30008	0,33002
11	$2.652 \cdot 10^5$	3,62985	0,32977
12	$1.906 \cdot 10^5$	3,96016	0,34031
13	$1.370 \cdot 10^5$	4,29036	0,33020
14	$5,572 \cdot 10^4$	5,19000	0,89964
15	$2.265 \cdot 10^4$	6.09018	0.90018
16	$9.210 \cdot 10^{3}$	6,99005	0.89987
17	$5,5308 \cdot 10^3$	7,50000	0,50995
18	$1.522 \cdot 10^3$	8,79031	1,29031
19	619	9,68999	0,89968
20	251,7	10,5899	0,8999
21	190	10,8710	0,2811
22	135	11,2128	0,3418
23	110	11,4176	0,2048
24	82	11,7113	0,2937
25	63	11,9749	0,2636
26	45	12,3114	0,3365
27	32	12,6523	0,3409
28	26	12,8600	0,2077
29	20	13,1223	0,2623
30	15	13,4100	0,2877
31	11	13,7202	0,3102
32	8,0	14,0386	0,3184
33	5,4	14,4317	0,3931
34	3,15	14,9707	0,5390
35	1,84	15,5083	0,5376
36	1,4	15,7816	0,2733
37	0,625	16,5881	0,8065
38	0,40	17,0344	0,4463
39	0,20	17,7275	0,6931
40	0,0	$+\infty$	_

23.1. táblázat. A GRACE program csoportszerkezete

Ezeket az egyenleteket átírjuk letargiára, továbbá szétválasztjuk a rugalmas és rugalmatlan szórást. Az előbbit a 2.2. fejezetben bevezetett lassulási sűrűségek segítségével fejezzük ki. Az utóbbiról feltételezzük, hogy LR-ben izotrop. Ezzel a fenti egyenletek a következő alakba mennek át:

$$\Sigma_{t}(u)\psi(u) - iBJ_{-}(u) = \Sigma_{s}(u)\psi(u) - \frac{dq_{0}(u)}{du} + I(u) + f(u), \qquad (23.1a)$$

$$h(B, \Sigma_{t}) \cdot \Sigma_{t}(u) J_{-}(u) - \frac{\mathrm{i}B}{3} \psi(u) = \Sigma_{s1}(u) J_{-}(u) - \frac{\mathrm{d}q_{1}(u)}{\mathrm{d}u},$$
 (23.1b)

ahol

$$I(u) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{in}(u' \to u) \psi(u') du'$$
(23.2)

a rugalmatlan szórások által létrehozott forrás. A fluxus (21.25a) szerinti normálása miatt írhattuk az $F_{-}(E)$ hasadási forrás helyére az f(E) hasadási spektrumot (amely (23.1a)-ban már f(u)). Amint a 2.1.3. szakaszban tárgyaljuk, a $J_{-}(u)$ és $q_{1}(u)$ függvények tiszta képzetesek, amikor *B* valós, és valósak, amikor *B* képzetes. Ennek a konzekvenciáira a következőkben még visszatérünk.

Az 1.2. alfejezetben általában tárgyaltuk a neutronlassulás leírására szolgáló lassulási modelleket. Most ezt konkretizáljuk. A reaktort alkotó izotópok azonosítására bevezetjük a "*k*" indexet, amelynek a segítségével a fenti egyenletekben szereplő bármelyik makroszkopikus hatáskeresztmetszet így írható:

$$\varSigma = \sum_{k} N_k \sigma_k , \qquad (23.4a)$$

ahol N_k a "k" indexű izotóp magsűrűsége. Ha ezt a rugalmas szórási magfüggvényre alkalmazzuk, azt kapjuk, hogy a lassulási sűrűségek is az egyes izotópokra külön-külön vonatkozó lassulási sűrűségek összegei:

$$q_{\ell}(u) = \sum_{k} q_{\ell k}(u),$$
 $\ell = 0$ és 1. (23.4b)

Ez a felbontás lehetővé teszi, hogy az egyes izotópokra különböző lassulási modelleket használjunk. A GRACE program esetében a következő jelöléseket vezetjük be:

- A "F" indexet alkalmazzuk azokra az izotópokra, amelyekre a (22.17) egyenlet szerinti Fermi-modell vonatkozik. A GRACE esetében ezek az alumíniumnál nehezebb elemek ($A_{\rm F} > 27$).
- A "f" indexet alkalmazzuk azokra az izotópokra, amelyek esetében $\ell = 0$ -ra a (22.5) egyenlet szerinti Greuling-Goertzel-modell vonatkozik. A GRACE esetében ez az $A_f \le 27$ elemeket jelenti.
- A "h" indexet alkalmazzuk azokra az izotópokra, amelyeknél l = 1-re is a (22.5) egyenlet szerinti Greuling-Goertzel-modell vonatkozik. A GRACE esetében ez három elemet jelent: hidrogén, deutérium és berillium. A többi elemre tehát elhanyagoljuk az áramra vonatkozó lassulást.

Ha nem szükséges ezek között az esetek között különbséget tenni, továbbra is az általános "k" indexet használjuk.⁹

2.3.1. A sokcsoport-modellhez tartozó mennyiségek

A sokcsoport-egyenletekhez úgy jutunk, hogy – az általános szokás szerint – a folytonos letargiaváltozóban felírt (23.1) egyenleteket integráljuk az egyes csoportok-

⁹ A szövegben hol "elemről", hol "izotópról" beszélünk. A kettőn ugyanazt kell érteni.

ra vonatkozóan. Először bevezetünk néhány jelölést. Az egyes energiacsoportokat a "g" indexszel jelöljük. A g-edik csoport határai: (u_{g-1}, u_g) . Az első csoport alsó határa $u_0 = 0$.¹⁰ Az utolsó a termikus csoport, amelynek a felső határa (letargiában) + ∞ . E tartomány tárgyalása kívül esik a lassuláselmélet keretein, ezért a termikus csoporthoz tartozó csoportállandók meghatározását egy másik fejezetben tárgyaljuk. Egyelőre csak annyit tételezünk fel, hogy az alábbiakban definiált csoportállandóknak ezt a részét egy külön programmal ki tudjuk számítani. Az egyes csoportok határai a 23.1. táblázatban találhatók.

A g-edik epitermikus csoportra vonatkozóan definiáljuk az alábbi mennyiségeket:

$$\begin{split} \text{csoportfluxus:} \qquad & \mathcal{P}_g = \int_{u_{g,1}}^{u_g} \psi(u) \mathrm{d}u \\ \text{csoportfaram:} \qquad & J_g = -\mathrm{i} \int_{u_{g,1}}^{u_g} J_{-}(u) \mathrm{d}u \\ \text{csoportforrás:} \qquad & S_g = \int_{u_{g,1}}^{u_g} f(u) \mathrm{d}u \\ \text{rugalmatlan szórás:} \qquad & I_g = \int_{u_{g,1}}^{u_g} I(u) \mathrm{d}u \\ \text{lassulási sűrűség:} \qquad & q_{gk} = q_{0k} (u_g) \\ & q_g = \sum_k q_{gk} \\ \text{anizotrop lassulási sűrűség:} \qquad & p_{gk} = -\mathrm{i}q_{1k} (u_g) \\ & p_g = \sum_k p_{gk} \\ \text{csoportállandók:} \qquad & \Sigma_{gk}^{x} = \frac{1}{\mathcal{P}_g} \int_{u_{g,1}}^{u_g} \Sigma_g^{x}(u) \psi(u) \mathrm{d}u , x = \mathrm{t, a, s, f, in ...} \\ & h_g = h(B, \Sigma_g^{\mathrm{t}}) \\ \text{ahol} \qquad & \Sigma_g^{x} = \sum_k \Sigma_g^{x} , \qquad x = \mathrm{t, a, s, f, in, ...} \\ \text{továbbá} \qquad & \mu_{gk} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \frac{\Sigma_k^{\mathrm{s}}(u)}{\Sigma_k^{\mathrm{s}}(u)} \mathrm{d}u = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \mathcal{J}_g(u) \mathrm{d}u \\ & \xi_{gk} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \frac{G_{10,k}(u)}{\Sigma_k^{\mathrm{s}}(u)} \mathrm{d}u = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \mathcal{J}_g(u) \mathrm{d}u \\ \end{split}$$

ahol

 $^{^{10}}$ Ez a GRACE program esetében az E_0 = 10 MeV energiának felel meg.

$$\eta_{gk} = -\frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \frac{G_{11,k}(u)}{\Sigma_k^s(u)} du$$
$$\Gamma_{gk} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} a_{0k}(u) du$$
$$Z_{gk} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} a_{1k}(u) du$$

Az itt szereplő $G_{n\ell}$ és a_{ℓ} mennyiségeket a (22.11), illetve a (22.5) és (22.7) képletekben definiáltuk. Mostani képleteinkben feltüntettük, hogy mindegyiket a "k" indexű elemre vonatkozóan kell alkalmazni.

2.3.2. A sokcsoport-egyenletek és megoldásuk

Az előző szakaszban bevezetett mennyiségek segítségével úgy kapjuk meg a sokcsoport-egyenleteket, hogy a (23.1) egyenleteket integráljuk a *g*-edik csoportra:

$$\begin{split} \Sigma_{g}^{t} \Phi_{g} + BJ_{g} &= \Sigma_{g}^{s} \Phi_{g} + q_{g-1} - q_{g} + S_{g} + I_{g}, \\ h_{g} \Sigma_{g}^{t} J_{g} - \frac{B}{3} \Phi_{g} &= J_{g} \sum_{k} \Sigma_{gk}^{s} \mu_{gk} + p_{g-1} - p_{g}. \end{split}$$

Az utóbbi egyenlethez úgy jutottunk, hogy az integrálás előtt a (23.1b) egyenletet –i-vel beszoroztuk.

 $B^2 > 0$ mellett az előbbi mérlegegyenletben a BJ_g tag akkor jelenti a neutronkifolyást, ha a valós J_g mindegyik csoportban pozitív. Így jelenti a J_g mennyiség a szokványos értelemben vett neutronáramot. $B^2 < 0$ esetében a (21.26) egyenleteket kell integrálni ($B = i\kappa$):

$$\begin{split} \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{t}} \boldsymbol{\Phi}_g &- \kappa \boldsymbol{J}_g = \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\Phi}_g + \boldsymbol{q}_{g-1} - \boldsymbol{q}_g + \boldsymbol{S}_g + \boldsymbol{I}_g \,, \\ \boldsymbol{h}_g \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{t}} \boldsymbol{J}_g &- \frac{\kappa}{3} \boldsymbol{\Phi}_g = \boldsymbol{J}_g \sum_k \boldsymbol{\Sigma}_{gk}^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\mu}_{gk} + \boldsymbol{p}_{g-1} - \boldsymbol{p}_g \,, \end{split}$$

amelyben a csoportáramot a

$$J_g = \int_{u_{g-1}}^{u_g} J_-(u) \mathrm{d}u$$

egyenlettel definiáljuk, hiszen a 2.1.3. szakaszban láttuk, hogy ilyenkor $J_{-}(u)$ valós. A két esetre vonatkozóan a következő konvencióval tudunk egy közös egyenletrendszert felírni. Megállapodunk abban, hogy a $B^2 > 0$ esetben B előjelét pozitívnak, a $B^2 < 0$ esetben pedig negatívnak választjuk.¹¹ Ezzel a sokcsoport-egyenletek mindkét esetben érvényes alakja a következő:

$$\Sigma_{g}^{t} \Phi_{g} + BJ_{g} = \Sigma_{g}^{s} \Phi_{g} + q_{g-1} - q_{g} + S_{g} + I_{g}, \qquad (23.10a)$$

¹¹ Az így definiált negatív előjelű *B* jelentése tehát $-\kappa$.

$$h_{g}\Sigma_{g}^{t}J_{g} - \frac{|B|}{3}\Phi_{g} = J_{g}\sum_{k}\Sigma_{gk}^{s}\mu_{gk} + p_{g-1} - p_{g}.$$
(23.10b)

A most bevezetett konvencióval a (21.27b) és (21.27c) összefüggések szintén egyetlen egyenletben egyesíthetők:

$$P_{\rm NL} = 1 - \sum_{g} B J_g \ . \tag{23.11}$$

A lassulási sűrűségekre a (22.10) egyenletek integrálása révén kapjuk meg a sokcsoport-egyenleteket. Egyelőre nem teszünk különbséget az f és F elemek között, vagyis az általános "k" indexet használjuk. Előbb (22.10)-et integráljuk $\ell = 0$ mellett:

$$\frac{\Delta u_{g}}{2} (q_{gk} + q_{g-1,k}) + \Gamma_{gk} (q_{gk} - q_{g-1,k}) = \xi_{gk} \Sigma_{gk}^{s} \Phi_{g} \left(1 - \frac{a_{0k} (u_{g}) - a_{0k} (u_{g-1})}{\Delta u_{g}} \right).$$

A Fermi-elemekre ezt úgy specializáljuk, hogy a = 0 és $\Gamma = 0$. Ezzel kapjuk a rájuk vonatkozó lassulási sűrűséget:

$$q_{gF} = \frac{\Phi_g}{\Delta u_g} \sum_{k \in F} \xi_{gk} \Sigma_{gk}^{s} , \qquad (23.12a)$$

mivel ezekre az elemekre $q_g \approx q_{g-1}$. A Greuling-Goertzel elemek esetében további jelöléseket vezetünk be:

$$\begin{split} & \mu_{gk} \Sigma_{gk}^{\mathrm{s}} = N_k M_{gk}, \\ & \xi_{gk} \Sigma_{gk}^{\mathrm{s}} = N_k \Theta_{gk}, \\ & \xi_{gk} \Sigma_{gk}^{\mathrm{s}} \left(1 - \frac{a_{0k} \left(u_g \right) - a_{0k} \left(u_{g-1} \right)}{\Delta u_g} \right) = N_k \Theta_{gk}^{*}. \end{split}$$

Ezekkel a jelölésekkel a fenti egyenlet így írható (a $k \rightarrow f$ jelölésváltással):

$$\left(\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}\right)q_{gf} - N_f \Theta_{gf}^* \Phi_g = \left(\Gamma_{gf} - \frac{\Delta u_g}{2}\right)q_{g-1,f}.$$
(23.12b)

A (22.10) egyenletnek $\ell = 1$ mellett való integrálásával kapjuk az ezzel analóg egyenleteket a *h*-elemekre. A fentiek mintájára bevezetjük a

$$\eta_{gk} \Sigma_{gk}^{s} \left(1 - \frac{a_{1k} \left(u_g \right) - a_{1k} \left(u_{g-1} \right)}{\Delta u_g} \right) = N_k H_{gk}$$

jelölést, és így a *h-elem*ekre a

$$\left(Z_{gh} + \frac{\Delta u_g}{2}\right)p_{gh} - N_h H_{gh} J_g = \left(Z_{gh} - \frac{\Delta u_g}{2}\right)p_{g-1,h}$$
(23.12c)

egyenlet adódik. Befejezésül ki kell fejeznünk az I_g rugalmatlan szórási forrást a neutronfluxussal:

$$I_g = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{g'}^{\text{in}} a_{g'g} \Phi_{g'} , \qquad (23.12d)$$

ahol $a_{g'g}$ annak a valószínűsége, hogy a g'-edik csoportban rugalmatlanul szóródott neutron energiája a g-edik csoportba esik. a_{gg} annak a valószínűsége, hogy a g-edik csoportban rugalmatlanul szóródott neutron nem kerül ki a g-edik csoportból. Ezt az alábbiakban az $(1 - a_{gg})$ tényezővel vesszük figyelembe: $(1 - a_{gg}) \sum_{g}$ annak a rugalmatlan szórásnak a hatáskeresztmetszete, amely kivezet a g-edik csoportból.

A (23.10) és (23.12) egyenletek jelentik a sokcsoport-közelítés alapegyenleteit, amelyeket az alábbi kezdőfeltételekkel kell megoldanunk. A letargiaskála alapjául vett $E_0 = 10$ MeV energiát úgy választottuk meg, hogy az ennél nagyobb energiájú neutronok fluxusát elhanyagoljuk, vagyis a g = 1 csoport alsó határán a lassulási sűrűségek eltűnnek:

$$q_{0k} = p_{0k} = 0$$
 minden "k" indexre. (23.13a)

A termikus csoport felső határán hasonló értelmű feltételt írhatunk fel. Lévén ez az utolsó csoport, a neutronlassulás nem vezethet ezen túl, vagyis a $g = g_{th}$ csoport felső határán szintén eltűnnek a lassulási sűrűségek:

$$q_{g_{tb}k} = p_{g_{tb}k} = 0 \qquad \text{minden "k" indexre.}$$
(23.13b)

A lassulási egyenletrendszer megoldásához előbb kifejezzük (23.12b)-ből a *g*-edik csoporthoz tartozó lassulási sűrűséget:

$$q_{gf} = \frac{N_f \Theta_{gf}^*}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}} \varPhi_g + \frac{\Gamma_{gf} - \frac{\Delta u_g}{2}}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}} q_{g-1,f} = \frac{N_f \Theta_{gf}^*}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}} \varPhi_g + \left(1 - \frac{\Delta u_g}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}}\right) q_{g-1,f}.$$

Ha ezt, továbbá a (23.12a) és (23.12d) összefüggéseket (23.10a)-ba helyettesítjük, a következőt kapjuk:

$$\alpha_{11}\Phi_g + \alpha_{12}J_g = \alpha_{13}, \qquad (23.14a)$$

ahol

$$\alpha_{11} = \Sigma_g^a + \left(1 - a_{gg}\right)\Sigma_g^{\text{in}} + \sum_f \frac{N_f \mathcal{O}_{gf}^*}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}} + \sum_{k \in \mathcal{F}} \frac{N_k \mathcal{O}_{gk}}{\Delta u_g}, \qquad (23.15a)$$

$$\alpha_{12} = B,$$
(23.15b)

$$\alpha_{13} = S_g + I_g + q_{g-1,F} + \sum_f \frac{\Delta u_g}{\Gamma_{gf} + \frac{\Delta u_g}{2}} q_{g-1,f} .$$
(23.15c)

Ugyanezeket az átalakításokat a (23.10b) és (23.12c) egyenletekkel elvégezve kapjuk:

$$\alpha_{21}\Phi_g + \alpha_{22}J_g = \alpha_{23}, \qquad (23.14b)$$

ahol

$$\alpha_{21} = -\frac{|B|}{3}, \tag{23.15d}$$

$$\alpha_{22} = h_g \Sigma_g^{t} - \sum_k N_k M_{gk} + \sum_h \frac{N_h H_{gh}}{Z_{gh} + \frac{\Delta u_g}{2}},$$
 (23.15e)

$$\alpha_{23} = \sum_{h} \frac{\Delta u_g}{Z_{gh} + \frac{\Delta u_g}{2}} p_{g-1,h} .$$
(23.15f)

A (23.14) egyenletek közvetlenül megoldhatók g = 1-re, hiszen a kezdeti feltételek miatt (23.15a)-ban $\alpha_{13} = S_1$, továbbá (23.15f)-ben $\alpha_{23} = 0$. Ezzel megkapjuk Φ_1 et és J_1 -et, amelyeket a (23.12a) – (23.12d) egyenletekbe helyettesítve kiszámítjuk rendre q_{1F} -et, q_{1f} -et, p_{1h} -t és I_1 -et (minden f- és h-elemre). Ezzel alkalmazhatóvá válnak a (23.15c) és (23.15f) képletek g = 2-re, vagyis a (23.14) egyenletek megoldhatóvá válnak g = 2-re. Ezt az eljárást folytathatjuk minden további g-re a termikus csoportot megelőző csoportig. A termikus csoportot a többitől az különbözteti meg, hogy az abból kivezető lassulási sűrűségek eltűnnek, tehát nincs szükség a (23.12) egyenletek alkalmazására.¹² Ezzel a (23.14) egyenletrendszer a termikus csoportban az alábbi együtthatókkal érvényes

$$\begin{split} \alpha_{11} &= \Sigma_{g_{\text{th}}}^{a} , \qquad \alpha_{12} = B , \qquad \alpha_{13} = q_{g_{\text{th}}-1,F} + \sum_{f} q_{g_{\text{th}}-1,f} , \\ \alpha_{12} &= -\frac{|B|}{3} , \quad \alpha_{22} = h_{g_{\text{th}}} \Sigma_{g_{\text{th}}}^{t} - \sum_{k} N_{k} M_{g_{\text{th}}k} , \qquad \alpha_{23} = \sum_{h} p_{g_{\text{th}}-1,h} . \end{split}$$

Ebből következik, hogy a termikus csoportra vonatkozóan a következő mennyiségeket kell egy külön programmal kiszámítani:

$$\Sigma_{\text{th}}^{a}, \quad \Sigma_{\text{th}}^{s}, \quad \nu \Sigma_{\text{th}}^{f}, \quad \Sigma_{\text{th}}^{s} \cdot \overline{\cos \theta_{0}}.$$

A hasadási hatáskeresztmetszet a (21.25a) és a (23.31) képletek alkalmazásához kell. Látszik továbbá, hogy a termikus csoport számára a forrást a termikus csoport felső határára vonatkozó lassulási sűrűség, vagyis – a fenti jelölésekkel – az α_{13} mennyiség jelenti.

2.3.3. Az aktív zóna és a reflektor kezelése

A GRACE program az aktív zónában a 2.1.3. szakaszban leírt eljárást alkalmazza. Ezzel a program kiszámítja a kritikus állapothoz tartozó neutronspektrumot és ebből – a 2.4. alfejezetben leírt módon – a kevéscsoport-állandókat. Ehhez már csak annyit teszünk hozzá, hogy a program számára bemenő adat a (21.27) szerinti iterációk maximálisan megengedett száma. Ha ezt 1-re korlátozzuk, a kiszámított neutronspektrum *B* kezdőértékéhez fog tartozni. Így tehát gyakorlatilag tetszőleges reaktivitásra vonatkozóan kaphatunk neutronspektrumot és kevéscsoport-állandókat.

A lassuláselméletnek azonban nem csak az aktív zónára, hanem a reflektorra vonatkozóan is kell kevéscsoport-állandókat szolgáltatnia. A reflektorral kapcsolatban

¹² (23.12d)-től más okból tekintünk el: a termikus csoportban már nincs rugalmatlan szórás, továbbá az oda vezető rugalmatlan szórás is elhanyagolható.

az a fő probléma, hogy nincs benne saját hasadási forrás, a benne kialakuló neutronfluxust a mellette levő aktív zónából kifolyó neutronok hozzák létre. Ennek kiszámítására a P₁ közelítés keretében az lenne a korrekt megoldás, hogy végesdifferenciamódszerrel megoldjuk a *z*-től függő P₁ egyenleteket. Az aszimptotikus közelítés keretében viszont csak (21.20) alakú egyenletet oldhatunk meg, amelyben a reflektort a következők jellemzik: *B* képzetes és $F_{\pm}(E) = 0$. Ennek megoldhatóságához szükséges valamilyen külső neutronforrást felvenni, amely nem lehet más, mint az aktív zónából kifolyó neutronok spektruma:

$$S(u) = \frac{BJ_{\text{aktívzóna}}(u)}{\int_{0}^{\infty} BJ_{\text{aktívzóna}}(u')du'}.$$
(23.20)

Mint az alábbiakból látni fogjuk, ezzel a kiegészítéssel a lassulási egyenletek megoldhatók. Az így adódó reflektorspektrum és beiterált *B* az aktív zónától távol lesz érvényes, ahol már fel lehet tenni, hogy *z* függvényében a fluxus minden *u*-ra ugyanazzal a *B* relaxációs állandóval csökken. Az ezzel a spektrummal számolható kevéscsoport-állandók aligha lesznek érvényesek az aktív zóna közelében, tehát nem alkalmasak arra, hogy az aktív zóna és a reflektor határánál használjuk őket a kevéscsoport-diffúziós egyenlet megoldására. Ezért a GRACE program egy közelítő eljárásra épül, amelytől várható, hogy éppen a két tartomány határán jól használható kevéscsoport-állandókat szolgáltatasson.

A reflektornak az aktív zóna közvetlen közelébe eső részén a neutronfluxus z függvényében különböző letargiákra különböző módon csökken. Ezt első közelítésben egy az u letargiától függő B-vel vesszük figyelembe. Ekkor a (21.20) egyenletek így írhatók:

$$\Sigma_t(u)\psi(u) = L_0(u) + S(u) + I(u), \qquad (23.21a)$$

$$h(B, \Sigma_t)\Sigma_t(u)J(u) = L_1(u) + \frac{B(u)\psi(u)}{3},$$
 (23.21b)

amelyekhez járul még a

$$B(u)J(u) = S(u)$$
 (23.21c)

összefüggés is, amely azt fejezi ki, hogy ami az aktív zónából kifolyik, az a reflektorban forrásként megjelenik. A S(u) forrástagot (23.20)-ban definiáltuk.¹³

A 2.3.2. szakaszhoz hasonlóan alkalmazhatjuk a sokcsoport-közelítést, vagyis – egy eltéréssel – továbbra is érvényesek maradnak a (23.10) – (23.13) egyenletek. Az egyetlen eltérés abban áll, hogy (23.10a) baloldalán nem szerepel J_g . Ennek megfelelően a (23.14) és (23.15) egyenletek változatlanul érvényben maradnak, de a mondot-taknak megfelelően (23.15b) helyett $\alpha_{12} = 0$ áll. B(u)-nak a g-edik csoporthoz tartozó értékét B_g -vel jelöljük.

A reflektorra vonatkozó sokcsoport-egyenletek tehát a következőképpen oldhatók meg. (23.14a)-ból

$$\Phi_g = \frac{\alpha_{13}}{\alpha_{11}}.$$
(23.22a)

¹³ Az itt bevezetett B(u) mennyiség a (21.26) egyenletekben szereplő κ -nak felel meg, tehát rá nem vonatkozik az aktív zónára a 2.3.2. szakaszban bevezetett előjel-konvenció.

A neutronáramot (23.21c)-ből kapjuk:

$$J_g = \frac{S_g}{B_g},\tag{23.22b}$$

de ez egyelőre nem alkalmazható, mert még nem ismerjük B_g értékét. Ezt úgy kapjuk meg, hogy J_g -nek a (23.22b) szerinti képletét (23.14b)-be helyettesítjük, ami B_g -re vonatkozóan másodfokú egyenletre vezet:

$$B_g^2 \frac{\Phi_g}{3} + B_g \alpha_{23} - \alpha_{22} S_g = 0.$$

Ennek az egyenletnek a pozitív megoldása

$$B_{g} = \frac{-\alpha_{23} + \sqrt{\alpha_{23}^{2} + \frac{4}{3}\Phi_{g}\alpha_{22}S_{g}}}{\frac{2}{3}\Phi_{g}},$$
 (23.22c)

amit (23.22b)-be visszahelyettesítve kapjuk a neutronáramot. Befejezésül megjegyezzük, hogy B₁ közelítésben h_g függ B_g -től. Emiatt minden csoportban külön iterációra van szükség. Ez az iteráció elmarad a P₁ közelítésben.

2.3.4. Rezonanciaabszorpció és -hasadás

A 2.2.2. szakaszban láttuk, hogy a Greuling-Goertzel közelítés nem alkalmas a rezonanciaabszorpció és rezonanciahasadás leírására. Emiatt a GRACE program külön kezeli a rezonanciákat. Az eljárás a rezonanciaintegrálokon alapul, amit az ²³⁸U izotópra vonatkozóan ismertetünk. Más izotópok esetében az eljárás hasonló.

Rezonanciaintegrálok

Hellstrand különböző fűtőelemrudakra vonatkozóan kimérte a teljes energiatartományra vonatkozó rezonanciaintegrált, és azt találta, hogy UO₂-re az jól közelíthető a következő félempirikus képlettel:

$$R_{\rm SP} = 4,151 + 26,6\sqrt{\frac{S}{M}}$$
 (barn), $0,08 < \frac{S}{M} < 0,7$ (23.25)

ahol *S* a rúd felülete (cm²), *M* a rúd tömege (g).¹⁴ Ez a képlet UO₂ üzemanyagra érvényes. Hasonló formulát mért ki Hellstrand fém urán üzemanyagra is. A GRACE program esetében ²³⁸U-ra a g = 17-33 csoportok tartalmaznak erős rezonanciákat. Gyenge rezonanciák vannak a nagyobb energiákhoz tartozó csoportokban is (g < 17), de ezeket a program a Greuling-Goertzel közelítéssel veszi figyelembe. Emiatt a Hellstrandformulával kapott értéket csökkentjük a nagy energiákhoz tartozó járulékkal (R_{SP}^{H}), továbbá alkalmazunk egy ún. *árnyékolási tényezőt*:

$$R_{\rm L} = \alpha \left(R_{\rm SP} - R_{\rm SP}^{\rm H} \right). \tag{23.26}$$

¹⁴ Az itt szereplő "SP" index az angol "single pin = magányos rúd" kifejezés rövidítése.

Itt az "L" index¹⁵ arra utal, hogy ez a rezonanciaintegrál nem egyetlen, magában álló rúdra, hanem egy fűtőelemrácsban levő rúdra vonatkozik. Az α tényező azt veszi figyelembe, hogy a szomszédos rudak hatása csökkenti a rezonanciaabszorpció mértékét, vagyis a rezonanciaintegrált. Kiszámítása az ún. *Dancoff-korrekció* révén történik, amelyről a későbbiekben lesz szó. Végül bevezetjük az 1-re normált φ_g eloszlásfüggvényt, amely megadja, hogy a (23.26) alatti rezonanciaintegrál mely hányada esik a *g*-edik csoportba:

$$\Delta R_g = \varphi_g R_L \,. \tag{23.27}$$

A rezonanciaintegrál definíciójából következik, hogy a fiktív fluxussal szorozva megadja a tényleges rezonanciaabszorpció mértékét. Legyen a fiktív fluxus a *g*edik csoportban Φ_{0g} . Ezzel a *g*-edik csoportban bekövetkező teljes rezonanciaabszorpciót a következő képlettel számíthatjuk ki:

$$\left(RA\right)_g = \sum_k N_k \Delta R^a_{gk} \Phi_{0g} . \tag{23.28a}$$

Itt ismét bevezettük a "*k*" indexet, mivel a (23.25) - (23.27) képleteket mindegyik rezonanciaizotópra alkalmazni kell, és a teljes rezonanciaabszorpció a rajtuk bekövetkező részleges rezonanciaabszorpció összege. Ha ugyanezt a gondolatmenetet a rezonanciahasadásra alkalmazzuk, a

$$\left(RF\right)_g = \sum_k N_k \Delta R_{gk}^{\rm f} \boldsymbol{\Phi}_{0g} , \qquad (23.28b)$$

ahol az "f" felső index arra utal, hogy most az abszorpció helyett hasadásról van szó.

A GRACE program ezeknek a képleteknek egy módosított alakját alkalmazza. Az a helyzet ugyanis, hogy – az alább ismertetett algoritmus szerint – a lassulási sűrűség numerikus okokból negatívvá válhat. Ez elkerülhető, ha (23.28a) helyett a

$$(RA)_g = q_{g-1}(1 - P_g)$$
 (23.29a)

képletet használjuk, ahol

$$P_g = \exp\left\{-\frac{\Phi_{0g}}{q_{g-1}}\sum_k N_k \Delta R_{gk}^{a}\right\}$$
(23.29b)

a g-edik csoporthoz tartozó rezonancia-kikerülési valószínűség.¹⁶ A hasadásra vonatkozó rezonanciaintegrált (23.28a) és (23.28b) kombinációja révén számítjuk ki:

$$(RF)_{gk} = \frac{N_k \Delta R_{gk}^1}{\sum_{k'} N_{k'} \Delta R_{gk'}^a} (RA)_g.$$
(23.29c)

Amikor az abszorpcióra vonatkozó rezonanciaintegrált az egyes izotópokra kívánjuk szétbontani, ezzel analóg képletet használunk:

¹⁵ "Lattice = rács" angol szó rövidítése.

¹⁶ Vigyázzunk a jelölésekre: a most definiált mennyiséget nagy betűvel (*P*) írtuk, amely megkülönböztetendő a kis betűvel írt (*p*) anizotrop lassulási sűrűségtől!

$$(RA)_{gk} = \frac{N_k \Delta R_{gk}^{a}}{\sum_{k'} N_{k'} \Delta R_{gk'}^{a}} (RA)_g.$$
(23.29d)

Könnyen belátható, hogy $\Delta R_{gk} \rightarrow 0$ esetén a (23.29) képletek átmennek a (23.28) képletekbe.

A sokcsoport-egyenletek módosítása

A (23.10a) sokcsoport-egyenletben két részre kell bontanunk az abszorpciót leíró tagot: a lassan változó hatáskeresztmetszetek járuléka (amelyekre érvényes a Greuling-Goertzel modell) és a rezonanciaabszorpció járuléka. Ha az utóbbit az egyenlet jobb oldalára visszük, akkor (23.10a) a következő alakba megy át:¹⁷

$$BJ_g + \Sigma_g^{a^*} \Phi_g + q_g = S_g + I_g + q_{g-1} P_g, \qquad (23.30a)$$

ahol P_g -t (23.29b)-ben definiáltuk, továbbá $\Sigma_g^{a^*}$ a lassan változó (vagyis nem-rezonancia) abszorpciós csoportállandók összege a *g*-edik csoportban. Az egyenletben szereplő Φ_{0g} fiktív fluxus kiszámításával később foglalkozunk.

A neutronáramra vonatkozó (23.10b) egyenletet hasonló módon kell átalakítani. Ebben tulajdonképpen a p(u) lassulási sűrűséghez is kellene egy külön rezonanciaintegrált bevezetni, de ezt az alábbi megfontolás segítségével megkerüljük. Amikor a (23.10b) sokcsoport-egyenletet felírtuk, hallgatólagosan már alkalmaztunk egy közelítést. Szigorúan véve ugyanis a következő alakú csoportállandókat kellett volna használnunk ebben az egyenletben:

$$\Sigma'_{gk} = \frac{1}{J_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Sigma_k(u) J(u) \mathrm{d}u$$

mindegyik, a "*k*" indexszel azonosított izotópra. Ehelyett (23.10b)-ben is ugyanazokat a fluxusra átlagolt csoportállandókat használtuk, mint a (23.10a) egyenletben, ami a következő közelítésnek felel meg:

$$\Sigma'_{gk} = \frac{1}{J_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Sigma_k(u) \psi(u) \frac{J(u)}{\psi(u)} \mathrm{d}u \approx \frac{1}{J_g} \frac{J_g}{\Phi_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Sigma_k(u) \psi(u) \mathrm{d}u = \Sigma_{gk} \, .$$

Ebben a felfogásban az áramra vonatkozó rezonanciaabszorpció legjobb közelítése a következő:

$$\sum_{k} N_{k} \int_{u_{g-1}}^{u_{g}} \sigma_{k}(u) J(u) du \approx q_{g-1} (1 - P_{g}) \frac{J_{g-1}}{\Phi_{g-1}}.$$

Így (23.10b) helyett a következő egyenletet kapjuk:

$$-\frac{|B|}{3}\Phi_g + \left(h_g \Sigma_g^{t^*} - \sum_k N_k M_{gk}\right) J_g + p_g = p_{g-1} - h_g q_{g-1} \left(1 - P_g\right) \frac{J_{g-1}}{\Phi_{g-1}},$$
(23.30b)

 $^{\rm 17}$ A $\varSigma_g^{\rm s} \varPhi_g$ tagot mindkét oldalból kivonhatjuk.

ahol $\Sigma_g^{t^*}$ a lassan változó (nem-rezonancia) hatáskeresztmetszetek összege a *g*-edik csoportban.

A (23.30) egyenleteket olyan módon rendeztük, hogy rögtön világos legyen, hogyan módosítandók a (23.15) képletekben felírt α együtthatók. Befejezésül megadjuk, hogyan kell ebben a közelítésben az (21.25a) szerinti sokszorozási tényezőt kiszámítani:

$$k_{\rm eff} = \sum_{g} \nu \Sigma_g^{\rm f*} \Phi_g + \sum_{g} (RF)_g , \qquad (23.31)$$

ahol a "*" felső index – az eddigiekhez hasonlóan – a lassan változó (nem-rezonancia) hasadási hatáskeresztmetszetek összegét jelenti a *g*-edik csoportban, továbbá $(RF)_g$ -t (23.29c)-ben definiáltuk.¹⁸

A fiktív fluxus számítása

A *g*-edik csoporthoz tartozó Φ_{0g} fiktív fluxus – definíció szerint – az ahhoz az esethez tartozó fluxus, amelyben a *g*-edik csoportban nincs rezonanciaabszorpció. A fiktív fluxust tehát a következő egyenletből számítjuk ki:

$$\Sigma_{s}(u)\Phi_{0}(u) = L_{0}(u) - BJ_{0}(u).$$
(23.32)

Itt a Φ -hez és a *J*-hez tett "0" index a fiktív fluxusra és áramra utal. L_0 -at (21.6a)-ban definiáltuk. Az egyenletben nem szerepel az f(u) hasadási spektrum, mivel a rezonanciacsoportokban ez már zérus.

Amikor a *g*-edik csoporthoz tartozó fiktív fluxust számoljuk, már ismerjük az 1, 2, ..., (g-1) csoportokhoz tartozó fluxust és áramot. Így az $L_0(u)$ forrástagot közvetlenül ki tudjuk számítani:

$$L_0(u_{g-1}) = \sum_k \frac{1}{1 - \alpha_k} \sum_{g'} \Sigma_{g'k}^s \frac{\Phi_{g'}}{\Delta u_{g'}} \int_{u_{g'-1}}^{u_{g'}} \exp\{-(u_{g-1} - u)\} du, \qquad (23.33)$$

ahol

$$\alpha_k = \left(\frac{A_k - 1}{A_k + 1}\right)^2,$$

 A_k a "k" izotóp tömegszáma. A g'-re vonatkozó összegzés (g – 1)-ig tart, és annál a csoportnál kezdődik, amelybe ($u_{g-1} + \ln \alpha_k$) esik. A (23.33) képlet levezetésében abból indultunk ki, hogy

$$\frac{du'}{1-\alpha_k} \int_{u_{g'-1}}^{u_{g'}} \exp\{-(u_{g-1}-u)\} du$$

annak a valószínűsége, hogy a g'-edik csoportban a "k" izotópon való szóródás a neutront az u_{g-1} körüli du' letargiaintervallumba viszi. A g'-edik csoportban a "k" izotópon való szórási sűrűség $\Sigma_{g'k}^{s} \Phi_{g'}$, végül d $u/\Delta u_{g'}$ annak a valószínűsége, hogy a szóródás az (u, u+du) intervallumban történik. A (23.33) képlet ezek szorzatát összegzi mind-

 $^{^{18}}$ Természetes, hogy a második tagban a *g* csoportindexre való összegzés csak azokra a csoportokra terjed ki, amelyekben rezonanciahasadás van.

egyik szóba jövő csoportra és izotópra, amelyet du'-vel osztva valóban $L_0(u_{g-1})$ -et kapjuk.

A (23.32) egyenletet
$$u = u_{g-1}$$
-re írjuk fel:
 $\Sigma_{s}(u_{g-1}) \mathcal{P}_{0}(u_{g-1}) = L_{0}(u_{g-1}) - BJ_{0}(u_{g-1}).$

Ha ebben a fiktív áramra megengedhető

$$J_0(u_{g-1}) \approx \frac{J_{g-1}}{\Delta u_{g-1}}$$

közelítést alkalmazzuk, a fiktív fluxusra a

$$\Phi_{0g} \approx \frac{1}{\Sigma_{g-1}^{s}} \left[L_0(u_{g-1}) - B \frac{J_{g-1}}{\Delta u_{g-1}} \right]$$
(23.34)

közelítő képletet kapjuk.

2.3.5. Rezonanciaintegrálok korrekciói

A (23.25) alatti alakú rezonanciaintegrálok elméleti alapját az ún. *ekvivalenciatételek* jelentik, amelyek lényegét a reaktorfizika elemeiből ismerjük, de a későbbiek érdekében összefoglaljuk. Homogén keverékekben levő abszorbensek *egyetlen rezonanciára* vonatkozó rezonanciaintegrálja a következő módon függ a σ_p potenciálszórási hatáskeresztmetszettől:

$$I_{\rm eff} = \frac{\pi}{2} \sigma_0 \frac{\Gamma_{\rm a}}{E_{\rm r}} \frac{\sigma_{\rm p}}{\sqrt{\sigma_{\rm p} (\sigma_0 + \sigma_{\rm p})}},$$
(23.40)

ahol σ_0 a rezonancia maximális hatáskeresztmetszete, Γ_a az abszorpciós szélesség, E_r a rezonanciaenergia. Ebben a képletben σ_p az abszorbens mag σ_{pa} potenciálszórási hatáskeresztmetszetének és a moderátor hatáskeresztmetszetének egy abszorbens nukleonra eső járulékának az összege:

$$\sigma_{\rm p} = \sigma_{\rm pa} + \frac{\Sigma_{\rm m}}{N_{\rm a}},\tag{23.41}$$

ahol Σ_m és N_a a moderátor makroszkopikus (szórási) hatáskeresztmetszete, illetve az abszorbens magsűrűsége.

Egy magában álló rúd esetében Σ_m helyére $1/\overline{\ell}$ helyettesítendő, ahol $\overline{\ell}$ a rúd átlagos húrhossza:

$$\bar{\ell} = \frac{4V}{S}, \qquad (23.42)$$

V a rúd térfogata, S a felülete. Mivel V a rúdban levő abszorbens anyag tömegével arányos, a rezonanciaintegrál végső soron a (23.25) képletben szereplő S/M hányadostól függ, mivel az M tömeg a V térfogattal arányos. Ez a Hellstrand-formula elméleti alapja. A (23.42) képlet levezetését a jelen szakasz végén megadjuk.

Mindennek alapja viszont az a Wigner Jenőtől származó közelítés, hogy annak P_0 valószínűsége, hogy az abszorbens rúdban keletkező neutron ütközés nélkül kijut a rúdból, és a moderátorban ütközik, a

$$P_0(\Sigma_t) = \frac{1}{1 + \Sigma_t \overline{\ell}}$$
(23.43)

képlettel közelíthető. E képletnek elméleti alapja nincs: maga Wigner állítja, hogy ehhez csak a szélső esetek szolgáltatnak támpontot. Nyilvánvaló ugyanis, hogy $\Sigma_t = 0$ esetén $P_0 = 1$, $\Sigma_t \rightarrow \infty$ esetén pedig $P_0 \rightarrow 0$. A (23.43) képlet ezeket a határértékeket helyesen adja. E két határeset között (23.43) jelenti a lehető legegyszerűbb közelítést.

Transzportelméleti számítások megmutatták, hogy a közbenső értékekre a (23.43) képlet csak közelítőleg érvényes, aminek a korrekciójára használatos a *Bell-faktor*: (23.43) helyett a P_0 valószínűséget a

$$P_0(\Sigma_t) = \frac{1}{1 + \Sigma_t \overline{\ell}/a}, \qquad (23.43a)$$

ahol *a* a Bell-faktor. Értéke függ a rúd alakjától és geometriai méretétől. Úgy szoktuk meghatározni, hogy a P_0 valószínűséget transzportelméleti módszerekkel kiszámítjuk¹⁹, majd *a* értékét úgy választjuk meg, hogy (23.43a) pontosan teljesüljön. A Bell-faktort csak a teljesség kedvéért említettük meg, mert a GRACE program nem alkalmazza a segítségével végezhető korrekciót.

Végzi viszont a program a Dancoff-korrekciót, amelynek a lényegét az alábbiakban összegezzük. Magának a módszernek nagy irodalma van, és számos változata ismert. Itt csak a legegyszerűbb alakját ismertetjük. Arról van szó, hogy a (23.25) alakú formulák, továbbá a (23.43) szerinti P_0 valószínűség egyetlen, magában álló fűtőelemrúdra érvényes, viszont a reaktorban ugyanezt *fűtőelemrács*ra vonatkozóan kell kiszámítanunk. Erre szolgál a *Dancoff-faktor*. Az alábbiakban kiszámítjuk a P_0 valószínűséget fűtőelemrácsra – feltéve, hogy magában álló rúdra már ismerjük. Megkülönböztetésül az utóbbit az "sp" indexszel látjuk el.

A Dancoff-faktor, amelyet általában *C*-vel jelölünk, annak a valószínűsége, hogy a fűtőelemrúdból kilépő neutron a moderátorban szenvedi el első ütközését. A fűtőelemrács kiszemelt rúdjából kilépő neutron (1 - C) valószínűséggel fog egy másik rúdban ütközni. Így tehát a keresett P_0 valószínűséget a neutronok két csoportjára vonatkozó részekre bonthatjuk:

- azok a neutronok, amelyek kilépés után elsőre a moderátor atomjaival ütköznek; számuk P_{0sp}·C;
- azok a neutronok, amelyek kilépés után elsőre egy másik rúdban ütköznek, majd ezt többször ismételve végül a moderátorban ütköznek; ezek száma $P_{0sp} \cdot (1 C) \cdot P_0$.

Felírhatjuk tehát a következő egyenletet:

$$P_0 = P_{0sp} \cdot C + P_{0sp} \cdot (1 - C) \cdot P_0,$$

amiből kapjuk a kívánt eredményt:

$$P_0 = \frac{P_{0\text{sp}} \cdot C}{1 - P_{0\text{sp}} \cdot (1 - C)}.$$
(23.44)

¹⁹ Ezek közé tartoznak a Monte Carlo módszerek.

Ha ide P_{0sp} helyére a (23.43) kifejezést helyettesítjük, a

$$P_0(\Sigma_t) = \frac{1}{1 + \Sigma_t \,\overline{\ell}/C} \tag{23.45}$$

összefüggést kapjuk.

Legutóbbi eredményünk nagyon egyszerűen alkalmazható. Ha ugyanis ide az átlagos húrhossz helyére a (23.42) képletet helyettesítjük, a következő adódik:

$$P_0(\mathcal{L}_t) = \frac{1}{1 + \mathcal{L}_t \frac{4V}{SC}},$$

vagyis a fűtőelemrács hatását úgy vehetjük figyelembe, hogy a (23.25) képletben a rúd tényleges *S* felülete helyére a *C* Dancoff-faktorral csökkentett értékét (vagyis *CS*-et) helyettesítjük. Ismételjük: a fenti gondolatmenet a problémát nagyon leegyszerűsíti, a Dancoff- és Bell-faktorok kombinációja számos algoritmus kidolgozását eredményezte, amelyek az irodalom számos helyén megtalálhatók.

A Dancoff-faktor számításának legegyszerűbb módja a Monte Carlo módszeren alapul. Ez időigényes (bár a számítástechnika fejlődésével ez egyre kevésbé szempont), ezért a gyakorlatban félempirikus képletek terjedtek el. Közülük Sauar képletét idézzük:

$$C = \frac{e^{-\tau\eta}}{1 + (1 - \tau)\eta},$$
(23.46)

ahol

$$\eta = \overline{\ell} N_{\rm a} \sigma_{\rm m} \tag{23.47a}$$

és

$$\tau = \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sqrt{1 + \frac{V_1}{V_0}} - 1\right]\frac{V_0}{V_1} - 0,08$$
 négyszöges rácsra, (23.47b)
$$\tau = \left[\sqrt{\frac{\pi}{2\sqrt{3}}}\sqrt{1 + \frac{V_1}{V_0}} - 1\right]\frac{V_0}{V_1} - 0,12$$
 hatszöges rácsra. (23.47c)

Itt V_0 és V_1 a rúd, illetve a moderátor térfogata az elemi cellában.

Befejezésül megadjuk a (23.42) képlet levezetését. A \mathcal{D} fluxusnak van olyan fizikai jelentése, hogy egy tetszőleges *V* térfogatban a neutronok által 1 s alatt összesen megtett út $V\mathcal{D}$. (Feltesszük, hogy a fluxus a *V* térfogaton belül állandó.) Ugyanezt más módon is megkaphatjuk. Ha a kiszemelt térfogat felülete *S*, a felület 1 cm²-én izotrop szögeloszlással J^+ neutron lép be, akkor ugyanez $SJ^+\overline{\ell}$ alakban írható, tehát

$$SJ^+\overline{\ell} = V\Phi$$

Mivel a transzportelméletből tudjuk, hogy térfüggetlen fluxus esetében $J^+ = \Phi/4$, innen adódik (23.42).

2.3.6. Áttérés az általános szórási mátrixra

A későbbi fejezetekben (például a 4.5.2. részben) a lassulást csak az általános szórási mátrix segítségével fogjuk tárgyalni. A fentiekben tárgyalt lassulási modellek ugyanis túlságosan nehézkessé teszik a képleteket. Az utóbbiak is átírhatók azonban az általános mátrixos formára. Ezt mutatjuk meg az alábbiakban.

Az általános esetben a lassulási egyenletekben közvetlenül kiszámíthatjuk a (21.9a) és (21.9c) képletekkel definiált L_0 és L_1 lassulási forrásokat, amelyek többcsoport alakja

$$L_{\ell g} = \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{\ell,g'\to g}^{s} \Phi_{\ell g'}, \qquad \ell = 0, 1.$$
(23.50)

A korábbi jelölésekkel: $\Phi_{0g} = \Phi_g$ és $\Phi_{1g} = J_g$. A rezonanciák kezeléséhez szükség van a q_{ℓ} lassulási sűrűségekre is, amelyek – folytonos letargiaváltozóban – kielégítik az

$$L_{\ell}(u) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(u' \to u) \psi_{\ell}(u') du' = \Sigma_{s\ell}(u) \psi_{\ell}(u) - \frac{dq_{\ell}(u)}{du}$$

egyenletet [vö. (22.4)]. Ennek sokcsoport alakja

$$\sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{\ell,g'\to g}^{s} \Phi_{\ell g'} = \Sigma_{\ell g}^{s} \Phi_{\ell g} - q_{\ell g} + q_{\ell,g-1}, \qquad (23.51)$$

amelynek segítségével a rezonanciaabszorpciót kiszámíthatjuk a (23.29) képletek alapján. A korábbi jelölésekkel $q_{0g} = q_g$ és $q_{1g} = p_g$. A különböző lassulási modellekben használt mennyiségekkel kifejezhetők az ezekben a képletekben szereplő szórási mátrixok.

Először a Greuling-Goertzel modellt tekintjük, amely szerint a (23.12b) és (23.12c) képleteket kell alkalmaznunk. Később térünk át a Fermi-modellre. (23.51)ből látszik, hogy a lassulási sűrűségeket a fluxusokkal, illetve az áramokkal összekapcsoló képletet a következő alakban kereshetjük:

$$q_{gf} = \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{f,g' \to g}^{q} \Phi_{g'} , \qquad (23.52a)$$

$$p_{gh} = \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{h,g' \to g}^{p} J_{g'} , \qquad (23.52b)$$

ahol az *f* és *h* indexeket a 2.3. alfejezet elején definiáltuk, továbbá a "q" és "p" felső indexek mutatják, melyik fajta lassulási sűrűségről van szó. A (23.12) képletekből következik, hogy a keresett Σ^{q} és Σ^{p} mátrixok főátlóban levő elemei a következők (*g* = 1, 2, ..., *G*):

$$\Sigma_{f,g \to g}^{q} = \frac{N_{f} \theta_{gf}^{*}}{\Gamma_{gf} + \Delta u_{g}/2} \qquad \text{és} \qquad \Sigma_{h,g \to g}^{p} = \frac{N_{h} H_{gh}}{Z_{gh} + \Delta u_{g}/2}.$$
(23.53a)

A főátló feletti elemek (g' > g) eltűnnek, mert a lassulásban nincs felfelé szórás. A főátló alatti elemek (g' < g) – szintén (23.12b) és (23.12c) alapján – rekurzióval állíthatók elő:

$$\begin{split} \Sigma_{f,g' \to g}^{\mathbf{q}} &= \frac{\Gamma_{gf} - \Delta u_g / 2}{\Gamma_{gf} + \Delta u_g / 2} \Sigma_{f,g' \to g^{-1}}^{\mathbf{q}}, \\ \Sigma_{h,g' \to g}^{\mathbf{p}} &= \frac{Z_{gh} - \Delta u_g / 2}{Z_{gh} + \Delta u_g / 2} \Sigma_{h,g' \to g^{-1}}^{\mathbf{p}}. \end{split}$$

A mátrixok g-edik oszlopát tehát úgy kapjuk meg, hogy a tőle balra levő, (g-1)-edik oszlopot ugyanazzal a számmal végigszorozzuk. g' < g-re ezt zárt alakban is felírhatjuk:

$$\Sigma_{f,g'\to g}^{q} = \Sigma_{f,g'\to g'}^{q} \prod_{g''=g'+1}^{g} \frac{\Gamma_{g''f} - \Delta u_{g''}/2}{\Gamma_{g''f} + \Delta u_{g''}/2},$$
(23.53b)

$$\Sigma_{h,g'\to g}^{p} = \Sigma_{h,g'\to g'}^{p} \prod_{g''=g'+1}^{g} \frac{Z_{g''h} - \Delta u_{g''}/2}{Z_{g''h} + \Delta u_{g''}/2}.$$
(23.53c)

(23.12a)-ból következik, hogy Fermi-elemekre a Σ^q mátrix csak a főátlóban tartalmaz zérustól különböző elemeket:

$$\Sigma_{\mathrm{F},g\to g}^{\mathrm{q}} = \sum_{k\in\mathrm{F}} \frac{\xi_{gk} \Sigma_{gk}^{\mathrm{s}}}{\Delta u_g}.$$
(23.53d)

A Σ^{p} mátrix esetében a Fermi-elemek járuléka definíció szerint eltűnik.

A teljes lassulási sűrűségeket az összes elemekre való összegzéssel kapjuk:

$$\Sigma_{g' \to g}^{q} = \Sigma_{F,g' \to g}^{q} + \sum_{f} \Sigma_{f,g' \to g}^{q} , \qquad (23.54a)$$

$$\Sigma_{g' \to g}^{\mathbf{p}} = \sum_{h} \Sigma_{h,g' \to g}^{\mathbf{p}} .$$
(23.54b)

A (23.50) képletben szereplő szórási mátrixok ezekből a mátrixokból már egyszerűen származtathatók [vö. (23.51)]:

$$\Sigma_{0,g \to g}^{s} = \Sigma_{g}^{s} - \Sigma_{g \to g}^{q} , \qquad (23.55a)$$

$$\Sigma_{1,g\to g}^{s} = \Sigma_{1,g}^{s} - \Sigma_{g\to g}^{p}.$$
(23.55b)

A g' < g csoportokhoz tartozó mátrixelemek:

$$\Sigma_{0,g' \to g}^{s} = \Sigma_{g' \to g^{-1}}^{q} - \Sigma_{g' \to g}^{q} , \qquad (23.55c)$$

$$\Sigma_{1,g' \to g}^{s} = \Sigma_{g' \to g-1}^{p} - \Sigma_{g' \to g}^{p}.$$
(23.55d)

Látható, hogy ezek a mátrixok ugyanolyan jellegűek, mint amit a folytonos energiaváltozóra vonatkozóan is tapasztaltunk: a Greuling-Goertzel szórási magfüggvények tetszőleges energiaugrást megengednek – szemben az egzakt magfüggvényekkel, amelyek csak korlátozottat (lásd például a (12.1) képletet). A (23.55) képleteket is felírhatnánk zárt alakban, de ezt az Olvasóra bízzuk.

Érdemes ezeket a képleteket a folytonos letargiaváltozóra felírt (22.20) egyenlettel összevetni. Az egyszerűség kedvéért nézzük a TKR-ben izotróp szórás esetét, amikor a_0 független a letargiától, tehát $\Gamma_{gk} = a_{0k}$. A 2.2.1. szakasz végén felírt képletek alapján ebből következik, hogy $\Delta u_g/\Gamma_{gk} \ll 1$, ha a csoportbeosztás elég finom. Ekkor (23.53b)-ben írhatjuk:

$$\prod_{g''=g'+1}^{g} \frac{\Gamma_{g''f} - \Delta u_{g''}/2}{\Gamma_{g''f} + \Delta u_{g''}/2} \approx \exp\left\{-\sum_{g''=g'+1}^{g} \frac{\Delta u_{g''}}{\Gamma_{g''f}}\right\} = \exp\left\{-\frac{u_g - u_{g'}}{\Gamma_f}\right\} = \exp\left\{-\frac{u_g - u_{g'}}{a_{0f}}\right\}.$$

(23.53a) alapján

$$\Sigma_{f,g'\to g'}^{q} \approx \frac{\Sigma_{fg'}^{s}\xi_{f}}{a_{0f}} \exp\left\{-\frac{\Delta u_{g'}}{2a_{0f}}\right\} = \Sigma_{fg'}^{s} \frac{b_{0f}}{a_{0f}} \exp\left\{-\frac{\Delta u_{g'}}{2a_{0f}}\right\}.$$

Ha ezt (23.52a)-ba helyettesítjük, a

$$q_{gf} \approx \int_{0}^{u_{g}} \Sigma_{f}^{s}(u) \Phi(u) \frac{b_{0f}}{a_{0f}} \exp\left\{-\frac{u_{g}-u}{a_{0f}}\right\} du$$

eredményre jutunk, amely megegyezik a (22.20) képlettel.

Megfontolásainkból az alábbi következtetéseket vonhatjuk le:

- A Greuling-Goertzel modellt csak elegendően finom csoportbeosztás mellett célszerű alkalmazni, különben a többcsoport változat nagyon messze kerülhet a folytonos változattól. Például a (23.53) alatti mátrixelemek negatívvá válhatnak.
- Ha új lassulási programot írunk, elegendő azt az általános szórási mátrixra kidolgozni. A különböző lassulási modellekre vonatkozó opciók a hatáskeresztmetszetek előkészítését végző szubrutinokban intézhetők el.

2.4. Kevéscsoport-állandók számítása

A sokcsoport-elmélet legfontosabb feladata a diffúzióegyenlet megoldásában használható kevéscsoport-állandók meghatározása. A GRACE program kimenő adatai között az alábbi eredmények találhatók. A sokcsoport-modell csoportjait a következőkben mikrocsoportoknak, a kevéscsoport-modell csoportjait pedig makrocsoportoknak nevezzük.

2.4.1. Csoportállandók kondenzálása

Jelöljük *M*-mel a makrocsoportok indexeit: M = 1, 2, ... Mindegyik makrocsoport alsó és felső határa egybeesik valamelyik mikrocsoport határával. Ily módon mindegyik makrocsoport egész számú mikrocsoportból áll. Ennek alapján azonnal felírhatjuk a következő mennyiségeket:

makrocsoport-fluxus:

makrocsoport-áram:

makrocsoport-kifolyás:

makrocsoport-forrás (hasadás):

$$\begin{split} \Phi_{M} &= \sum_{g \in M} \Phi_{g} ; \\ J_{M} &= \sum_{g \in M} J_{g} ; \\ Y_{M} &= \sum_{g \in M} B_{g} J_{g} ; \\ f_{M} &= \sum_{g \in M} S_{g} ; \\ \mathcal{L}_{M}^{a} &= \frac{\sum_{g \in M} \mathcal{L}_{g}^{a} \Phi_{g} + \sum_{g \in M} (RA)_{g}}{\Phi_{M}} ; \end{split}$$

abszorpciós makrocsoport-állandó:

hasadási makrocsoport-állandó:

$$\begin{split} v \Sigma_{M}^{\mathrm{f}} &= \frac{\sum\limits_{g \in M} v \Sigma_{g}^{\mathrm{f}} \varPhi_{g} + \sum\limits_{g \in M} v (RF)_{g}}{\varPhi_{M}}; \\ D_{M} &= \frac{Y_{M}}{\sum\limits_{g \in M} B_{g}^{2} \varPhi_{g}}. \end{split}$$

diffúzióállandó:

Amikor ezekben a képletekben az egyes makrocsoportokhoz tartozó mikrocsoportokra összegzünk, illetve átlagolunk, ezt a mikrocsoport-állandók *kondenzálás*ának nevezzük. A szórási hatáskeresztmetszet és a szórási mátrix kondenzálását külön tárgyaljuk.

2.4.2. Spektrális jellemzők számítása

A fentiekben definiált kevéscsoport-állandókon túlmenően gyakran van szükség egyéb jellemzőkre is. Ezek a következők:

csoportállandó 1/v hatáskeresztmetszetre:

$$\Sigma_M^{1/v} = \frac{\sum_{g \in M} \Phi_g / v_g}{\Phi_M},$$

ahol v_g a g-edik mikrocsoporthoz tartozó átlagos sebesség:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{1,451 \cdot 10^{-6}}{\Delta u_g} \left(\frac{1}{\sqrt{E_g}} - \frac{1}{\sqrt{E_{g-1}}} \right).$$

Itt v_g -t cm/s-ban, E_g -t pedig eV-ban mérjük. A most definiált "csoportállandóra" az időfüggő diffúzióegyenlet megoldásához van szükség, hiszen annak a bal oldalán szerepel az (1/v) mennyiségnek az *M*-edik makrocsoportra vett átlaga.

További mennyiségek a spektrális indexek:

rezonancia-kikerülési valószínűség: $p = \frac{q_{g_{th}} - 1}{P_{NI}};$

gyorshasítási tényező:

$$\begin{split} \varepsilon &= \frac{k_{\text{eff}}}{\sum\limits_{\substack{k:\text{hasadó}\\\text{izotópok}}} \left(\sum\limits_{g} v \Sigma_{gk}^{\text{f}} \varPhi_g + \sum\limits_{g} v(RF)_{gk} \right)}; \\ C &= \frac{\sum\limits_{\substack{k:\text{fertilis}\\\text{izotópok}}} \left(\sum\limits_{g} \Sigma_{gk}^{\text{a}} \varPhi_g + \sum\limits_{g} (RA)_{gk} \right)}{\sum\limits_{\substack{k:\text{hasadó}\\\text{izotópok}}} \left(\sum\limits_{g} \Sigma_{gk}^{\text{a}} \varPhi_g + \sum\limits_{g} (RA)_{gk} \right)}. \end{split}$$

kezdeti konverziós tényező:

A GRACE program kiszámít egyéb spektrális jellemzőket is, de ezek ismertetésétől eltekintünk.

2.4.3. Szórási mátrix és removal (kiszórási) hatáskeresztmetszet

A kevéscsoport-diffúzióelméletben a szórási hatáskeresztmetszet szerepét a removal (kiszórási) hatáskeresztmetszet²⁰ veszi át, amelynek a definiálása érdekében először – a fentiek mintájára – definiáljuk a szórási hatáskeresztmetszetnek az M-edik makrocsoportra vett átlagát:

$$\Sigma_M^{\rm s} = \frac{\sum\limits_{g \in M} \Sigma_g^{\rm s} \Phi_g + \sum\limits_{g \in M} \Sigma_g^{\rm in} \Phi_g}{\Phi_M}.$$
(24.0)

A diffúzióelméletben azonban nem erre, hanem a

$$\Sigma_M^{\mathbf{R}} = \Sigma_M^{\mathbf{s}} - \Sigma_{M \to M} \tag{24.1a}$$

mennyiségre, a removal (kiszórási) csoportállandóra van szükség. A definícióból következik fizikai jelentése: azoknak a (rugalmas és rugalmatlan) szórásoknak az átlagos hatáskeresztmetszete, amelyek a szórt neutron energiáját kiviszik az *M*-edik makrocsoportból. Ezt fejezi ki a neve: az *M*-edik csoportból "kiszóródó" neutronok szórási hatáskeresztmetszete. Ennek a csoportállandónak a számítása egyszerű lenne, ha a neutronlassulást a mikrocsoportokra vonatkozó szórási mátrixokkal írnánk le. A szórási mátrix definíciójából következik, hogy:

$$\Sigma_{M' \to M} = \frac{\sum_{g \in M} \sum_{g' \in M'} \Sigma_{g' \to g} \Phi_{g'}}{\Phi_{M'}}, \qquad (24.1b)$$

amit (24.1a)-ba helyettesítve közvetlenül megkapjuk a kiszórási csoportállandót. Mivel azonban a Greuling-Goertzel modellben ehelyett lassulási sűrűségekkel dolgozunk, a számítás bonyolultabb. Ezért hagytuk ennek tárgyalását a fejezet végére.

Definiáljuk a következő mennyiségeket:

- $Q_{M' \rightarrow M}$: az *M*'-edik makrocsoportból az *M*-edik makrocsoportba *rugalmas* szórások révén átkerülő neutronok száma (időegység alatt és a térfogategységre vonatkozóan);
- $I_{M' \rightarrow M}$: az *M'*-edik makrocsoportból az *M*-edik makrocsoportba *rugalmatlan* szórások révén átkerülő neutronok száma (időegység alatt és a térfogategységre vonatkozóan);

továbbá

$$Q_M = \sum_{M' > M} Q_{M \to M'} \tag{24.2a}$$

és

$$I_M = \sum_{M' > \mathbf{M}} I_{M \to M'} . \tag{24.2b}$$

Így a kiszórási hatáskeresztmetszetet a

$$\Sigma_M^{\rm R} = \frac{Q_M + I_M}{\Phi_M} \tag{24.3}$$

²⁰ A "removal" angol kifejezés értelme: eltávolítás. Az itt szereplő fogalomra, tehát a *g*-edik csoportból való "kiszórásra" – sajnos – nem alakult ki elfogadott magyar kifejezés.

képlettel számíthatjuk ki. Hasonlóan kapjuk a szórási mátrixot is:

$$f_{M' \to M} = \frac{Q_{M' \to M} + I_{M' \to M}}{\varphi_{M'} \Sigma_{M'}^{\mathrm{R}}}, \qquad (24.4)$$

amely tehát annak a valószínűsége, hogy egy az *M*'-edik makrocsoportban (rugalmasan vagy rugalmatlanul) szóródó neutron energiája az *M*-edik makrocsoportba megy át.

Az M-edik makrocsoport határai legyenek:

energiában $E_{M-1} > E_M$; letargiában $u_{M-1} < u_M$; mikrocsoport-indexben $g_{M-1}+1 \le g_M$.

Ezzel a rugalmatlan szórások járuléka egyszerűen felírható:

$$I_M = \sum_{g \in \mathcal{M}} \sum_{g' < g_M} \sum_{g'g_M} \Sigma_{g'}^{\text{in}} a_{g'g} \Phi_{g'}$$
(24.5a)

és

$$I_{M' \to M} = \sum_{g \in M} \sum_{g' \in M'} \Sigma_{g'}^{\text{in}} a_{g'g} \Phi_{g'} .$$
(24.5b)

A rugalmas szórások esetében az elemeket két csoportra kell osztani. Ha a " ${\cal k}$ " elemre

$$u_M + \ln \alpha_k \ge u_{M-1} \tag{24.6}$$

vagyis, ha az elem egyetlen szórással nem képes az *M*-edik makrocsoporton túl megváltoztatni a szórt neutron energiáját, akkor

$$Q_{M,k} = q_{g_M,k} \,. \tag{24.7a}$$

Mindig ilyenek a Fermi-elemek, tehát

$$Q_{M,\mathrm{F}} = q_{g_M,\mathrm{F}} \,. \tag{24.7b}$$

A többi *f*-elemre figyelembe kell venni annak a w_g valószínűségét, hogy a *g*-edik mikrocsoportban szóródott neutron energiája az *M*-edik makrocsoporton kívülre ke-rül:

$$Q_{M,f} = \sum_{g \in M} \Sigma_{gf}^{s} \Phi_{g} w_{g} , \qquad (24.8a)$$

ahol

$$w_{g} = \int_{u_{g-1}}^{u_{g}} \frac{du}{\Delta u_{g}} \int_{u_{M}}^{u-\ln\alpha_{f}} \frac{e^{-(u'-u)}}{1-\alpha_{f}} du' = \frac{1}{1-\alpha_{f}} \left[\frac{E_{g_{M}}}{E_{g}} \frac{1-E_{g}/E_{g-1}}{\Delta u_{g}} - \alpha_{f} \right].$$
(24.8b)

A szórási mátrixnak megfelelő tagokat hasonló módon számítjuk ki. A Fermielemekre

$$Q_{M' \to M, F} = \begin{cases} q_{g_M, F} & M = M' + 1; \\ 0 & M \ge M' + 1. \end{cases}$$
(24.9a)

Az f-elemekre analóg módon felírhatjuk, ha (24.6) fennáll:

$$Q_{M' \to M, f} = \begin{cases} q_{g_M, f} & M = M' + 1; \\ \\ 0 & u_{M'} - \ln \alpha_f \le u_{M-1}, \end{cases}$$
(24.9b)

vagyis nem kapunk a szórási mátrixhoz járulékot, ha az *M*'-edik és az *M*-edik makrocsoport túlságosan távol van egymástól (24.1. *ábra*). A többi f-elemre (24.8b) analógiájára bevezetjük a $w_{g\to M}$ mennyiséget, amely annak a valószínűsége, hogy a *g*-edik mikrocsoportban rugalmasan szóródó neutron energiája az *M*-edik makrocsoportba kerül át (vö. 24.2. *ábra*):

$$w_{g \to M} = \int_{u^*}^{u_g} \frac{du}{\Delta u_g} \int_{u_{M-1}}^{u^{**}} \frac{e^{-(u'-u)}}{1-\alpha_f} du', \qquad (24.10a)$$

ahol

$$u^* = \max(u_{g-1}, u_{M-1} + \ln \alpha_f)$$
(24.10b)

és

$$u^{**} = \min(u_M, u - \ln \alpha_f).$$
 (24.10c)



24.1. ábra. Az f-elem számára távoli makrocsoportok esete



24.2. ábra. Az f-elem számára közeli makrocsoportok esete

A (24.10a) alatti integrálás elvégezhető, és a következőt kapjuk eredményül. Ha $u_M + \ln \alpha_f \le u^*$ (vö. 24.3. *ábra*), $u^* = u_{g-1}$ és $u^{**} = u_M$, vagyis

$$w_{g \to M} \cdot \left(1 - \alpha_f\right) \cdot \Delta u_g = \left(E_{M-1} - E_M\right) \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_{g-1}}\right);$$

ha $u^* \le u_M + \ln \alpha_f < u_g$ (vö. 24.4 *ábra*), $u^{**} = u - \ln \alpha_f$, vagyis

62

$$w_{g \to M} \left(1 - \alpha_f \right) \Delta u_g = \left(E_{M-1} - E_M \right) \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E^*} \right);$$

végül, ha $u_g \le u_M + \ln \alpha_f$ (vö. 24.5. *ábra*), $u^{**} = u_M$, vagyis:

$$w_{g \to M} \cdot \left(1 - \alpha_f\right) \cdot \Delta u_g = E_{M-1} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E^*}\right) - \alpha_f \left(u_g - u^*\right).$$

Itt bevezettük az u*-nak megfelelő energiát:

$$E^* = \min(E_{g-1}, \alpha_f E_{M-1}).$$

Ezzel kapjuk a keresett mátrixelemet:

$$Q_{M' \to M, f} = \sum_{g=g_f}^{g_{M'}} \Sigma_{gf}^s \Phi_g w_{g \to M}$$

ahol

$$g_f = \max(g^*, g_{M-1}+1),$$

továbbá *g** annak a mikrocsoportnak az indexe, amelyre teljesül a következő feltétel (vö. *24.2. ábra*):

$$u_{g^{*}-1} \leq u_{M-1} + \ln \alpha_{f} < u_{g^{*}}$$



24.5. ábra. A g-edik mikrocsoportból nem lehet "túllőni" az M-edik makrocsoportot

2.5. Kitekintés más lassulási programokra

Még kidolgozandó!!!

3. KEVÉSCSOPORT DIFFÚZIÓELMÉLET

3.1. A kevéscsoport diffúzióegyenlet

A reaktor geometriai részleteit legegyszerűbben a *kevéscsoport diffúzióelmélet* segítségével vehetjük figyelembe. Az ehhez szükséges csoportállandókat a reaktor egyes homogén tartományaira kiszámított aszimptotikus spektrumok segítségével állítjuk elő. Az időfüggő *kevéscsoport diffúzióegyenletet* a következő alakban írjuk fel:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \operatorname{div} \left[D_g(\mathbf{r}) \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r},t) \right] - \left[\boldsymbol{\Sigma}_g^{a}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\Sigma}_g^{R}(\mathbf{r}) \right] \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r},t) + Q_{0g}(\mathbf{r},t),$$
(31.1a)

ahol

$$Q_{0g}(\mathbf{r},t) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_{g' \to g} \boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r},t) + f_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{g'}^{f} \boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r},t) + S_g(\mathbf{r},t)$$
(31.1b)

(g = 1, 2, ..., G). Az energiacserét leíró összegben csak azok a tagok szerepelnek, amelyek a tekintett *g*-edik csoportból *kivezetnek*. Emiatt jelent meg a szórási hatáskeresztmetszet helyén a Σ_g^R a *(removal) hatáskeresztmetszet*:

$$\Sigma_g^{\rm R} = \Sigma_g^{\rm s} + \Sigma_g^{\rm in} - \Sigma_{g \to g} = \sum_{g' \neq g} \Sigma_{g \to g'} \,. \tag{31.1c}$$

A sztatikus sajátérték-egyenletet a (31.1) egyenletek alapján egyszerűen felírhatjuk:

$$\operatorname{div}\left[D_{g}\left(\mathbf{r}\right)\operatorname{grad}\boldsymbol{\Phi}_{g}\left(\mathbf{r}\right)\right] - \left[\boldsymbol{\Sigma}_{g}^{a}\left(\mathbf{r}\right) + \boldsymbol{\Sigma}_{g}^{R}\left(\mathbf{r}\right)\right]\boldsymbol{\Phi}_{g}\left(\mathbf{r}\right) + \\ + \sum_{g' \neq g} \boldsymbol{\Sigma}_{g' \rightarrow g} \boldsymbol{\Phi}_{g'}\left(\mathbf{r}\right) + \frac{f_{g}}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^{G} \boldsymbol{\nu} \boldsymbol{\Sigma}_{g'}^{f} \boldsymbol{\Phi}_{g'}\left(\mathbf{r}\right) = 0.$$
(31.2)

A diffúzióegyenlet megoldására elterjedt módszer a véges differenciák módszere: az egyenletben szereplő deriváltakat véges differenciákkal közelítjük, amivel a differenciálegyenlet algebrai egyenletrendszerré alakul át. Az alábbiakban ezt a módszert ismertetjük a gyakorlatban előforduló geometriákra. A módszert legegyszerűbb úgy alkalmazni, hogy a reaktor egyes tartományait elhomogenizáljuk. A korszerű reaktorokban azonban a fűtőelemrács ugyan geometriailag szabályos, de az egyes rácspontokban különböző fajta pálcák vannak. Az ezekre vonatkozó, ún. *pálcakódok* esetében a végesdifferencia-egyenletek felírása másképp történik, mint homogén tartományokra vonatkozóan. Az alábbiakban mindkét megközelítést tárgyaljuk.

Gyakran két térbeli dimenzióban tárgyaljuk a vizsgált rendszert. Az "R–Z" geometriát és a gömbgeometriákat leszámítva ez csak akkor jelent korrekt leírást, ha a

kimaradt dimenzió irányába történő kifolyás figyelembevételére valamilyen közelítést alkalmazunk. A szokásos módszer egy ún. *axiális görbületi paraméter* segítségével írja le az axiális kifolyást. A módszer lényegét az "X–Y" geometria példáján mutatjuk be. Ebben a geometriában a fluxust

$$\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{\Phi}_{g}(x,y,z,t) = \boldsymbol{\Phi}_{g}(x,y,t)\cos(B_{z}z)$$

alakban közelítjük. A neutronkifolyást jelentő tag ekkor a következőképpen írható:

$$\operatorname{div}(D_{g}\operatorname{grad} \Phi_{g}(\mathbf{r}, t)) = \left\{ \operatorname{div}[D_{g}(x, y)\operatorname{grad} \Phi_{g}(x, y)] - D_{g}B_{z}^{2}\Phi_{g}(x, y, t) \right\} \cos(B_{z}z),$$

ahol B_z^2 az axiális görbületi paraméter. A div és grad operátorok a jobb oldalon már csak az (x, y) változókra hatnak. Ebben az esetben tehát (31.2) a következő alakba megy át:

$$div [D_{g}(x, y)grad \Phi_{g}(x, y)] - [\Sigma_{g}^{a}(x, y) + D_{g}(x, y)B_{z}^{2} + \Sigma_{g}^{R}(x, y)]\Phi_{g}(x, y) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{g' \to g} \Phi_{g'}(x, y) + \frac{f_{g}}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^{G} \nu \Sigma_{g'}^{f} \Phi_{g'}(x, y) = 0.$$
(31.3)

Egyéb egy- vagy kétdimenziós geometriákban az eljárás analóg: a $\Sigma_g^a(x, y)$ abszorpciós hatáskeresztmetszethez hozzáadjuk az axiális kifolyást leíró $D_g(x, y)B_z^2$ tagot. A továbbiakban úgy képzeljük, hogy ez már be van olvasztva az abszorpciós hatáskeresztmetszetbe, és erre a körülményre külön már nem utalunk.

3.2. A véges differenciák különböző geometriákban

A végesdifferencia-egyenletek felírásához először meg kell állapodni az osztópontok, valamint a hozzájuk tartozó csoportállandók és fluxusok indexelésében. Mindegyik koordináta szerinti egyik határpont indexe mindig 1. Ha az index a másik végén *n*, akkor e mentén a koordináta mentén (n - 1) intervallum van. Az (n - 1) intervallum hosszát a végpont indexe szerint jelöljük. Hasonlóképpen indexeljük az intervallumhoz tartozó csoportállandókat is. A fluxusok, források stb. indexe mindig a megfelelő osztópont indexe. Legyen a tekintett koordináta *x*. Ekkor a két határpont x_1 és x_n . A közöttük levő osztópontok koordinátái

$$x_i = x_{i-1} + \Delta x_i, \qquad i = 2, 3, ..., n.$$
 (32.1)

Hasonlóan indexeljük az y, z, r, Θ , \mathcal{G} és φ koordinátákat is. Az egyenletek felírásához szükség van még feles és negyedes indexű koordinátákra is, amelyeket szintén x-re írjuk fel, de értelemszerűen átvihetők a többi koordinátákra:

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{\Delta x_{i+1}}{2}, \qquad x_{i+1/4} = x_i + \frac{\Delta x_{i+1}}{4}$$
 (32.2a)

és

$$x_{i-1/2} = x_i - \frac{\Delta x_i}{2}, \qquad x_{i-1/4} = x_i - \frac{\Delta x_i}{4}.$$
 (32.2b)

Az egyenletek levezetését egyrészt a dimenziók száma, másrészt a geometria fajtája szerint csoportosítjuk. Először az általános osztóponthoz tartozó egyenleteket írjuk fel, majd a határfeltételek tárgyalásának a keretében írjuk fel a speciális pontokhoz

tartozó egyenleteket. Ilyen például a henger tengelye és a gömb középpontja (r = 0 mindkettőre), valamint a $\mathcal{G} = 0$ vonal gömbgeometriában.

Minden esetben kétfajta tagot kell felírnunk: egyrészt a kifolyási tagnak, másrészt a $\Sigma \Phi$ alakú szorzatoknak egy rácspont környezetére vett integrálját. Ezek alapján a végesdifferencia-egyenletek már egyszerűen felírhatók. Bármely dimenziószámhoz tartozó együtthatók kifejezhetők az alacsonyabb dimenziószámra felírt együtthatókkal. Ezt csak a 3D esetben vesszük igénybe, vagyis a 2D eseteket az 1D-től függetlenül kezeljük. Erre annál inkább is szükség van, hogy a két és három dimenzióban két esetet kell megkülönböztetni: a homogenizált tartományokra és a homogenizált fűtőelempálcákra vonatkozó közelítéseket. Végül megjegyezzük, hogy először csak az egyenletek felírásával foglalkozunk, majd a 3.2.5. szakaszban tárgyaljuk a végesdifferencia-közelítés pontosságát.

Geomet- ria	<i>a</i> _{1,<i>i</i>}	<i>a</i> _{2,<i>i</i>}	$\mathcal{V}_{1,i}$	<i>V</i> _{2,<i>i</i>}
1D sík	$\frac{D_{g,i+1}}{\Delta x_{i+1}}$	$\frac{D_{g,i}}{\Delta x_i}$	$\frac{\Delta x_{i+1}}{2}$	$\frac{\Delta x_i}{2}$
1D henger	$2\pi r_{i+1/2} \frac{D_{g,i+1}}{\Delta r_{i+1}}$	$2\pi r_{i-1/2} \frac{D_{g,i}}{\Delta r_i}$	$\pi r_{i+1/4} \Delta r_{i+1}$	$\pi r_{i-1/4} \Delta r_i$
1D gömb	$4\pi r_{i+1/2}^2 \frac{D_{g,i+1}}{\Delta r_{i+1}}$	$4\pi r_{i-1/2}^2 \frac{D_{g,i}}{\Delta r_i}$	$\frac{4\pi}{3} \left(r_{i+1/2}^3 - r_i^3 \right)$	$\frac{4\pi}{3} \left(r_i^3 - r_{i-1/2}^3 \right)$

32.1. táblázat. Együtthatók 1D geometriákban (belső pontokra)

3.2.1. Egy dimenzió (1D)

Három egydimenziós geometriát tekintünk: sík, henger és gömb. A kifolyási tag közelítését síkgeometriában írjuk fel:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g(\mathbf{r}) d\mathbf{f} = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} D_g \frac{d\Phi_g(x)}{dx} dx \cong D_{g,i+1} \frac{\left(\Phi_{g,i+1} - \Phi_{g,i}\right)}{\Delta x_{i+1}} + D_{g,i} \frac{\left(\Phi_{g,i-1} - \Phi_{g,i}\right)}{\Delta x_i}$$

A kifolyási tag tehát a következő alakban közelíthető:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) \mathrm{d} \mathbf{f} \cong a_{1,i} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i+1} - \boldsymbol{\Phi}_{g,i} \right) + a_{2,i} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i-1} - \boldsymbol{\Phi}_{g,i} \right).$$
(32.4)

Ez a képlet érvényes a henger- és a gömbgeometriára is. Az együtthatókat a *32.1. táb-lázat*ban összegezzük. Az integrál közelítése szintén ugyanolyan mind a három geometriában:

$$\int \Sigma_g \Phi_g \mathrm{d}V \cong \Phi_{g,i} \Big(\Sigma_{g,i+1} v_{1,i} + \Sigma_{g,i} v_{2,i} \Big).$$
(32.5)

Az itt szereplő együtthatókat is a 32.1. táblázat tartalmazza. Ezeket az egyenleteket csak a belső pontokra írjuk fel $(1 \le i \le n)$. A határpontokra (i = 1 és i = n) vonatkozó egyenletek a határfeltételektől függnek. A megfelelő egyenleteket a 3.2.4. szakaszban tárgyaljuk.

3.2.2. Két dimenzió (2D)

Két dimenzióban a szokásos X–Y, R–Z, R– Θ geometriák mellett tárgyaljuk a 2D gömbgeometriákat is: R– Θ és R– ϕ . A hatszöges és háromszöges geometriákat külön kell tekintenünk, ugyanis ezekre nem 5-pont, hanem 7-, illetve 4-pont egyenleteket kell felírni.



32.1. ábra. Reflektált reaktor számítására szolgáló rácsvonalak (X-Y geometria)



32.2. ábra. A 32.1. ábrán kijelölt osztópont kinagyított környezete (X-Y geometria)

X-Y geometria

A kétdimenziós véges differenciák módszerét először a legegyszerűbb esetre, az "X–Y" geometriára vonatkozóan mutatjuk be. Tekintsünk egy reaktort, amely az aktív zónából és az azt körülvevő reflektorból áll. A 32.1. ábrán e reaktor keresztmetszete látható. Az ábrát lefedtük a koordinátatengelyekkel párhuzamos rácsvonalakból álló sűrű hálóval, amelyek elhelyezése tetszőleges – azt leszámítva, hogy a különböző anyagi minőségű tartományokat elválasztó határvonalaknak rácsvonalaknak kell lenniük. Ez lényeges különbség a pálcakódokhoz képest: az utóbbiakban az anyagi minő-

ség nem a rácsvonalakon, hanem két rácspont között félúton változik meg. Emiatt az utóbbiakban másképp írjuk fel a végesdifferencia-egyenleteket.

A 32.1. ábrán üres körrel megjelölt pont környezetét a 32.2. ábra kinagyítva mutatja. A tekintett ponthoz tartozó fluxusok indexe (i, j). Négy szomszédja van: fent (F: i, j-1), lent (L: i, j+1), jobbra (J: i+1, j) és balra (B: i-1, j). A megfelelő fluxusokat ennek megfelelően, a rácsintervallumok hosszát pedig a (32.1) képlet szerint indexeljük. Az (i, j) pont környezetét a rácsvonalak az ábrán (1) - (4) indexekkel jelölt kvadránsokra osztják fel, amelyekhez egymástól eltérő anyagi összetételek tartozhatnak. A képletekben a kvadránsokat alsó indexszel különböztetjük meg egymástól.

Az osztópontok között behúzzuk a felező merőlegeseket: a *32.2. ábrán* ezek a szaggatott vonalak. A (31.3) egyenletet integráljuk a szaggatott vonalak által határolt területre. A kifolyási tagban a differenciálhányadosokat differenciahányadosokkal, magát a felületi integrált pedig téglányösszegekkel közelítjük:

$$\oint D_{g}(x, y) \operatorname{grad} \Phi_{g}(x, y) \operatorname{df} \cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_{j}} \cdot \frac{D_{1g} \Delta x_{i} + D_{2g} \Delta x_{i+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_{i+1}} \cdot \frac{D_{2g} \Delta y_{j} + D_{3g} \Delta y_{j+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_{j+1}} \cdot \frac{D_{3g} \Delta x_{i+1} + D_{4g} \Delta x_{i}}{2} + \frac{\Phi_{g,i-1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_{i}} \cdot \frac{D_{4g} \Delta y_{j+1} + D_{1g} \Delta y_{j}}{2}.$$
 (32.6a)

A (31.3)-ban szereplő többi tag térfogati integrálját egyszerű téglányösszeggel közelítjük a következő minta szerint:

$$\iint \Sigma_{g}(x, y) \Phi_{g}(x, y) dx dy \cong$$

$$\cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{4} \Big(\Sigma_{1g} \Delta x_{i} \Delta y_{j} + \Sigma_{2g} \Delta x_{i+1} \Delta y_{j} + \Sigma_{3g} \Delta x_{i+1} \Delta y_{j+1} + \Sigma_{4g} \Delta x_{i} \Delta y_{j+1} \Big).$$
(32.6b)

Ha ezt – a határpontokat kivéve – minden rácspontban és csoportban elvégezzük, akkor a (31.3) differenciálegyenlet-rendszert közelítőleg egy lineáris algebrai egyenletrendszerrel helyettesítjük. (Mint az 1D esetben, a határpontokban most sem kell integrálni, hiszen ott a határfeltételek meghatározzák a fluxus értékét, lásd 3.2.4. szakaszban.)

R-Z geometria

Az "R–Z" geometria az egyik legfontosabb geometria: egyrészt a reaktorok általában jó közelítéssel ábrázolhatók hengerként, másrészt ez a geometria valóságos háromdimenziós leírást tesz lehetővé. Tekintsük a *32.3.* és *32.4. ábrák*at, amelyeken egy henger alakú reaktorra vonatkozóan mutatjuk meg a rácsvonalak szerinti beosz-tást. Figyeljük meg, hogy a henger forgástengelye az első és második rácsvonal felező egyenesében van. Erre a körülményre a határfeltételek tárgyalásakor még visszaté-rünk.

A véges differenciák kiszámítása ugyanazzal a módszerrel történik, mint az X–Y geometria esetében, de mind a Laplace-operátor, mind az integrálok kezelése a hengergeometriához illeszkedik. Kiindulási egyenletünk (31.2), amelyben az \mathbf{r} vektor helyére a hengeres (r, z) koordinátákat írjuk. Tulajdonképpen a Laplace-operátort is át

illene írni hengerkoordinátákra, de – mint látni fogjuk – erre nincs szükség. Amikor a kiszemelt osztópont környezetére integráljuk a (31.2) egyenletet, figyelembe kell vennünk, hogy az r szerinti "rácsvonalak" valójában hengerfelületek.



32.3. ábra. Rácsvonalak R-Z geometriában



32.4. ábra. A 32.3. ábrán kijelölt osztópont kinagyított környezete (R-Z geometria)

Integráljuk (31.2)-t a *32.3. ábrá*n bejelölt pontnak a *32.4. ábrá*n kinagyított környezetére. A kifolyási tag integrálját a Gauss-tétel szerint felületi integrállá alakítjuk át, és ugyanazokat a közelítéseket alkalmazzuk, mint korábban:

$$\begin{split} \oint D_{g}(r,z) \operatorname{grad} \Phi_{g}(r,z) \operatorname{df} &\cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta z_{j}} \cdot \pi \left(D_{1g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} + D_{2g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta r_{i+1}} \cdot \pi r_{i+1/2} \left(D_{2g} \Delta z_{j} + D_{3g} \Delta z_{j+1} \right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta z_{j+1}} \cdot \pi \left(D_{3g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} + D_{4g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} \right) + \end{split}$$

$$+\frac{\Phi_{g,i-1,j}-\Phi_{g,i,j}}{\Delta r_{i}}\cdot\pi r_{i-1/2}\left(D_{4g}\Delta z_{j+1}+D_{1g}\Delta z_{j}\right).$$
 (32.7a)

A feles és negyedes koordinátákat a (32.2) képletekben definiáltuk. A (31.2)-ben levő többi tag integrálját a következő módon közelítjük:

$$\iint \Sigma_g(r, z) \Phi_g(r, z) 2\pi r dr dz \cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{2} \pi \bullet$$

$$\bullet \left(\Sigma_{1g} r_{i-1/4} \Delta r_i \Delta z_j + \Sigma_{2g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta z_j + \Sigma_{3g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta z_{j+1} + \Sigma_{4g} r_{i-1/4} \Delta r_i \Delta z_{j+1} \right).$$
(32.7b)

Az eddig felírt egyenletek az r > 0 radiális koordinátájú osztópontokra vonatkoznak. Az r = 0 környezetében felírandó egyenletekkel a 3.2.4. szakaszban foglalkozunk.



32.5. ábra. Rácsvonalak R-O geometriában

R-Øgeometria

Az R– θ geometria hasznos olyan esetekben, amelyekben a reaktor henger alakú, de azimutálisan változó szerkezetű. Ilyen helyzetet mutat a 32.5. *ábra*, amelyen egy három szektorból álló aktív zónát egy hengergeometriájú homogén reflektor vesz körül. A θ azimutszög szerinti rácsvonalak az ábrán sugarak (valójában a rajz síkjára merőleges síkok), az *r* radiális koordináta szerint pedig az ábrán körök (valójában a rajz síkjára merőleges koaxiális hengerek). A *z* tengely mentén a reaktor homogén, tehát az axiális kifolyást a (31.3) egyenlet analógiájára egy axiális görbületi paraméterrel vesszük figyelembe. A rácsvonalakhoz tartozó *i* és *j* indexeket nehéz lett volna az ábrára berajzolni. Az alkalmazott jelöléseknek megfelelő indexek a következők: (0: *i, j*) a kiszemelt osztópont, amelynek a szomszédai (F: *i, j*–1), (L: *i, j*+1), (J: *i*+1,*j*) és (B: *i*–1,*j*).



32.6. ábra. A 32.5. ábrán kijelölt osztópont környezete (R-Ø geometria)

A 32.5. ábrán bejelölt rácspont környezetét kinagyítva mutatjuk be a 32.6. ábrán. A szaggatott vonalak az osztópontok közötti távolság felénél haladnak, és az (*i*, *j*) pont környezetét a megszámozott négy kvadránsra osztják fel. A többi geometriánál is alkalmazott módon integráljuk a (31.3) egyenletet a szaggatott vonalak által határolt tartományra. Az egyenlet első tagjának az integráljában alkalmazzuk a Gauss-tételt. A kapott felületi integrált az alábbi módon közelítjük:

$$\oint D_{g}(r,\theta) \operatorname{grad} \Phi_{g}(r,\theta) \operatorname{df} \cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{r_{i}\Delta\theta_{j}} \cdot \frac{D_{1g}\Delta r_{i} + D_{2g}\Delta r_{i+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta r_{i+1}} \cdot r_{i+1/2} \frac{D_{2g}\Delta\theta_{j} + D_{3g}\Delta\theta_{j+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{r_{i}\Delta\theta_{j+1}} \cdot \frac{D_{3g}\Delta r_{i+1} + D_{4g}\Delta r_{i}}{2} + \frac{\Phi_{g,i-1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta r_{i}} \cdot r_{i-1/2} \frac{D_{4g}\Delta\theta_{j+1} + D_{1g}\Delta\theta_{j}}{2}.$$
 (32.8a)

A (31.3)-ban levő többi tag integrálját a következő módon közelítjük:

$$\iint \Sigma_{g}(r,\theta) \Phi_{g}(r,\theta) r dr d\theta \cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{4} \bullet$$

$$\bullet \left(\Sigma_{1g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} \Delta \theta_{j} + \Sigma_{2g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta \theta_{j} + \Sigma_{3g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta \theta_{j+1} + \Sigma_{4g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} \Delta \theta_{j+1} \right)$$
(32.8b)

Az R– θ geometriának akkor van értelme, amikor a csoportállandók függnek a θ azimutszögtől. (Ha nem így lenne, akkor elégséges lenne az R–Z geometria vagy az 1D hengergeometria.) Lehet például olyan eset, amelyben a 32.5. ábrán bejelölt három szektoron belül θ -tól függetlenek a csoportállandók, de a három szektor között eltérések vannak. Ekkor a teljes 360° szögre vonatkozóan fel kell írni a végesdifferen-
cia-egyenleteket. Gyakran előfordul viszont, hogy kijelölhető egy 120°-os vagy 60°os szektor, amely ismétlődik. Ilyenkor elégséges az egyenleteket erre a szektorra felírni, és a szektorokat határoló sugarak mentén – periodikus határfeltétellel – figyelembe venni az említett szimmetriát. A szimmetriának több fajtája lehetséges, és részletezésére a 3.2.4. szakaszban térünk vissza.

2D gömbgeometriák

A 2D gömbgeometriákat a *32.7. ábrák*on illusztráljuk. A reaktorfizikában ilyen geometriákat többnyire csak Monte Carlo programokkal szoktunk számolni. A *32.7b. ábrán* látható R–9 geometria legközönségesebb esete az atombomba két félgömbje, amelyek egymástól bizonyos távolságban vannak: a két félgömböt külön számoljuk R–9 geometriában, a köztük levő részt pedig R–Z geometriában, majd a három számítás eredményét alkalmas határfeltételekkel összeillesztjük. A 2D gömbgeometriák fontos tulajdonsága, hogy – az R–Z geometriához hasonlóan – nem igény-lik axiális görbületi paraméter bevezetését.

Az R– φ geometriában a térfogatelemek egy narancs szeleteire emlékeztetnek (32.7*a. ábra*), amelyeket az *r* változó szerint héjakra bontunk. Ha a harmadik gömbi koordináta (ϑ) egy kiválasztott értékénél (például $\vartheta = \pi/2$) elmetsszük a rendszert, akkor a 32.5. *ábrá*hoz hasonló képet kapunk, amelyen θ helyébe φ írandó. Két eltérés mégis van: egyrészt az *r* = konstans felületek most nem körívek, hanem gömbfelületek, másrészt a végesdifferencia-egyenletek felírásakor nem csak a 32.6. *ábrá*n látható négy kvadránsra, hanem a ϑ változóra is kell integrálni (0 és π között).

Ennek figyelembevételével a (32.8) egyenletekből kiindulva egyszerűen megkapjuk a végesdifferencia-egyenleteket. Egy $\Delta \phi$ intervallum által meghatározott délkörök közötti felület

$$r^2 \Delta \varphi \int_0^\pi \sin \vartheta \mathrm{d}\,\vartheta = 2r^2 \Delta \varphi \,,$$

ahol *r* az éppen tekintett gömbfelület sugara. A (32.8a) képlet második és negyedik tagjában szereplő, az *r* változó szerinti deriváltakat ezzel a felülettel kell beszorozni. (Az R– θ geometria esetében ugyanez $r\Delta\theta$ volt.) A φ szerinti deriváltak függnek ϑ értékétől, hiszen a $\Delta\varphi$ intervallumhoz tartozó ív hossza $r\sin\vartheta\Delta\varphi$, tehát a (32.8a) képlet első és harmadik tagjában szereplő deriváltak helyébe most

$$\frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{r_i \sin \theta \Delta \varphi_i}, \quad \text{illetve} \quad \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{r_i \sin \theta \Delta \varphi_{j+1}}$$

írandó. Ezeket be kell szorozni a φ szerinti ívre, vagyis a szélességi körre merőleges felülettel, amely a (\mathcal{G} , \mathcal{G} +d \mathcal{G}) intervallumban

$$r_{i-1/4} \mathrm{d} \vartheta \cdot \frac{\Delta r_i}{2}$$
, illetve $r_{i+1/4} \mathrm{d} \vartheta \cdot \frac{\Delta r_{i+1}}{2}$.

Az így kapott szorzatokat úgy kell integrálni \mathscr{P} -ra, hogy sin \mathscr{P} -val szorozzuk, majd a d \mathscr{P} differenciálokat összegezzük 0 és π között. A végeredmény a következő:

$$\pi \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{r_i \Delta \varphi_j} \cdot \frac{r_{i-1/4} \Delta r_i}{2}, \quad \text{illetve} \quad \pi \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{r_i \Delta \varphi_{j+1}} \cdot \frac{r_{i+1/4} \Delta r_{i+1}}{2}.$$

Ezzel a kifolyási tag integrálja a következőképpen adódik:

$$\begin{split} & \int_{0}^{\pi} \left(\oint D_{g}\left(r,\varphi\right) \operatorname{grad} \boldsymbol{\varPhi}_{g}\left(r,\varphi\right) \operatorname{df} \right) \sin \vartheta \, \mathrm{d} \, \vartheta \cong \\ & \cong \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j-1} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{r_{i} \Delta \varphi_{j}} \cdot \pi \frac{D_{1g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} + D_{2g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1}}{2} + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i+1,j} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{\Delta r_{i+1}} \cdot r_{i+1/2}^{2} \left(D_{2g} \Delta \varphi_{j} + D_{3g} \Delta \varphi_{j+1} \right) + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j+1} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{r_{i} \Delta \varphi_{j+1}} \cdot \pi \frac{D_{3g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} + D_{4g} r_{i-1/4} \Delta r_{i}}{2} + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i-1,j} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{\Delta r_{i}} \cdot r_{i-1/2}^{2} \left(D_{4g} \Delta \varphi_{j+1} + D_{1g} \Delta \varphi_{j} \right). \end{split}$$
(32.9a)

A térfogati integrálok közül tekintsük az (1) kvadránshoz tartozót:

$$r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \varphi_j}{4} \sin \vartheta \Delta \vartheta \,.$$

Ha ezt 0 és π között összegezzük a $\Delta \vartheta$ intervallumokra, akkor egy 2-es szorzót kapunk, tehát a megfelelő térfogatelem $r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \varphi_j}{2}$. Ennek megfelelően a térfogati integrál

$$\int_{0}^{\pi} \left(\iint \Sigma_{g}(r,\varphi) \Phi_{g}(r,\varphi) r^{2} dr d\varphi \right) \sin \vartheta d\vartheta \cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{2} \bullet$$
(32.9b)

•
$$\left(\Sigma_{1g}r_{i-1/4}^2\Delta r_i\Delta\varphi_j + \Sigma_{2g}r_{i+1/4}^2\Delta r_{i+1}\Delta\varphi_j + \Sigma_{3g}r_{i+1/4}^2\Delta r_{i+1}\Delta\varphi_{j+1} + \Sigma_{4g}r_{i-1/4}^2\Delta r_i\Delta\varphi_{j+1}\right)$$







Az R–9 geometriában a térfogatelemek a földrajzi szélességi körök által határolt térrészekre emlékeztetnek (32.7*b. ábra*), amelyeket az *r* változó szerint héjakra bontunk. Ha a harmadik gömbi koordináta (φ) egy kiválasztott értékénél (φ = 0-nál, például) elmetsszük a rendszert, akkor a 32.5. *ábrá*hoz hasonló képet kapunk, amelyen a θ változó helyett most ϑ szerepel. Két eltérés van: egyrészt az *r* = konstans felületek most nem körívek, hanem gömbfelületek, másrészt a végesdifferenciaegyenletek felírásakor nem csak a 32.6. *ábrán* látható négy kvadránsra, hanem a φ változóra is kell integrálni (0 és 2π között). Ez az utóbbi integrálás egyszerűen egy 2π -vel való szorzás jelent. Az R– φ geometriánál alkalmazott megfontolásokhoz hasonló módon kapjuk a következő végesdifferencia-egyenleteket:

$$\begin{split} & \int_{0}^{2\pi} \left(\oint D_{g}(r, \vartheta) \operatorname{grad} \boldsymbol{\varPhi}_{g}(r, \vartheta) \operatorname{df} \right) \operatorname{d} \boldsymbol{\varphi} \cong \\ & \cong \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j-1} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{r_{i} \Delta \vartheta_{j}} \cdot \pi \left(D_{1g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} + D_{2g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \right) + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i+1,j} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{\Delta r_{i+1}} \cdot r_{i+1/2}^{2} \frac{D_{2g} \Delta \Omega_{j} + D_{3g} \Delta \Omega_{j+1}}{2} + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j+1} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{r_{i} \Delta \vartheta_{j+1}} \cdot \pi \left(D_{3g} r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} + D_{4g} r_{i-1/4} \Delta r_{i} \right) + \\ & + \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{g,i-1,j} - \boldsymbol{\varPhi}_{g,i,j}}{\Delta r_{i}} \cdot r_{i-1/2}^{2} \frac{D_{4g} \Delta \Omega_{j+1} + D_{1g} \Delta \Omega_{j}}{2} , \end{split}$$
(32.10a)

ahol

$$\Delta \Omega_j = 2\pi \sin \vartheta_{j-1/4} \Delta \vartheta_j \quad \text{és} \quad \Delta \Omega_{j+1} = 2\pi \sin \vartheta_{j+1/4} \Delta \vartheta_{j+1}. \quad (32.10b)$$

A (31.2)-ben levő többi tag integrálját a következő módon közelítjük:

$$\int_{0}^{2\pi} \left(\iint \Sigma_{g}(r, \vartheta) \Phi_{g}(r, \vartheta) r^{2} \sin \vartheta dr d\vartheta \right) d\varphi \cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{4} \bullet$$

$$\bullet \left(\Sigma_{1g} r_{i-1/4}^{2} \Delta r_{i} \Delta \Omega_{j} + \Sigma_{2g} r_{i+1/4}^{2} \Delta r_{i+1} \Delta \Omega_{j} + \Sigma_{3g} r_{i+1/4}^{2} \Delta r_{i+1} \Delta \Omega_{j+1} + \Sigma_{4g} r_{i-1/4}^{2} \Delta r_{i} \Delta \Omega_{j+1} \right)$$

$$(32.10c)$$

32.2. táblázat. Együtthatók nem-hexagonális 2D geometriákban (belső pontokra)

Geometria	$a_{1,ij}$	$a_{2,ij}$
Х-Ү	$\frac{D_{i+1,j+1}\Delta y_{j+1} + D_{i+1,j}\Delta y_j}{2\Delta x_{i+1}}$	$\frac{D_{i,j+1}\Delta y_{j+1} + D_{ij}\Delta y_j}{2\Delta r}$
R–Z	$\frac{2\Delta x_{i+1}}{\pi r_{i+1/2}} \frac{D_{i+1,j+1}\Delta z_{j+1} + D_{i+1,j}\Delta z_{j}}{2\Delta r_{i+1}}$	$\frac{2\Delta x_i}{\pi r_{i-1/2}} \frac{D_{i,j+1}\Delta z_{j+1} + D_{ij}\Delta z_j}{2\Delta r_i}$
R–O hen- ger	$r_{i+1/2} \frac{D_{i+1,j+1} \Delta \Theta_{j+1} + D_{i+1,j} \Delta \Theta_j}{2\Delta r_{i+1}}$	$r_{i-1/2} \frac{D_{i,j+1} \Delta \Theta_{j+1} + D_{ij} \Delta \Theta_j}{2\Delta r_i}$
R–9 gömb	$r_{i+1/2}^{2} \frac{D_{i+1,j+1} \Delta \Omega_{j+1} + D_{i+1,j} \Delta \Omega_{j}}{2\Delta r_{i+1}}$	$r_{i-1/2}^2 \frac{D_{i,j+1} \Delta \Omega_{j+1} + D_{ij} \Delta \Omega_j}{2\Delta r_i}$
R–φ gömb	$r_{i+1/2}^{2} \frac{D_{i+1,j+1} \Delta \varphi_{j+1} + D_{i+1,j} \Delta \varphi_{j}}{\Delta r_{i+1}}$	$r_{i-1/2}^{2} \frac{D_{i,j+1}\Delta\varphi_{j+1} + D_{ij}\Delta\varphi_{j}}{\Delta r_{i}}$

Geometria	<i>a</i> _{3,<i>ij</i>}	<i>a</i> _{4,<i>ij</i>}
Х-Ү	$\frac{D_{i+1,j+1}\Delta x_{i+1} + D_{i,j+1}\Delta x_i}{2\Delta v_{i+1}}$	$\frac{D_{i+1,j}\Delta x_{i+1} + D_{ij}\Delta x_i}{2\Delta v}$
	$z = y_{j+1}$	
R–Z	$\pi \frac{D_{i+1,j+1}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{i,j+1}r_{i-1/4}\Delta r_i}{2\Delta z_{j+1}}$	$\pi \frac{D_{i+1,j-1}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{ij}r_{i-1/4}\Delta r_{i}}{2\Delta z_{j}}$
R–O hen- ger	$rac{D_{i+1,j+1}\Delta r_{i+1}+D_{i,j+1}\Delta r_{i}}{2r_i\Delta artheta_{j+1}}$	$\frac{D_{i+1,j}\Delta r_{i+1} + D_{ij}\Delta r_i}{2r_i\Delta\Theta_j}$
R–9 gömb	$\pi \frac{D_{i+1,j+1}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{i,j+1}r_{i-1/4}\Delta r_{i}}{r_{i}\Delta \vartheta_{j+1}}$	$\pi \frac{D_{i+1,j}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{ij}r_{i-1/4}\Delta r_i}{r_i\Delta \mathcal{P}_j}$
R–φ gömb	$\pi \frac{D_{i+1,j+1}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{i,j+1}r_{i-1/4}\Delta r_{i}}{2r_i\Delta\varphi_{j+1}}$	$\pi \frac{D_{i+1,j}r_{i+1/4}\Delta r_{i+1} + D_{ij}r_{i-1/4}\Delta r_i}{2r_i\Delta\varphi_j}$

32.2. táblázat. (folytatás)

Geomet- ria	$v_{1,ij}$	$\mathcal{V}_{2,ij}$	V _{3,ij}	$\mathcal{V}_{4,ij}$
Х-Ү	$\frac{\Delta x_i \Delta y_j}{4}$	$\frac{\Delta x_{i+1} \Delta y_j}{4}$	$\frac{\Delta x_{i+1} \Delta y_{j+1}}{4}$	$\frac{\Delta x_i \Delta y_{j+1}}{4}$
R–Z	$\pi \frac{r_{i-1/4} \Delta r_i \Delta z_j}{2}$	$\pi \frac{r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta z_j}{2}$	$\pi \frac{r_{i+1/4} \Delta r_{i+1} \Delta z_{j+1}}{2}$	$\pi \frac{r_{i-1/4} \Delta r_i \Delta z_{j+1}}{2}$
R–Θ henger	$\frac{r_{i-1/4}\Delta r_i \Delta \theta_j}{4}$	$\frac{r_{i+1/4}\Delta r_{i+1}\Delta \theta_j}{4}$	$\frac{r_{i+1/4}\Delta r_{i+1}\Delta \theta_{j+1}}{4}$	$\frac{r_{i-1/4}\Delta r_i \Delta \theta_{j+1}}{4}$
R– 9 gömb	$r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \Omega_j}{4}$	$r_{i+1/4}^2 \frac{\Delta r_{i+1} \Delta \Omega_j}{4}$	$r_{i+1/4}^2 \frac{\Delta r_{i+1} \Delta \Omega_{j+1}}{4}$	$r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \Omega_{j+1}}{4}$
R–φ gömb	$r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \varphi_j}{2}$	$r_{i+1/4}^2 \frac{\Delta r_{i+1} \Delta \varphi_j}{2}$	$r_{i+1/4}^2 \frac{\Delta r_{i+1} \Delta \varphi_{j+1}}{2}$	$r_{i-1/4}^2 \frac{\Delta r_i \Delta \varphi_{j+1}}{2}$

Összegzés az 5-pontos 2D sémákra

A (32.6)–(32.10) képletek azonos alakra hozhatók. A kifolyási tag közelítésének általános alakja:

$$\oint D_{g} \operatorname{grad} \Phi_{g}(\mathbf{r}) d\mathbf{f} \cong a_{1,ij} \left(\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,ij} \right) + a_{2,ij} \left(\Phi_{g,i-1,j} - \Phi_{g,ij} \right) + a_{3,ij} \left(\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,ij} \right) + a_{4,ij} \left(\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,ij} \right),$$
(32.16a)

továbbá az integrálé:

$$\iint \Sigma_{g} \Phi_{g} dV \cong \Phi_{g,i,j} \Big(\Sigma_{g,ij} v_{1,ij} + \Sigma_{g,i+1,j} v_{2,ij} + \Sigma_{g,i+1,j+1} v_{3,ij} + \Sigma_{g,i,j+1} v_{4,ij} \Big).$$
(32.16b)

Az itt szereplő együtthatók értékét a fenti egyenletekből olvashatjuk ki. Az egyes geometriákhoz tartozó együtthatókat a *32.2. táblázat* tartalmazza a belső pontokra. A táblázatokban a következő, a korábbi képletektől eltérő jelöléseket alkalmazzuk:



32.8. ábra. Rácsvonalak hatszöges geometriában

Hatszöges geometria

Hatszöges geometriában a koordinátatengelyek egymással 60°-os szöget zárnak be. Ilyen rendszerben a diffúzióegyenletet nem a 32.2., 32.4. és 32.6. *ábrák*on látható négy kvadránsra integráljuk, hanem a 32.8. *ábrán* berajzolt hatszögre, amelynek az oldalai a szomszédos rácspontokat összekötő szakaszok felező merőlegesei. A kiszemelt, "0"-val jelölt rácspont környezetét kinagyítva a 32.9. *ábrán* láthatjuk. A kapott végesdifferencia-egyenletekben az ezt körülvevő hat rácsponthoz tartozó fluxusok fognak szerepelni. Így tehát – eltérően az eddig tárgyalt esetektől, amelyekben 5pont egyenleteket kaptunk – most 7-pont egyenleteket fogunk felírni.

A 32.8. ábrán a különböző anyagi minőségű tartományokat elválasztó vonalak mind rácsvonalak. Jóllehet a hatszöges geometriában végzett számítások általában többé-kevésbé kötődnek az eredeti, hatszöges fűtőelemrácshoz, homogenizált tartományokra vonatkozóan végzett számításokban a véges differenciák rácspontjainak nem kell szükségképpen egybeesniük a fűtőelemrács rácspontjaival, sőt egy koordinátatengely mentén még változhatnak is, továbbá az x- és y tengely mentén felvett beosztásnak sem kell azonosnak lennie. Itt azonban van egy megszorítás: az alábbi végesdifferencia-egyenletek csak akkor írhatók fel konzekvensen, ha $\Delta x/\Delta y$ mindegyik rácspont környezetében 0,5 és 2 közé esik. A "0–2" és "0–5" átlók ugyanis csak ebben az esetben osztják hegyes szögű háromszögekre a parallelogrammát. Ilyenkor létezik a 32.8. ábrára berajzolt hatszög, továbbá ekkor érvényesek az alább levezetendő egyenletek. A hatszög részletesen a 32.9. ábrán látható. A rácsvonalak és az

átlók a hatszöget az ábrán beszámozott szektorokra osztják. Az ezekben fekvő négyszögek felelnek meg az 5-pont sémák kvadránsainak. Az ábrán az (1) és (2), illetve a (4) és (5) szektorok anyagi minősége azonos. Tekintve azonban, hogy különböző anyagi minőségűek is lehetnének, ha az "1–4" rácsvonal tartományhatár lenne, továbbá az egyenletek felírása szempontjából nem okoz bonyodalmat, ha mindegyik szektor más anyagi minőségű tartományhoz tartozik, az alábbiakban ezt is megengedjük, mert képleteink érvényessége így általánosabb lesz.



32.9. ábra. A 32.8. ábrán kijelölt osztópont környezete (hatszöges geometria)

Elemi geometriai megfontolásokkal kapjuk a következő összefüggéseket: A két átló hossza:

$$d_1 = \sqrt{(\Delta x_{i+1})^2 + (\Delta y_j)^2 - \Delta x_{i+1} \cdot \Delta y_j}$$

és

$$d_2 = \sqrt{(\Delta x_i)^2 + (\Delta y_{j+1})^2 - \Delta x_i \cdot \Delta y_{j+1}}$$

• Az (1) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza:²¹ $s_{11} = \frac{2 \cdot \Delta x_{i+1} - \Delta y_j}{2\sqrt{3}}$ és $s_{12} = \frac{d_1}{2\sqrt{3}}$.

• A (2) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza:

$$s_{21} = \frac{d_1}{2\sqrt{3}}$$
 és $s_{22} = \frac{2 \cdot \Delta y_j - \Delta x_{i+1}}{2\sqrt{3}}.$

- A (3) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza: $s_{31} = \frac{2 \cdot \Delta y_{j+1} - \Delta x_{i+1}}{2\sqrt{3}} \qquad \text{és} \qquad s_{32} = \frac{2 \cdot \Delta x_{i+1} - \Delta y_{j+1}}{2\sqrt{3}}.$
- A (4) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza:

²¹ Az oldalak számozása az óramutató járását követi.

$$s_{41} = \frac{2 \cdot \Delta x_i - \Delta y_{j+1}}{2\sqrt{3}}$$
 és $s_{42} = \frac{d_2}{2\sqrt{3}}$

• Az (5) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza:

$$s_{51} = \frac{d_2}{2\sqrt{3}}$$
 és $s_{52} = \frac{2 \cdot \Delta y_{j+1} - \Delta x_i}{2\sqrt{3}}$

• A (6) szektor két szaggatottan rajzolt oldalának a hossza: $s_{61} = \frac{2 \cdot \Delta y_j - \Delta x_i}{2\sqrt{3}}$ és $s_{62} = \frac{2 \cdot \Delta x_i - \Delta y_j}{2\sqrt{3}}$.

Vegyük észre, hogy $s_{21} = s_{12}$ és $s_{51} = s_{42}$.

A (31.3) egyenlet kifolyási tagjának az integrálja ezekkel a mennyiségekkel a következőképpen közelíthető:

$$\begin{split} \oint D_{g}(x,y) \operatorname{grad} \Phi_{g}(x,y) \operatorname{df} &\cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_{j}} \cdot \left(D_{6g} s_{62} + D_{1g} s_{11} \right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i+1,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{d_{1}} \cdot \left(D_{1g} s_{12} + D_{2g} s_{21} \right) + \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_{i+1}} \cdot \left(D_{2g} s_{22} + D_{3g} s_{31} \right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_{j+1}} \cdot \left(D_{3g} s_{32} + D_{4g} s_{41} \right) + \frac{\Phi_{g,i-1,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{d_{2}} \cdot \left(D_{4g} s_{42} + D_{5g} s_{51} \right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i-1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_{i}} \cdot \left(D_{5g} s_{52} + D_{6g} s_{61} \right) \end{split}$$
(32.11a)

Az egyes szektoroknak a (31.3)-ban szereplő többi tag térfogati integráljához szükséges térfogatát a *32.9. ábrá*ról olvashatjuk le. A következőt kapjuk:

$$\begin{split} \int \int \Sigma_{g}(x, y) \varPhi_{g}(x, y) dx dy &\cong \frac{\varPhi_{g,i,j}}{4} \Big[\Sigma_{1g} \Big(\Delta y_{j} s_{11} + d_{1} s_{12} \Big) + \Sigma_{2g} \big(d_{1} s_{21} + \Delta x_{i+1} s_{22} \big) \Big] + \\ &+ \frac{\varPhi_{g,i,j}}{4} \Big[\Sigma_{3g} \Big(\Delta x_{i+1} s_{31} + \Delta y_{j+1} s_{32} \Big) + \Sigma_{4g} \Big(\Delta y_{j+1} s_{41} + d_{2} s_{42} \Big) \Big] + \\ &+ \frac{\varPhi_{g,i,j}}{4} \Big[\Sigma_{5g} \big(d_{2} s_{51} + \Delta x_{i} s_{52} \big) + \Sigma_{6g} \big(\Delta x_{i} s_{61} + \Delta y_{j} s_{62} \big) \Big]. \end{split}$$
(32.11b)

Ezek az egyenletek lényegesen egyszerűsödnek, amikor a rácsosztás egyenletes és szabályos: $\Delta x_i = \Delta x_{i+1} = \Delta y_j = \Delta y_{j+1} = p$. Ekkor egyszerűen belátható, hogy minden *k*-ra

$$s_{k1} = s_{k2} = \frac{p}{2\sqrt{3}},$$

továbbá $d_1 = d_2 = p$, amivel az előbbi integrálok a következő alakba mennek át:

$$\begin{split} \oint D_g(x, y) \operatorname{grad} \Phi_g(x, y) \mathrm{df} &\cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}} \cdot \left(D_{6g} + D_{1g}\right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i+1,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}} \cdot \left(D_{1g} + D_{2g}\right) + \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}} \cdot \left(D_{2g} + D_{3g}\right) + \\ &+ \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}} \cdot \left(D_{3g} + D_{4g}\right) + \frac{\Phi_{g,i-1,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}} \cdot \left(D_{4g} + D_{5g}\right) + \end{split}$$

$$+\frac{\Phi_{g,i-1,j}-\Phi_{g,i,j}}{2\sqrt{3}}\cdot (D_{5g}+D_{6g}), \qquad (32.12a)$$

illetve

$$\iint \Sigma_g(x, y) \Phi_g(x, y) dx dy \cong \frac{\Phi_{g,i,j}}{4} \cdot \frac{p^2}{\sqrt{3}} \Big(\Sigma_{1g} + \Sigma_{2g} + \Sigma_{3g} + \Sigma_{4g} + \Sigma_{5g} + \Sigma_{6g} \Big).$$
(32.12b)



32.10. ábra. Hatszöges fűtőelemrács részlete

Pálcakódok

A végesdifferencia-programok fontos osztályát alkotják a pálcakódok, amelyekben a fűtőelemrács minden pozíciója egyben a végesdifferencia-séma rácspontja is. Az eljárást a hatszöges geometria példáján mutatjuk be, de később alkalmazzuk négyszöges és háromszöges rácsokra is. A korábbiaktól eltérően nem használjuk az (i, j) indexeket, mert pálcakódokban a rácspontok azonosítása általában nem ezek segítségével történik.

A 32.10. ábrán egy hatszöges geometriájú fűtőelemrács részlete látható. Hogy megmutathassuk a rács szabálytalanságaiból adódó problémák kezelését, az ábrán egy szabálytalan környezetű pontot tekintünk: az ábrán "0" jelű rácspontot tőle eltérő tulajdonságú rácspontok veszik körül. Az "1", "3" és "5" jelű pontok, valamint a "2", "4" és "6" jelűek egymás között azonosak, de a két csoport különbözik egymástól és a "0" jelű rácsponttól. Szaggatott vonallal bejelöltük a "0" jelű pont körül annak az elemi cellának a határait, amelyhez a megjelölt fűtőelem tartozik. A többi geometriához képest eltérés, hogy a rácsosztás itt mindig egyenletes, hiszen a fűtőelemrács mindig olyan, hogy két szomszédos cella középpontja közötti távolság azonos. Jelöljük ezt a távolságot *p*-vel. Az alább levezetendő végesdifferencia-egyenleteket *finomhálós differenciasémá*nak nevezzük – szemben az ún. *durvahálós sémák*kal, amelyekben nem egy cella, hanem a celláknak valamilyen együttesét (például a fűtőelemköteget) tekintjük "rácspontnak". Az utóbbi sémák nem a véges differenciák módszerén,

hanem a *véges elemek*en alapulnak. Tárgyalásuktól ebben a fejezetben el kell tekintenünk.

A *32.10. ábrá*n látszik a pálcakódok és az egyéb geometriák között egy további eltérés: az anyagi minőség nem a rácspontokban változik ugrásszerűen, hanem két rácspont között félúton. Ez befolyásolja a végesdifferencia-egyenletek alakját.

A véges differenciákat ugyanazon az elven építjük fel, mint a többi geometria esetében: a "0" jelű rácsponthoz tartozó cellára integráljuk a (31.3) egyenletet. A kifolyási tag integráljában problémát jelent grad Φ közelítése, hiszen a cella határán csak a neutronáram folytonos, de grad Φ -nek szakadása van. Ez azt jelenti, hogy csak úgy kapunk folytonos (és differenciálható) függvényt, hogy mindegyik cellában a diffúzióállandó egységeiben mérjük a távolságot. Vegyük például a "0" és "1" jelű rácspontokat összekötő egyenest. Ha az ennek mentén mért geometriai távolságot *s*-sel jelöljük, akkor az $s' = s/D_g$ redukált távolság szerint vett derivált folytonos, tehát rá

$$D_g \frac{\partial \Phi}{\partial s} = \frac{\partial \Phi}{\partial s'} \cong \frac{\Phi_{1g} - \Phi_{0g}}{s'_{0 \to 1}} = \frac{\Phi_{1g} - \Phi_{0g}}{\frac{p}{2D_{0g}} + \frac{p}{2D_{1g}}} = \frac{2D_{0g}D_{1g}}{D_{0g} + D_{1g}} \frac{\Phi_{1g} - \Phi_{0g}}{p}.$$

Ha ezt minden szomszédra vonatkozóan alkalmazzuk, a következő finomhálós sémát kapjuk:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g \operatorname{d} \mathbf{f} \cong \sum_{k=1}^{6} \frac{2D_{0g} D_{kg}}{D_{0g} + D_{kg}} \frac{\Phi_{kg} - \Phi_{0g}}{p} \frac{p}{\sqrt{3}} = \\ = \sum_{k=1}^{6} \frac{2D_{0g} D_{kg}}{D_{0g} + D_{kg}} \cdot \frac{\Phi_{kg} - \Phi_{0g}}{\sqrt{3}}.$$
(32.13a)

A többi tag integrálja pedig:

$$\iint \Sigma_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Phi_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \cong p^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \Sigma_{0g} \Phi_{0g}.$$
(32.13b)

Ezekben a képletekben $p/\sqrt{3}$ és $p^2\sqrt{3}/2$ a hatszög egyik oldala, illetve területe.

Ha ugyanezt a gondolatmenetet egy négyszöges rácsra alkalmazzuk, akkor a következő képleteket kapjuk:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g \operatorname{d} \mathbf{f} \cong \sum_{k=1}^4 \frac{2D_{0g} D_{kg}}{D_{0g} + D_{kg}} \left(\boldsymbol{\Phi}_{kg} - \boldsymbol{\Phi}_{0g} \right).$$
(32.14a)

A többi tag integrálja pedig:

$$\iint \Sigma_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Phi_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \cong \Sigma_{0g} \Phi_{0g} p^2.$$
(32.14b)

Gyakran fordul elő, hogy egy hatszöges fűtőelemköteget egészében nem tudunk elhomogenizálni, mert a kötegen belül túlságosan nagymértékben változnak a csoportállandók. Ekkor a hatszöget kisebb tartományokra, célszerűen háromszögekre osztjuk, és a csoportállandókat csak azokon belül homogenizáljuk. Erre mutat példát a *32.11. ábra*. Az egyes háromszögeken belül a csoportállandók nem változnak, de szomszédos háromszögek már különbözhetnek egymástól. A háromszögek belsejében megjelölt pontok a háromszögek súlypontjai. Élhosszúságukat *p*-vel jelöljük, így a szomszédos rács-

pontok távolsága $p/\sqrt{3}$. Ha a (31.3) egyenletet a "0"-val jelölt háromszögre integráljuk, akkor a fentiek mintájára a következőket kapjuk:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g \operatorname{d} \mathbf{f} \cong \sum_{k=1}^3 \frac{2D_{0g} D_{kg}}{D_{0g} + D_{kg}} \sqrt{3} \cdot \left(\boldsymbol{\Phi}_{kg} - \boldsymbol{\Phi}_{0g}\right), \qquad (32.15a)$$

továbbá

$$\iint \Sigma_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Phi_g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \cong \Sigma_{0g} \Phi_{0g} \frac{p^2 \sqrt{3}}{4}.$$
 (32.15b)



32.11. ábra. Cellák háromszöges geometriában

Érdemes a pálcakódok végesdifferencia-sémáit a korábbi sémákkal összevetni. Ennek érdekében a (32.12a) képletet átírjuk a *32.10. ábra* jelöléseire:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g \operatorname{df} \cong \sum_{k=1}^6 \frac{\Phi_{kg} - \Phi_{0g}}{\sqrt{3}} \cdot \frac{D_{0g} + D_{kg}}{2}$$

Ha ezt a (32.13a) képlettel összehasonlítjuk, azt látjuk, hogy itt a diffúzióállandók számtani közepe szerepel, viszont a pálcakódokban a harmonikus közepük. A térfogati integrálokban fennálló eltérés a régióhatárok különböző jellegére vezethető vissza. (32.12b)-t így írhatjuk:

$$\iint \mathcal{L}_g(x, y) \mathcal{\Phi}_g(x, y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \cong p^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\mathcal{L}_{1g} + \mathcal{L}_{2g} + \mathcal{L}_{3g} + \mathcal{L}_{4g} + \mathcal{L}_{5g} + \mathcal{L}_{6g}}{6} \mathcal{\Phi}_{0g}.$$

Itt is a csoportállandók számtani közepét kaptuk a (32.13b)-ben szereplő Σ_{0g} helyett. Ennek az az oka, hogy a 32.10. ábrán bejelölt hatszögön belül a csoportállandók nem változnak, viszont a 32.9. ábrán a hatszög mindegyik szektorában mások lehetnek.

Összegzés a hatszöges 2D geometriára és a pálcakódokra

A hatszöges geometriára vonatkozó (32.11) egyenleteket, valamint a pálcakódok egyenleteit szintén lehet általános alakban felírni. A kifolyási tagra ez a következő:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g \operatorname{df} \cong \sum_{k=1}^n a_{kg} \left(\Phi_{kg} - \Phi_{0g} \right), \qquad (32.17a)$$

ahol n = 6, 4, 3 rendre hatszöges, négyszöges és háromszöges rácsokra. Az együtthatók értéke kiolvasható a (32.11a), (32.13a), (32.14a) és (32.15a) képletekből. A (32.11a) képletben a fluxusok indexét átírtuk a szektorok indexére. (32.11b) szerint a térfogati integrál a

$$\iint \Sigma_g \Phi_g \mathrm{d}V \cong \Phi_{0g} \sum_{k=1}^6 v_k \Sigma_{kg}$$
(32.17b)

alakban írható fel hatszöges geometriára. Pálcakódok esetében ez egyszerűbb:

$$\iint \Sigma_g \Phi_g \mathrm{d}V \cong \Phi_{0g} \Sigma_{0g} v \,, \tag{32.17c}$$

ahol
$$v = \frac{p^2 \sqrt{3}}{2}$$
 hatszöges, $v = p^2$ négyszöges és $v = \frac{p^2 \sqrt{3}}{4}$ háromszöges rácsra.

3.2.3. Három dimenzió (3D)

Háromdimenziós (3D) sémát a 2D sémákból kiindulva kaphatunk: X–Y–Z (tégla), R– Θ –Z (henger) és R– φ – ϑ (gömb), továbbá a *z* változót hozzákapcsolhatjuk a hatszöges geometriához, valamint a pálcakódokhoz három-, négy- és hatszöges rácsok mindegyikében. Először az előbbi három geometriát tekintjük. A 2D geometriák (*i*, *j*) indexéhez hozzá kell vennünk az *l* indexet, amelyek a harmadik koordináta mentén felvett osztópontok számozására szolgál. A *32.12. ábra* az R– φ – ϑ gömbgeometriára vonatkozóan mutatja egy (*i*, *j*, *l*) rácspont környezetét. Ehhez a geometriához még vissza fogunk térni, de az ábrát egyelőre tekintsük a rácspontok mindhárom geometriára – felírhatjuk a 3D végesdifferencia-egyenletek általános alakját. A kifolyási tag közelítése az (*i*, *j*, *l*) rácspontban

$$\oint D_{g} \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r}) d\mathbf{f} \simeq A_{1,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i+1,jl} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right) + A_{2,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i-1,jl} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right) + A_{3,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i,j+1,l} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right) + A_{4,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,i,j-1,l} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right) + A_{5,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,ij,l+1} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right) + A_{6,ijl} \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,ij,l-1} - \boldsymbol{\Phi}_{g,ijl} \right),$$
(32.18)

az integrálé pedig

$$\iiint \Sigma_{g} \Phi_{g} dV = \Phi_{g,ijl} \left(\Sigma_{g,ijl} V_{1,ijl} + \Sigma_{g,i+1,jl} V_{2,ijl} + \Sigma_{g,i+1,j+1,l} V_{3,ijl} + \Sigma_{g,i,j+1,l} V_{4,ijl} + \Sigma_{g,ij,l+1} V_{1,ij,l+1} + \Sigma_{g,i+1,j,l+1} V_{2,ij,l+1} + \Sigma_{g,i+1,j+1,l+1} V_{3,ij,l+1} + \Sigma_{g,i,j+1,l+1} V_{4,ij,l+1} \right).$$

$$(32.19)$$

Az itt szereplő együtthatókat megadó képletek már olyan terjedelmesek, hogy alkalmatlanok a 32.2. táblázathoz hasonló táblázatokban való összefoglalásra, ezért megelégszünk a képletek felírásával. (32.18)-ban azért használunk nagybetűket, mert az együtthatók kifejezhetők a megfelelő kétdimenziós séma kisbetűs együtthatóival.

A 32.12. ábra sémája szerint a 3D esetben nyolc oktánsról beszélünk, a 2D és 3D esetek közötti kapcsolat azonban jobban látszik, ha az első négy oktáns indexe mellé az l indexet, a második négyé mellé pedig az (l + 1) indexet írjuk. Ezért a V térfogatok indexelésénél megtartottuk a 2D esetek kvadránsainak az indexeit. Az $A_1 - A_4$ együtthatók értékei az X–Y–Z és R– Θ –Z geometriákban

$$A_{k,ijl} = \frac{a_{k,ijl}\Delta z_l + a_{k,ij,l+1}\Delta z_{l+1}}{2}, \qquad k = 1, 2, 3, 4.$$
(32.20a)

Az A_5 és A_6 együtthatók a z szerinti deriváltak közelítésére szolgálnak. Mivel ezek közelítése mind a négy, *l* szerint azonos rétegbe eső oktánsra ugyanaz, formálisan alkalmazhatjuk a (32.19) képletet a Σ hatáskeresztmetszet helyett *D*-re:

$$A_{5,ijl} = \frac{D_{ij,l+1}v_{1,ij} + D_{i+1,j,l+1}v_{2,ij} + D_{i+1,j+1,l+1}v_{3,ij} + D_{i,j+1,l+1}v_{4,ij}}{\Delta z_{l+1}},$$
 (32.20b)

$$A_{6,ijl} = \frac{D_{ijl}v_{1,ij} + D_{i+1,jl}v_{2,ij} + D_{i+1,j+1,l}v_{3,ij} + D_{i,j+1,l}v_{4,ij}}{\Delta z_l}.$$
(32.20c)

A V együtthatók két képlettel fejezhetők ki a nyolc oktánsra:

$$V_{k,ijl} = \frac{v_{k,ij}\Delta z_l}{2}, \quad V_{k+4,ijl} = \frac{v_{k,ij}\Delta z_{l+1}}{2}, \quad k = 1, 2, 3, 4.$$
(32.21)

Az R $-\phi$ -9 geometria képletei speciálisak. Az előző képletekből a következő helyettesítéssel lehet levezetni őket:

$$\Delta x \to \Delta r$$
, $\Delta y \to r \sin \vartheta \Delta \varphi$, $\Delta z \to r \Delta \vartheta$.

Segítségül tekintsük a 32.12. ábrát. Az r tengelyre merőleges felületek gömbfelületdarabok, nagyságuk $r^2 \Delta \Omega$, ahol a felső négy oktánsra

$$\Delta \Omega = \frac{\Delta \varphi}{2} \int_{\mathcal{G}_{l-1/2}}^{\mathcal{G}_l} \sin \vartheta \mathrm{d}\,\vartheta = \frac{\Delta \varphi}{2} \left(\cos \mathcal{G}_{l-1/2} - \cos \mathcal{G}_l \right) \cong \frac{\Delta \varphi \Delta \mathcal{G}_l}{4} \sin \mathcal{G}_{l-1/4}. \tag{32.22}$$

Az alsó négy oktánsra nyilván (l+1) és (l+1/4) szerepel *l*, illetve (l-1/4) helyett. Ebből következik, hogy

$$\begin{split} A_{1,ijl} &= r_{i+1/2}^2 \frac{\left(D_{i+1,j+1,l}\Delta\varphi_{j+1} + D_{i+1,jl}\Delta\varphi_{j}\right)\sin\vartheta_{l-1/4}\Delta\vartheta_{l}}{4\Delta r_{i+1}} + \\ &+ r_{i+1/2}^2 \frac{\left(D_{i+1,j+1,l+1}\Delta\varphi_{j+1} + D_{i+1,j,l+1}\Delta\varphi_{j}\right)\sin\vartheta_{l+1/4}\Delta\vartheta_{l+1}}{4\Delta r_{i+1}}. \end{split}$$

Ha ezt összevetjük a 32.2. táblázat szerint az $R-\phi$ geometriánál található együtthatókkal, akkor azt látjuk, hogy

$$A_{k,ijl} = \frac{a_{k,ijl} \sin \mathcal{G}_{l-1/4} \Delta \mathcal{G}_l + a_{k,ij,l+1} \sin \mathcal{G}_{l+1/4} \Delta \mathcal{G}_{l+1}}{4}, \qquad k = 1, 2.$$

Hasonló okoskodással levezethetjük a következő összefüggéseket is:

$$A_{k,ijl} = \frac{a_{k,ijl}\Delta \mathcal{G}_l + a_{k,ij,l+1}\Delta \mathcal{G}_{l+1}}{2\pi \sin \mathcal{G}_l}, \qquad k = 3, 4.$$

A maradék két együtthatót pedig (32.20b) és (32.20c) analógiájára kapjuk:

$$\begin{split} A_{5,ijl} &= \frac{D_{ij,l+1}v_{1,ij} + D_{i+1,j,l+1}v_{2,ij} + D_{i+1,j+1,l+1}v_{3,ij} + D_{i,j+1,l+1}v_{4,ij}}{2r_i\Delta \mathcal{G}_{l+1}} \sin \mathcal{G}_{l+1/2}, \\ A_{6,ijl} &= \frac{D_{ijl}v_{1,ij} + D_{i+1,jl}v_{2,ij} + D_{i+1,j+1,l}v_{3,ij} + D_{i,j+1,l}v_{4,ij}}{2r_i\Delta \mathcal{G}_l} \sin \mathcal{G}_{l-1/2}. \end{split}$$

(32.22) alapján és (32.21) mintájára a térfogatok a következőképpen számíthatók ki:

$$V_{k,ijl} = \frac{v_{k,ij} \sin \theta_{l-1/4} \Delta \theta_l}{2}, \quad k = 1, 2, 3, 4$$

és

$$V_{k+4,ijl} = \frac{v_{k,ij} \sin \vartheta_{l+1/4} \Delta \vartheta_{l+1}}{2}, \qquad k = 1, 2, 3, 4.$$

A programozási recept tehát a következő: készítünk egy szubrutint, amely az összes 2D geometriákban előállítja az *a* együtthatókat, valamint a *v* térfogatokat, majd ezt többször híva a fenti képletekkel számítjuk ki a 3D geometriákhoz tartozó együtthatókat és térfogatokat.



32.12. ábra. Oktánsok R-φ-9 geometriában

Hatszöges geometriában és pálcakódok esetében a (32.17) egyenletekből kell kiindulni. Tekintve, hogy a harmadik dimenzió a *z* változó, alkalmazhatjuk a (32.20) és (32.21) egyenletek alapelvét. (32.17a) általánosítása most a következő:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g \operatorname{d} \mathbf{f} = \sum_{k=1}^n A_k \Phi_{g,kl} + A_7 \Phi_{0g,l+1} + A_8 \Phi_{0g,l-1}$$

Itt a (k, l) indexek a "0" jelű rácspont szomszédjait jelentik az *l*-edik síkban, a (0, l+1) és (0, l-1) indexek pedig a "0" jelű rácspont alatti, illetve feletti rácspontokat jelentik. Az együtthatókat a (32.20) képletek mintájára számíthatjuk ki:

$$A_{k,il} = \frac{a_{k,il}\Delta z_l + a_{k,i,l+1}\Delta z_{l+1}}{2}, \qquad k = 1, 2, 3, 4, 5, 6.$$

A másik két együtthatót pálcakódok esetében (32.17c) alapján kapjuk:

$$A_{7,l} = \frac{D_{0,l+1}}{\Delta z_{l+1}} v$$
 és $A_{8,l} = \frac{D_{0l}}{\Delta z_l} v$

Hatszöges geometriában figyelembe kell vennünk, hogy a diffúzióállandó minden szektorban más lehet (vö. 32.9. ábra):

$$A_{7,l} = \frac{1}{\Delta z_{l+1}} \sum_{k=1}^{6} v_k D_{k,l+1} \qquad \text{és} \qquad A_{8,l} = \frac{1}{\Delta z_l} \sum_{k=1}^{6} v_k D_{kl} \ .$$

Pálcakódok esetében a térfogati integrált szintén (32.17c) alapján írhatjuk fel:

$$\iiint \Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}) \mathrm{d}\mathbf{r} \cong \Phi_{g,0,l} v \frac{\Sigma_{g,0,l+1} \Delta z_{l+1} + \Sigma_{g,0,l} \Delta z_l}{2}.$$

A fentiek mintájára ugyanez hatszöges geometriában:

$$\iiint \Sigma_g(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}) \mathrm{d}\mathbf{r} \cong \Phi_{g,0,l} \sum_{k=1}^6 v_k \frac{\Sigma_{g,k,l+1} \Delta z_{l+1} + \Sigma_{g,kl} \Delta z_l}{2}.$$

3.2.4. Határfeltételek

Az előző szakaszban csak a belső osztópontokra írtuk fel a végesdifferenciaegyenleteket, amelyeket még ki kell egészítenünk a külső osztópontokra vonatkozó határfeltételi egyenletekkel. Ezeket két csoportra osztjuk. Az első csoportba olyanok tartoznak, amelyek az adott geometria számára kötelezők:

- r = 0 közelében henger- és gömbkoordinátákban,
- $\mathcal{G} = 0$ és $\mathcal{G} = \pi$ közelében gömbgeometriában,
- periodikus határfeltételek, amelyek kifejezik, hogy a fluxus ugyanaz $\varphi = 0$ és $\varphi = 2\pi$ mellett a R- φ 2D gömb- és R- φ - ϑ 3D gömb-, illetve a R- Θ 2D hengerés R- Θ -Z 3D hengergeometriában.

A második csoportba az opcionális határfeltételek tartoznak, amelyek figyelembevétele vagy elhagyása a vizsgált esettől függ. Ilyenek a különböző szimmetriákat tükröző feltételek. Példák:

 $\Rightarrow \partial \Phi / \partial x = 0$ alakú határfeltételek x helyett bármelyik koordinátában,

 \Rightarrow a hatszöges geometria szektoros szimmetriái,

⇒ R– ϕ 2D gömb- és R– ϕ – ϑ 3D gömb-, illetve a R– Θ 2D henger- és R– Θ –Z 3D hengergeometria szektoros szimmetriái valamelyik szögváltozó szerint.

A határfeltételeket a következőképpen osztályozhatjuk formájuk szerint:

- (1) vákuum-határfeltétel,
- (2) zérus fluxusderivált határfeltétel,
- (3) szektorszimmetria,
- (4) tükrözéses szektorszimmetria,
- (5) eltolási szimmetria.

Az alábbiakban a pálcakódokat a többi végesdifferencia-sémájú programoktól szétválasztva tekintjük. Először az utóbbiakra szorítkozunk.

Vákuum-határfeltétel

A vákuummal határos felületeken a fluxust nullával kell egyenlővé tenni. Az ilyen határfelületeket egészértékű indexekkel látjuk el. Ha például az x = 0 sík ilyen határfelület, akkor ezen *j* minden értékére egyszerűen előírjuk, hogy

$$\Phi_{1,j} = 0, \qquad (32.23)$$

ahol *j* a másik koordináta indexe 2D geometriában. 3D-ben értelemszerűen $\Phi_{1,jl} = 0$ a határfeltétel minden *j*-re és *l*-re. A többi határfelületeken a vákuum-határfeltételt analóg módon írhatjuk fel. Mivel a végesdifferencia-egyenleteket csak belső osztópontokra írjuk fel, a fluxusnak ezt a zérus értékét az egyenletek megoldása nem érinti.

Zérus fluxusderivált határfeltételek

A zérus fluxusderivált határfeltételek közül először azokat tárgyaljuk, amelyek az adott geometriával kötelezően együtt járnak. Henger- és gömbgeometriában a Φ fluxusra alkalmazott Laplace-operátor tartalmazza az $\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial r}$ tagot, amely végtelenné válna r = 0-nál, hacsak nem lenne $\frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0$. Az ilyen típusú határfeltételek figyelembevételének a módja a következőkben összegezhető:

1. az r = 0 osztópont indexe i = 3/2;

2. minden j-re megköveteljük, hogy

$$\Phi_{1,j} = \Phi_{2,j} \,. \tag{32.24}$$

j a másik koordináta indexe 2D geometriában. 3D-ben értelemszerűen $\Phi_{1,jl} = \Phi_{2,jl}$ a határfeltétel minden *j*-re és *l*-re. Nyilvánvaló, hogy az *i* = 1 indexnek megfelelő osztópont mesterséges, hiszen hozzá az *r* sugár negatív értéke tartozik.

Gömbgeometriában a fluxusnak a \mathcal{G} változó szerinti deriváltja zérus $\mathcal{G} = 0$ -nál és $\mathcal{G} = \pi$ -nél. Ezt ugyanúgy biztosítjuk, ahogy r = 0-nál jártunk el az előbb. Ha a \mathcal{G} változó szerinti osztópontokat j = 1-től $j = n_{\mathcal{G}}$ -ig számozzuk meg, a $\mathcal{G} = 0$ és $\mathcal{G} = \pi$ értékeknek megfelelő indexek rendre j = 3/2 és $j = n_{\mathcal{G}} - 1/2$. Az R– \mathfrak{G} geometriának megfelelő két határfeltétel tehát

$$\Phi_{i,1} = \Phi_{i,2}$$
 és $\Phi_{i,n_g-1} = \Phi_{i,n_g}$ (32.25)

ahol az *i* index a radiális osztópontoknak felel meg. Ebben a geometriában az (i, 1) és (i, n_9) osztópontok mesterségesek. A 3D R– ϕ – ϑ geometria kezelése analóg.

Érdemes megjegyezni, hogy ha – tévedésből – vákuum-határfeltételt írunk elő ilyen határfelületeken, rossz eredményeket kapunk. Az a helyzet, hogy az r = 0, $\mathcal{G} = 0$, és $\mathcal{G} = \pi$ értékeknek megfelelő felületek valójában nem "határfelületek", hanem a koordinátarendszer speciális pontjai: a gömb középpontja vagy a henger tengelye, illetve a gömb "északi" vagy "déli" pólusa.

Ha valamelyik másik geometriában a vizsgált rendszernek valamilyen felületre vonatkozóan tükörszimmetriája van, ott a fluxus deriváltja eltűnik. Példák:

- $\partial \Phi / \partial z = 0$ a z = H/2 síkon, ha a henger tükörszimmetrikus erre a síkra vonatkozóan R–Z geometriában (*H* a henger teljes magassága);
- $\partial \Phi / \partial r = 0$ az $r = R_c$ felületen egy henger alakú cellában 1D hengergeometria esetében (R_c a cella külső sugara);
- $\partial \Phi / \partial x = 0$ és $\partial \Phi / \partial y = 0$ az x = 0 és/vagy y = 0 síkon, ha a rendszer tükörszimmetrikus a koordinátasíkokra vonatkozóan 2D X–Y geometriában;
- és így tovább.

Ilyen esetekben a probléma méretét csökkenthetjük, ha az említett deriváltak eltűnését határfeltételként előírjuk. Ezeknek az eseteknek a kezelése analóg a (32.24) és (32.25) képletekben definiált módszerhez.



32.13. ábra. A 2D R-O geometria rácsvonalai polárkoordinátákban

Periodikus határfeltétel

Henger- és gömbgeometriában a periodikus határfeltétel (formálisan) a következő szakaszban tárgyalt szektorszimmetria speciális esete. Mégis attól külön tárgyaljuk, mert a periodikus határfeltétel kötelező, amikor nem áll fenn szektorszimmetria. A határfeltételt a 2D R– Θ geometria példáján mutatjuk be.

Tekintsük a 32.13. *ábrát.* A periodikus határfeltétel a j indexre vonatkozik, amely a Θ koordináta szerinti rácsvonalak (az ábrán sugarak) sorszáma. A határfelté-

tel azt jelenti, hogy a Θ = 0-hoz tartozó sugár azonos a Θ = 2 π -hez tartozóval. E rácsvonal pontjaira kell végesdifferencia-egyenleteket felírnunk, hiszen valóságosan létező szomszédaik vannak. Jóllehet egy ilyen módszert be lehet programozni, de ez feleslegesen elbonyolítaná a programot, mivel ellentmondana annak az alapelvnek, hogy csak belső rácspontokra írunk fel egyenleteket. Ezért – vagyis a könnyebb programozhatóság kedvéért – a Θ = 2 π rácsvonal (sugár) után felveszünk egy mesterséges rácsvonalat, amelyik valójában a $\Theta_2 = \Delta \Theta_2$ rácsvonallal egyezik meg. Az eljárást a 32.14. ábrán mutatjuk be sematikusan. A Θ változó szerinti rácsvonalak a következők:

$$\Theta_1 = 0, \qquad \Theta_2 = \Delta \Theta_2, \cdots, \qquad \Theta_{n_{\Theta}-1} = 2\pi, \qquad \Theta_{n_{\Theta}} = 2\pi + \Delta \Theta_{n_{\Theta}}, \qquad (32.26)$$

ahol n_{Θ} a Θ változó szerinti valóságos és mesterséges rácsvonalak együttes száma. A rácsvonalakat nyilván úgy kell felvenni, hogy $\Delta \Theta_{n_{\Theta}} = \Delta \Theta_2$ legyen. Végesdifferenciaegyenleteket $j = 2, 3, ..., n_{\Theta}$ –1-re vonatkozóan írunk fel. A periodikus határfeltétel abban áll, hogy előírjuk a

$$\Phi_{i,1} = \Phi_{i,n_{\Theta}-1} \qquad \text{és} \qquad \Phi_{i,n_{\Theta}} = \Phi_{i,2} \qquad (32.27)$$

egyenlőségeket.



32.14. ábra. A 2D R-O geometria rácsvonalai sematikus ábrázolásban

Egyéb geometriákban (például X–Y, R–Z) az eltolási szimmetria kezelése formálisan a periodikus határfeltételével egyezik meg (lásd alább).

Szektorszimmetria

Opcionálisan figyelembe vehetjük a vizsgált rendszerben esetleg meglévő szektorszimmetriát. Ilyen esetben ugyanis a végesdifferencia-egyenletek megoldása ugyanezt a szimmetriát fogja mutatni még akkor is, ha a diffúzióegyenletet a teljes $(0, 2\pi)$ tartományra oldjuk meg. Ez azonban sokkal hosszabb számítási időt igényel, mint ha a végesdifferencia-egyenletek felírásakor eleve figyelembe vennénk a rendszer szimmetriáját.

Mindenek előtt definiáljuk, mit értünk szektorszimmetrián: a vizsgált rendszernek akkor van szektorszimmetriája, ha találunk egy olyan szektort, amelynek elforgatásaival az egész rendszert elő tudjuk állítani. Ez a definíció csak a hatszöges geometriára, illetve az R– Θ és R– Θ –Z hengergeometriák Θ változójára vagy az R– ϕ és R– ϕ – ϑ gömbgeometriák φ változójára vonatkozhat. A szektorszimmetria értelemszerűen nem vonatkozhat a gömbgeometriák ϑ változójára (32.7. ábrák). Az elképzelhető szektorszimmetriák száma meglehetősen nagy, hiszen az ismétlődő szektor középponti szöge $2\pi/N$ lehet, ahol N tetszőleges egész szám. (Ez alól kivétel hatszöges geometria, lásd alább.) N = 1 az előző szakaszban tárgyalt periodikus határfeltételnek felel meg. Az ilyenfajta határfeltételek figyelembevételének módját a 2D R– Θ hengergeometria példáján mutatjuk be.



32.15b. ábra.30°-os szektorszimmetria 2D R-O hengergeometriában

Egy egyszerű szimmetriaszektor látható a 32.15a. ábrán: egy 60°-os szektor hatszor ismétlődik a rendszeren belül (N = 6). Ezt *elemi szektor*nak nevezzük. A végesdifferencia-egyenleteket elegendő erre vonatkozóan felírni, ha a fluxus számára periodikus határfeltételt írunk elő a (0, $\pi/6$) intervallumban. Az előző szakaszban tárgyaljuk, hogyan lehet egy ilyen határfeltételt a $(0, 2\pi)$ intervallumban kezelni [vö. (32.26) és (32.27)]. Az eljárást könnyű általánosítani a $(0, \pi/6)$ intervallumra:

$$\Theta_1 = 0, \qquad \Theta_2 = \Delta \Theta_2, \cdots, \qquad \Theta_{n_{\Theta}-1} = \frac{\pi}{6}, \qquad \Theta_{n_{\Theta}} = \frac{\pi}{6} + \Delta \Theta_2,$$

továbbá előírjuk (32.27) teljesülését.

Tükrözéses szektorszimmetria

Akkor beszélünk *tükrözéses szektorszimmetriá*ról, amikor szektorszimmetria esetén az elemi szektoron belül tükrözéses szimmetria áll fenn. Ha a szektorszimmetria elemi szektorának középponti szöge $2\pi/N$, akkor tükrözéses szimmetria esetén ennek fele, vagyis $2\pi/(2N)$ az elemi szektor. Ezt az esetet egy gyakori példa alapján mutatjuk be részletesen. A 60°-os szektorszimmetria speciális esete látható a 32.15b. *ábrán*: a 60°-os szektor tükörszimmetrikus, ami azt jelenti, hogy az elemi szektor a 30°-os szektor, vagyis a végesdifferencia-egyenleteket elegendő a $(0, \pi/12)$ intervallumra felírni: a $\Theta = 0$ rácsvonalon a $(0, \pi/6)$ intervallumnak megfelelő szektor-határfeltételt, a $\Theta = \pi/12$ rácsvonalon pedig a zérus fluxusderivált határfeltételt kell előírni.

Jóllehet az előzőkből következik, a világosság kedvéért az eljárást explicit módon is megfogalmazzuk. A szektorszimmetria miatt $\Theta = 0$ -nál bevezetünk egy mesterséges rácsvonalat, továbbá a $\Theta = \pi/12$ rácsvonalnak a $j = n_{\Theta}-1/2$ indexet adjuk. Mint (32.26)-ban látható, a 60°-os szektor $\Theta = \pi/6$ határán még fel kell vennünk egy mesterséges rácsvonalat $\Theta = \pi/6 + \Delta \Theta$ -nál, ahol $\Delta \Theta$ alkalmasan választott érték. Ha ezt a szimmetriatengelyre (a 32.15b. ábrán a $\Theta = 30^{\circ}$ sugárra) tükrözzük, ez átmegy a $\Theta = -\Delta \Theta$ rácsvonalba. Az elforgatási szektorszimmetria miatt az ezen levő fluxusok ugyanazok, mint a $\Theta = +\Delta \Theta$ rácsvonalon levők. Eszerint tehát $\Delta \Theta$ -t $\Delta \Theta_3$ -mal kell egyenlővé tennünk, és így a Θ koordináta rácsvonalai a következők lesznek:

$$\Theta_{1} = -\Delta\Theta_{3}, \quad \Theta_{2} = 0, \quad \Theta_{3} = \Delta\Theta_{3}, \cdots, \qquad \Theta_{n_{\Theta}-1} = \pi/12 - \Delta\Theta_{n_{\Theta}}/2, \\ \Theta_{n_{\Theta}} = \pi/12 + \Delta\Theta_{n_{\Theta}}/2.$$
(32.28)

A végesdifferencia-egyenleteket $j = 2, 3, ..., n_{\Theta}$ -1-re írjuk fel. A periodikus, illetve a szimmetria-határfeltétel szerint előírjuk a következőket:

$$\Phi_{i,1} = \Phi_{i,3}$$
 és $\Phi_{i,n_{\Theta}} = \Phi_{i,n_{\Theta}-1}$ (32.29)

Az általánosságra visszatérve még néhány megjegyzést kell tennünk a tükrözéses szimmetriákkal kapcsolatban. Tetszőleges (forgatásos) szektorszimmetria esetében az elemi szektoron belül elképzelhető tükrözéses szektorszimmetria. Ha az eredeti szektor középponti szöge $2\pi/N$, akkor a tükrözéses elemi szektoré $2\pi/(2N)$. Ezt megfordítva a következő megállapításra jutunk: ha az elemi szektor középponti szöge $2\pi/N$, akkor páros N esetén a határfeltételek lehetnek mind forgatásos, mind tükrözéses típusúak [vö. (32.26) és (32.27), illetve (32.28) és (32.29)], viszont páratlan N esetén csak a forgatásos típusú határfeltételek jöhetnek szóba [vö. (32.26) és (32.27)]. Számokkal: a 180°-os, 90°-os, 60°-os, 45°-os, 36°-os, 30°-os stb. (N = 2, 4, 6, 8, 10,12, ...) elemi szektorok kétfélék, viszont a teljes kör ("a 360°-os szektor"), továbbá a 120°-os, 72°-os stb. (N = 1, 3, 5, ...) szektorok csak egyfélék lehetnek a Θ szerinti határfeltételek szempontjából.

.

Eltolási szimmetria

Az X–Y és X–Y–Z geometriákban mindegyik változó szerint, az R–Z geometriában z szerint, a nem gömbi 3D geometriákban z szerint, továbbá a hatszöges geometriában értelmezhető az eltolási szimmetria, ami azt jelenti, hogy a vizsgált (általában végtelen) rendszer előállítható, egy elemi cella eltolásaival – ugyanúgy, mint egy kristályrács esetében. Ilyenkor elég az elemi cellát tekinteni és a határfelületein a helyzetnek megfelelő határfeltételt előírni.



32.16a. ábra. Eltolási szimmetria X-Y geometriában



32.16b. ábra. Eltolási szimmetria hatszöges geometriában

A 32.16a. ábra egy ilyen rendszert mutat X–Y geometriában. Az ábrán csak véges számú téglalap van, de az egymáshoz képest eltolt téglalapok száma természetesen minden irányban végtelen. Az elemi cella a szürkére színezett téglalap. Az azonos számmal jelölt oldalak mentén a rácspontoknak és az anyagi minőségeknek azonosaknak kell lenniük. Az elemi cella (2)-vel jelölt felső oldalán nem írunk fel végesdifferencia-egyenleteket. Az ezzel szomszédos rácsvonal az alatta levő cellában

megismétlődik, és mindegyiken azonosak a fluxusok. Hasonlóan azonosak a fluxusok a (2)-vel jelölt oldalakon. Ez ugyanaz a helyzet, mint a *32.14. ábrán* mutatott periodikus szimmetria esete. Így tehát az eltolási és a periodikus szimmetria formálisan azonos módon kezelhető. Az x-irányban analóg módon kaphatunk határfeltételt.

A 32.16b. ábra ugyanezt mutatja hatszöges geometriában. Az elemi cella egymással szemben lévő oldalai közül csak az egyiken levő rácspontokban írunk fel végesdifferencia-egyenleteket. Ugyanakkor ezeken kívül felveszünk egy-egy mester-séges rácsvonalat, amelyre az iméntivel analóg módon vonatkoztatjuk a periodikus határfeltételeket.

A határfeltételek összegzése

Az előbbiekből következik, hogy a matematikai kezelés szempontjából alapvetően négyfajta határfeltétellel van dolgunk:

- 0. opció: vákuum-határfeltétel;
- 1. opció: zérus fluxusderivált határfeltétel;
- 2. opció: szektor- (periodikus) határfeltétel, illetve eltolási határfeltétel;
- 3. opció: tükrözéses szektorszimmetria-határfeltétel.

Használatukkal kapcsolatban egy sor megszorítást kell figyelembe venni. A lehetséges kombinációkat a 32.3. táblázatban foglaljuk össze. Az első két oszlopban az egyes változók szerinti tengely bal és jobb végén felvett opció sorszámát találjuk, a harmadik oszlopban pedig azokat a változókat adjuk meg, amelyekre az adott kombináció *nem* vonatkozhat. A pálcakódok esetében a szimmetriák kezelése eltér a végesdifferencia-sémájú programok esetétől, ezért ezekkel külön szakaszban foglalkozunk.

Határfeltétel		Változó és geometria, amelyre nem vonatkozhat	
Bal	Jobb	az adott kombináció	
0	0	r hengerre és gömbre, \mathcal{G} gömbre	
0	1	<i>r</i> hengerre és gömbre, \mathcal{G} gömbre	
0	2 és 3	minden változó minden geometriában	
1	0	𝔅 gömbre	
1	1	_	
1	2 és 3	<i>9</i> gömbre	
2 és 3	0	minden változó minden geometriában	
2 és 3	1	<i>𝔅</i> gömbre	
2 és 3	2 és 3	r hengerre és gömbre, \mathcal{G} gömbre	

Megjegyzések a táblázathoz:

- ⇒ A \mathscr{G} változóra gömbgeometriában csak az (1, 1) kombináció fogadható el. Ebben benne van a félgömb, amelyre \mathscr{G} a (0, $\pi/2$) vagy a ($\pi/2$, 0) intervallumban változik. Ezek az esetek leírhatók az (1, 3), illetve (3, 1) kombinációkkal is N = 2 mellett. Jobb azonban ezeket kizárni, mert az (1, 1) kombináció ezeket is lefedi félgömb esetén.
- \Rightarrow A henger és gömb *r* változójára a baloldali határfeltétel csak az 1. opció lehet.
- \Rightarrow A (0, 2) és (2, 0) kombinációk szükségtelenek. Például a (0, 2) kombináció periodikus határfeltételt jelentene a baloldali vákuum-határfeltétellel kombinálva. Eszerint a fluxusnak a jobb oldalon is el kellene tűnnie. Ezt a helyzetet a (0, 0) kombináció írja le. A (0, 3) és a (3, 0) kombinációk szintén szükségtelenek, ugyanis velük egyenértékűek a (0, 1), illetve az (1, 0) kombinációk.
- \Rightarrow A (2, 2) kombinációnak nincs értelme a táblázatban megadott koordinátákra.
- \Rightarrow A (0, 2) és (2, 0) kombinációkat leszámítva nincs megszorítás az x, y és z koordinátákra vonatkozóan.
- ⇒ A szektorszimmetria (3. opció) X-Y és hatszöges geometriában csak a geometriának megfelelő N értékek mellett értelmes. Az előbbiben csak a 360°-, 180°-, 90°- és 45°-os szektorszimmetriák engedhetők meg (N = 1, 2, 4, 8). Hatszöges geometriában megengedhetők a 360°-, 180°-, 120°-, 90°-, 60°- és 30°-os szektorszimmetriák (N = 1, 2, 3, 4, 6, 12). Természetes továbbá, hogy a rácsosztásoknak illeszkedniük kell a szimmetriákhoz.
- \Rightarrow A háromszöges geometria szimmetriái speciálisak. Nem megyünk a részletekbe.

Határfeltételek pálcakódok esetében

A pálcakódokhoz tartozó határfeltételek kezelését külön tárgyaljuk. A lehetséges esetek száma meglehetősen nagy, ezért az alkalmazható módszereket csak jellegzetes példákkal illusztráljuk. Minden példa a hatszöges fűtőelemrácsokra fog vonatkozni.



32.17a. ábra. 360°-os "szektor" hatszöges rácsban

A 32.17a. ábra egy hatszöges rácsot illusztrál, amelyben semmiféle szimmetriát nem tételezünk fel. A rácspontokat úgy számoztuk meg, ahogy egy számítógépi programban történik. Az egyes rácspontok szomszédainak az ábra szerinti sorszámát egy külön szubrutinnal kell kiszámítani, hogy a program a megfelelő fluxusértékeket tudja a (32.13a) képletbe helyettesíteni. Fehérre színeztük azokat a "pálcákat", amelyekre vonatkozóan a vákuum-határfeltételt előírjuk. Az idézőjel arra utal, hogy ezek valójában nem pálcák, hanem mesterséges rácspozíciók. A végesdifferencia-egyenle-teket csak a szürkére színezett pálcákra írjuk fel. Ez az ábra a hatszöges pálcakódok alapesete: ha van is a rendszeren belül szektor- vagy egyéb szimmetria, a geometria megadásakor ezt nem vesszük figyelembe, a kapott fluxusok ezeket a szimmetriákat mégis mutatni fogják.

A 32.17b. ábra egy 120°-os szektorszimmetriát mutató rendszert illusztrál. A három, egymással fedésbe forgatható szektort különbözőképpen színeztük ki. Az elemi szektor sötétszürke, csak rá vonatkozóan írjuk fel a végesdifferencia-egyenleteket. Fehérre színeztük azokat a számozott pozíciókat, amelyek csak a határfeltételek figyelembevétele miatt szükségesek, de rájuk vonatkozóan nem írunk fel végesdifferenciaegyenleteket. Ezt a színezési módot alkalmazzuk a többi ábrán is. A feketére színezett középponti pálca speciális helyzetű, tulajdonképpen mindegyik szektorhoz hozzátartozik vagy – ha úgy tetszik – egyikhez sem. A vákuum-határfeltétel az 1, 2, 3, 4, 5, 10, 15, 20 pálcákra vonatkozik, de - az egyszerűség kedvéért - ezt nem jelöltük külön. Itt ugyanis lehetne periodikus határfeltétel is, ha az ábrán mutatott hatszög egy elemi cella, amelynek az ismétlődése adja ki a vizsgált rendszert (vö. 32.17e. ábra). A szektor-határfeltétel figyelembevétele érdekében a rendszerhez hozzászámítottuk a fehér 16, 17, 18, 19, 20 és a világosszürke 1, 6, 11, 16, 17 sorszámú pálcákat. Ezek ugyanolyan szerepet játszanak, mint a (32.26)-(32.29) képletekkel definiált határfeltételek mesterséges rácsvonalai. A pálcakódok kétféleképpen járhatnak el. Az egyik módszer szerint a mesterségesen felvett pálcákhoz tartozó fluxusokat ténylegesen tárolják, és minden iteráció végén frissítik, ahogy az egyéb programok teszik (lásd a 3.4. alfejezetben). A másik módszer esetében csak az elemi szektorhoz tartozó pálcák fluxusait tárolja a program, és a végesdifferencia-egyenletek szerinti szomszédok sorszámát számoló szubrutin veszi figyelembe az adott szektorszimmetriát. Mindkét megoldásnak vannak előnyei és hátrányai, de ezek részleteibe nem bocsátkozunk.



32.17b. ábra. 120°-os szektorszimmetria hatszöges rácsban

A következő példa a 60°-os szektor lesz, amelynél egyaránt lehetséges a forgatási és a tükrözéses szimmetria. A *32.17c. ábra* a tükrözéses szimmetriát illusztrálja. Az elemi szektor a *32.17b. ábrá*n látható 120°-os szektor fele. A tükrözés tengelye az 1–2–4–7–11 vonal. Az elemi szektor másik oldala a 11–12–13–14–15 vonal, amelyen a fluxusok különbözhetnek a tükrözés tengelyén felvett fluxusoktól. Ezért ebben a rendszerben az 1–15 pálcák mindegyikére kell egyenletet felírnunk. A mesterséges pálcákat ennek megfelelően vettük fel. A helyzet más a *32.17d. ábrá*n, amely a forgatásos 60°-os szektorszimmetriát mutatja. Itt ugyanis a háromszög két oldalán felvett fluxusoknak meg kell egyezniük, tehát elég csak az egyik oldalra felírni a végesdifferencia-egyenleteket. A mesterségesen felvett pálcák ennek felelnek meg. A mesterséges pálcákkal kapcsolatos programozói megoldást illetően ugyanaz a két módszer létezik, mint amit a 120°-os szektornál mondtunk.



32.17c. ábra. 60°-os tükrözéses szektorszimmetria hatszöges rácsban



32.17d. ábra. 60°-os forgatásos szektorszimmetria hatszöges rácsban

A 32.17e. ábrán látható helyzet a 37.12d. ábra módosítása, amikor a szektorszimmetriát eltolásos szimmetriával kombináljuk. Ilyenkor az elemi cellát képező hatszöget eltoljuk oly módon, hogy az egymással szemben lévő oldalak fedésbe kerüljenek. A forgatásos szimmetria miatt az adott esetben ennek érdekében az eltolással egyidejűleg a hatszöget még 180°-kal el is kell forgatni. Az elemi cellán kívül megjelenő (fehérre színezett) pozíciók az elemi cellának a határvonallal szomszédos rácspontjainak felelnek meg. Végesdifferencia-egyenleteket azonban csak a sötétre színezett és megszámozott pálcákra írunk fel.



32.17e. ábra. Eltolási szimmetriával kombinált 60°-os forgatásos szektorszimmetria hatszöges rácsban

Szabályozórudak kezelése

A szabályozórudak figyelembevételével kapcsolatban az a probléma merül fel, hogy a rudak belsejében túlságosan nagy az abszorpciós hatáskeresztmetszet, és így ott nem érvényes a diffúzióegyenlet. Ezt a problémát általában úgy szoktuk megkerülni, hogy a diffúzióegyenlet érvényességét csak a rúdon kívül tételezzük fel, és a rúd felületén megadjuk a fluxus logaritmikus deriváltját, amelyet valamilyen, a rúd belsejére végzett transzportelméleti számítással határozunk meg. Ezen a módon a diffúzióegyenletet a rúdon kívül anélkül is meg tudjuk oldani, továbbá a sokszorozási tényezőt anélkül is ki tudjuk számítani, hogy a fluxust a rúd belsejében kiszámítanánk. Nézzük meg, hogyan írhatók fel ilyen esetben a végesdifferencia-egyenletek.

Tekintsük a 32.18. ábrát, amely csak annyiban különbözik a 32.1. ábrától, hogy van benne egy szabályozórúd. Ez a szürkére színezett terület. A véges differenciák módszeréből következik, hogy a rúd határfelületének is rácsvonalnak kell lennie. A rúd felületén valamelyik g csoportban (vagy csoportokban) megköveteljük, hogy teljesüljön a

$$D_g(\mathbf{r}_s) \frac{\partial \Phi_g(\mathbf{r}_s, t)}{\partial \mathbf{N}} = \gamma \Phi_g(\mathbf{r}_s, t)$$
(32.30)

határfeltétel, ahol \mathbf{r}_s a felület kiszemelt pontja, N pedig a felület kifelé mutató normálisa ebben a pontban. A γ tényezőt külön számítással kell meghatározni. Erre általában Monte Carlo vagy transzportelméleti módszereket szoktunk igénybe venni. γ annál nagyobb, minél erősebben abszorbeáló anyagból áll a rúd, és minél vastagabb. Szélső esetben a rúd minden berepülő neutront elnyel (vagy ahogy mondani szoktuk: "a rúd fekete"). Ekkor a rúd határfelületén a vákuum-határfeltétel érvényes, hiszen a vákuum olyan közeg, amely minden neutront elnyel (vagyis albédója zérus). A véges differenciák módszere megengedi, hogy a (32.30) határfeltételt csak egyes csoportokban írjuk elő, a többiben pedig a rúd belsejében is alkalmazzuk a diffúzióegyenletet. (32.30)-at többnyire ebben a csoportban követeljük meg, amely leggyakrabban a termikus csoport (g = G), mivel az abszorpciós hatáskeresztmetszet általában a termikus csoportban a legnagyobb. Ha *a* a rúd albédója, akkor

$$\gamma = \frac{1}{2} \cdot \frac{1-a}{1+a} \,. \tag{32.31a}$$

Ebből következik, hogy

$$\gamma \le \frac{1}{2}.\tag{32.31b}$$

A fentiek szerint tehát ez a felső határ a fekete rudak határesetében valósul meg. Elhanyagolható abszorpciójú rudakban $\gamma \approx 0$. γ -nak azonban nem ez az alsó határa. Abban az esetben ugyanis, amikor a rúd belsejében moderátor van, a rúd határán a fluxus kifelé csökkenhet, aminek negatív γ felel meg. Ilyen helyzet áll elő például akkor, amikor a rudat a reaktorból kihúzzák, és a helyére moderátor kerül.



32.18. ábra. Szabályozórudat (szürkére színezett rész) tartalmazó reaktor (X-Y geometria)

A 32.18. ábrán bejelölt osztópont környezetét a 32.19. ábrán kinagyítva mutatjuk be. A mondottak szerint a diffúzióegyenletet csak az (1) - (3) kvadránsokra integráljuk. A kifolyási tag

$$\oint D_g(x, y) \operatorname{grad} \Phi_g(x, y) \operatorname{df} \cong \frac{\Phi_{g,i,j-1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_j} \cdot \frac{D_{1g} \Delta x_i + D_{2g} \Delta x_{i+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i+1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_{i+1}} \cdot \frac{D_{2g} \Delta y_j + D_{3g} \Delta y_{j+1}}{2} +$$
(32.32a)

$$+ \frac{\Phi_{g,i,j+1} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta y_{j+1}} \cdot \frac{D_{3g} \Delta x_{i+1}}{2} + \frac{\Phi_{g,i-1,j} - \Phi_{g,i,j}}{\Delta x_i} \cdot \frac{D_{1g} \Delta y_j}{2} - \frac{\gamma \Phi_{g,ij}}{2} \cdot \frac{\Delta y_{j+1} + \Delta x_i}{2}.$$

Az utolsó tag negatív előjele onnan ered, hogy az itteni felületi integrálban a felület normálisa a rúd felületén a rúd belseje felé mutat, viszont (32.30)-ban az N vektor kifelé mutat. A (32.2b) térfogati integrál pedig a következőképpen módosul:



32.19. ábra. A 32.18. ábrán bejelölt osztópont környezete (X-Y geometria)

Az eddig felírt egyenletek elégségesek a diffúzióegyenlet megoldásához. A sokszorozási tényező számításához azonban a teljes neutronmérleget figyelembe kell venni, tehát a szabályozórúdban abszorbeálódott neutronok tejes számát annak ellené-re ki kell számítani, hagy a rúdon belül nem ismerjük a fluxust. A számítást arra az esetre végezzük el, amikor a (32.30) logaritmikus határfeltételt a termikus csoportra vonatkozóan írjuk elő. Ekkor az időtől független transzportegyenlet a rúd belsejében így írható fel:

$$-\mathbf{\Omega}\mathrm{grad}\,\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})-\boldsymbol{\Sigma}_{g}^{a}(\mathbf{r})\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})+\boldsymbol{Q}_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})=0\,,$$

ahol Q_g a lassulás révén fellépő neutronforrás. Mivel a termikus csoportról van szó, a szórás hatását figyelmen kívül hagyhattuk.²² Ha ezt a szabályozórúd térfogatára integráljuk (az integráljel alatt: "sz.r."), akkor a következőt kapjuk:

²² Ha a *g*-edik csoport nem a termikus csoport, az alábbiakat könnyen lehet általánosítani.

$$\int_{4\pi} d\Omega \int_{SZ.r.} \left\{ \sum_{g}^{a}(\mathbf{r}) \mathcal{P}_{g}(\mathbf{r}, \Omega) - \mathcal{Q}_{g}(\mathbf{r}, \Omega) \right\} d\mathbf{r} = -\int_{4\pi} d\Omega \int_{SZ.r.} \Omega \operatorname{grad} \mathcal{P}_{g}(\mathbf{r}, \Omega) d\mathbf{r} = -\int_{SZ.r.} \operatorname{div} \mathbf{J}_{g}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = -\oint_{SZ.r.} \mathbf{J}_{g}(\mathbf{r}_{s}) d\mathbf{f}.$$

A rúd felületén felírt (32.30) határfeltételhez hozzátartozik, hogy a rúd felületén már érvényesnek tekintjük a diffúziós közelítést, vagyis

$$-\mathbf{J}_{g}(\mathbf{r}_{s}) = D_{g}(\mathbf{r}_{s}) \text{grad} \boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r}_{s}),$$

amit az előző egyenletbe helyettesítve kapjuk a keresett végeredményt:

$$\int_{4\pi} d\mathbf{\Omega} \int_{\text{sz.r.}} \left[\Sigma_g^{a}(\mathbf{r}) \mathcal{P}_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) - \mathcal{Q}_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \right] d\mathbf{r} = \oint_{\text{sz.r.}} D_g(\mathbf{r}_s) \text{grad} \mathcal{P}_g(\mathbf{r}_s) d\mathbf{f} =$$
$$= \oint_{\text{sz.r.}} D_g(\mathbf{r}_s) \frac{\partial \mathcal{P}_g(\mathbf{r}_s)}{\partial \mathbf{N}} df = \oint_{\text{sz.r.}} \gamma \mathcal{P}_g(\mathbf{r}_s) df.$$

Ha ezt a képletet a 32.18. ábrán látható helyzetre alkalmazzuk, akkor azt kapjuk, hogy

$$\oint_{\text{sz.r.}} \gamma \Phi_g(\mathbf{r}_s) \, \mathrm{d}f \simeq \gamma \frac{\Delta x_i + \Delta y_{j+1}}{2} \Big(\Phi_{g,ij} + \Phi_{g,i-1,j} + \Phi_{g,i,j+1} + \Phi_{g,i-1,j+1} \Big). \quad (32.33)$$

Vegyük észre, hogy a (32.32a) képlet utolsó tagjának a negatívja éppen az itteni öszszegnek a $\Phi_{g,ij}$ fluxushoz tartozó tagja:

$$\gamma \frac{\Delta x_i + \Delta y_{j+1}}{2} \Phi_{g,ij}$$

A (32.33)-ban szereplő integrálban nem az (i, j) pont körüli kvadránsokra, hanem a 32.19. ábrán szürkére színezett téglalapra integrálunk. Amikor a téglalap másik három csúcspontjára írjuk fel a (32.32a) képletet, azokban az utolsó tag negatívja rendre

$$\gamma \frac{\Delta x_i + \Delta y_{j+1}}{2} \boldsymbol{\Phi}_{g,i-1,j}, \qquad \gamma \frac{\Delta x_i + \Delta y_{j+1}}{2} \boldsymbol{\Phi}_{g,i,j-1}, \qquad \gamma \frac{\Delta x_i + \Delta y_{j+1}}{2} \boldsymbol{\Phi}_{g,i-1,j+1}$$

lesz. (32.33) szerint e négy tag összege megadja a rúdban abszorbeálódó és a lassuló neutronok számának a különbségét a *g*-edik csoportra vonatkozóan. Ez a gondolatmenet általánosítható arra az esetre is, amikor a rúd felületén nem négy, hanem akárhány osztópont van. A következő alfejezetben *g*-re összegezni fogjuk a végesdifferenciaegyenleteket. Mivel ekkor a lassulási és neutronszórási tagok ki fogják ejteni egymást, belátjuk a következőt: amikor a (32.32a) szerinti mennyiségeket összeadjuk a szabályozórúd felületének minden pontjára és minden csoportra, a γ -val arányos tagok öszszege éppen az abszorbeálódó neutronok számának a negatívját adja meg. Ha kiszámítanánk a fluxust a rúd belsejében lévő osztópontokra, és vennénk a (32.32b) szerint az abszorpcióra kapott mennyiségeket, ugyanezt kapnánk, és szintén negatív előjellel szerepeltetnénk a végesdifferencia-egyenletekben. Erre az észrevételre szükségünk lesz a következő alfejezetben (a külső iteráció tárgyalásakor).

3.2.5. A végesdifferencia-egyenletek és határfeltételek pontossága

A 3.2.1.–4. szakaszokban alkalmazott módszerek a lehető legegyszerűbb alakú végesdifferencia-egyenletekhez vezetnek: a kifolyási tagban csak a tekintett rácspont közvetlen szomszédaihoz tartozó fluxusok szerepelnek, a térfogati integrálokban pedig csak a tekintett ponthoz tartozó fluxus. Az alábbiakban megvizsgáljuk, milyen pontosságot biztosítanak ezek, illetve milyen áron lehet a pontosságot fokozni. A lényeg megértéséhez elegendő a feltett kérdést a legegyszerűbb esetben, az 1D síkgeometria esetében megvizsgálni. A későbbiekben áttérünk a 2D geometriára is.

Megfontolások 1D síkgeometriában

Először a kifolyási tagot vizsgáljuk meg. Síkgeometriában a diffúzióegyenletet

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x} \right] - \Sigma(x)\Phi(x) + Q(x) = 0$$
(32.33a)

alakban írhatjuk fel, ahol

а

$$\Sigma(x) = \Sigma_g^{a}(x) + \Sigma_g^{R}(x) + D_g B_z^2.$$
(32.33b)

A g csoportindexet az egyszerűség kedvéért elhagyjuk. A 32.20. ábra mutatja a véges differenciáknak megfelelő rácsosztást. A kifolyási tag integrálját az

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x} \right] \mathrm{d}x = \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x} \right]_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \cong$$
$$\cong D_{i+1} \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{\Delta x_{i+1}} + D_i \frac{\Phi_{i-1} - \Phi_i}{\Delta x_i} \tag{32.34}$$

formulával közelítjük, amint a (32.4) képletből kiolvasható. Megmutatjuk, hogy ez a deriváltaknak meglehetősen magas rendű közelítése. Először egy olyan rácspont környezetét tekintjük, ahol sem a diffúzióállandó, sem a rácsosztás nem változik. Itt a fluxus deriváltja folytonos és a fluxus Taylor-sorba fejthető. Ha megelégszünk az első három taggal, akkor – mint egyszerűen belátható – a sor a következő:

$$\Phi(z) \cong \Phi_i + \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{2\Delta x} z + \frac{\Phi_{i-1} + \Phi_{i+1} - 2\Phi_i}{2(\Delta x)^2} z^2, \qquad (32.35)$$

ahol $z = x - x_i$ és $\Delta x = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$. Ennek a deriváltjai

$$\frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=x_{i-1/2}} = \frac{\mathrm{d}\Phi(z)}{\mathrm{d}z}\bigg|_{z=-\Delta x/2} = \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{\Delta x}$$

és

$$\frac{\mathrm{d}\,\boldsymbol{\Phi}(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=x_{i+1/2}} = \frac{\mathrm{d}\,\boldsymbol{\Phi}(z)}{\mathrm{d}z}\bigg|_{z=\Delta x/2} = \frac{\boldsymbol{\Phi}_{i+1}-\boldsymbol{\Phi}_i}{\Delta x}\,.$$

Ha (32.35)-ben egy harmadrendű tagot (z^3) is felveszünk, akkor e tag együtthatójának a meghatározásához már nem elégségesek a (Φ_{i-1} , Φ_i , Φ_{i+1}) fluxusok, további rácspontokhoz tartozó fluxusokra is szükség van. Ezért az együtthatót az adott számítási séma keretén belül nem tudjuk kifejezni, vagyis ezt a tagot kénytelenek vagyunk elhanyagolni. Így a deriváltakat megadó fenti képlet hibája (Δx)²-tel arányos. A közelí-



32.20. ábra. Rácsosztás síkgeometriában

Olyan rácspontokban, ahol *D* változik, csak a fluxus és az áram folytonos, de a fluxus deriváltjának szakadása van. Ha azonban a fluxust *x* helyett $z = (x - x_i)/D$ függvényének tekintjük, egy folytonos deriválttal rendelkező függvényt kapunk. Így (32.35) analógiájára a fluxust a

$$\Phi(z) = \Phi_i + bz + cz^2 \tag{32.36}$$

sorfejtéssel közelíthetjük, ahol a polinom együtthatói a következő egyletekkel fejezhetők ki:

$$\Phi_{i-1} = \Phi_i - bd_1 + cd_1^2$$
, $d_1 = \Delta x_i / D_i$

és

$$\Phi_{i+1} = \Phi_i + bd_2 + cd_2^2$$
, $d_2 = \Delta x_{i+1}/D_{i+1}$.

Itt már megengedjük, hogy Δx is változik. Ebből egyszerűen kapjuk az együtthatókat:

$$b = \frac{d_1^2 \Phi_{i+1} - d_2^2 \Phi_{i-1} - (d_1^2 - d_2^2) \Phi_i}{d_1 d_2 (d_1 + d_2)}$$
(32.37a)

és

$$c = \frac{d_1 \Phi_{i+1} + d_2 \Phi_{i-1} - (d_1 + d_2) \Phi_i}{d_1 d_2 (d_1 + d_2)}.$$
 (32.37b)

Ha a (32.36) polinomot x szerint deriváljuk, a következőt kapjuk:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}(x)}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=x_{i-1/2}} = \frac{1}{D_i} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}(z)}{\mathrm{d}z}\Big|_{z=-\frac{d_1}{2}} = \frac{\boldsymbol{\Phi}_i - \boldsymbol{\Phi}_{i-1}}{\Delta x_i}$$

és

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varPhi}(x)}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=x_{i+1/2}} = \frac{1}{D_{i+1}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varPhi}(z)}{\mathrm{d}z}\Big|_{z=\frac{d_2}{2}} = \frac{\boldsymbol{\varPhi}_{i+1} - \boldsymbol{\varPhi}_i}{\Delta x_{i+1}}$$

Ez azt jelenti, hogy a (32.34) képlet másodrendű közelítés tetszőleges rácsosztás és diffúzióállandók mellett. Általában igaz tehát, hogy a hibatag $(\Delta x)^2$ -tel arányos.

A térfogati integrálokra is kívánatos olyan közelítést alkalmazni, amelynek a hibája ugyanilyen rendű. A 3.2.1.–4. szakaszokban alkalmazott közelítések a követ-kező alakúak:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Sigma(x) \Phi(x) \mathrm{d}x \cong \Phi_i \frac{\Sigma_i \Delta x_i + \Sigma_{i+1} \Delta x_{i+1}}{2} \,. \tag{32.38}$$

Ha az integrálást a (32.36) polinomra elvégezzük, a következő eredményt kapjuk:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Sigma(x) \Phi(x) dx \simeq \Phi_i \frac{\Sigma_i \Delta x_i + \Sigma_{i+1} \Delta x_{i+1}}{2} - \frac{b}{8} \left[\frac{\Sigma_i}{D_i} (\Delta x_i)^2 - \frac{\Sigma_{i+1}}{D_{i+1}} (\Delta x_{i+1})^2 \right] + \frac{c}{24} \left[\frac{\Sigma_i}{D_i^2} (\Delta x_i)^3 + \frac{\Sigma_{i+1}}{D_{i+1}^2} (\Delta x_{i+1})^3 \right], \quad (32.39)$$

ahol *b* és *c* értékét a (32.37) képletekből kell behelyettesíteni. A közelítés akkor lenne másodrendű, ha a *b*-vel arányos tag eltűnne. Ez azonban csak kivételes esetekben következik be. Ilyen például a következő: $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$, $D_i = D_{i+1}$ és $\Sigma_i = \Sigma_{i+1}$. Ekkor a közelítés relatív hibája (Δx)²-tel arányos, mint a deriváltak esetében. Következésképpen a (32.38) képlet pontossága csak az imént említett speciális esetben egyezik meg a (32.34) közelítés pontosságával.

Levonhatjuk azt a következtetést, hogy homogén tartományok belsejében ajánlatos egyenletes rácsosztást alkalmazni. A régiók határán azonban a csoportállandók ugrása miatt a közelítés relatív hibája Δx -szel arányos. Ez azt jelenti, hogy – amíg a (32.38) közelítést alkalmazzuk – nem lehetséges az ilyen nagyságrendű hibáktól megszabadulni. A (32.38) közelítésnek azonban vannak formális előnyei. Először, ez a képlet egyszerű, a (32.39) képlet programozása viszont nehézkes. Másodszor, (32.39) nem általánosítható a 2D és 3D sémákra (lásd alább). Harmadszor, (32.39) bonyolultabb mátrixalgebrához vezet, mint a (32.38) képlet. Az utóbbi állítás illusztrálására tekintjük a fentiekben említett speciális esetet:

$$\Delta x_i = \Delta x_{i+1}, \qquad D_i = D_{i+1} \qquad \text{és} \qquad \Sigma_i = \Sigma_{i+1}$$

Ekkor a (32.39) képlet a következőt adja:

$$\int_{x_{i+1/2}}^{x_{i+1/2}} \Sigma(x) \Phi(x) dx \cong \Sigma_i \frac{\Phi_{i-1} + 22\Phi_i + \Phi_{i+1}}{24} \Delta x_i.$$
(32.40)

Ez olyan képlet, hogy a kiszemelt pont környezetére vonatkozó integrál közelítésében a szomszédos rácspontokhoz tartozó fluxusok is előfordulnak. A pontosság fokozása érdekében levezetett (32.39) képlet tehát oda vezet, hogy nem csak a végesdifferencia-egyenletek együtthatói, hanem a *szerkezetük* is megváltozik. A legtöbb végesdifferencia-program ezért alkalmazza a (32.38) közelítést – pontatlanságai ellenére.

Az integrációs képlet befolyásolja a határfeltételek megfogalmazását is. Hogy ez mit jelent, azt síkgeometriában a

$$\frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=0} = 0 \tag{32.41}$$

baloldali határfeltételre vonatkozóan fejtjük ki. Ennek a határfeltételnek a kielégítésére két mód kínálkozik a végesdifferencia-közelítés keretében (vö. *32.20. ábra*):

- (1) Az x = 0 pont az i = 3/2 indexű rácsponthoz tartozik.
- (2) Az x = 0 pont az i = 1 indexű rácsponthoz tartozik.

A két esetet külön tekintjük.

Az (1) esetben a (32.41) képlet egyenértékű a

$$\boldsymbol{\Phi}_1 = \boldsymbol{\Phi}_2 \tag{32.42}$$

feltétellel. Belátjuk, hogy ez összhangban van a (32.34) képlettel. Valóban, ha a (32.41) feltételt az i = 2 indexű rácspontra felírt (32.34) képletben alkalmazzuk, a következőt kapjuk:

$$\int_{x_{3/2}}^{x_{5/2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x} \right] \mathrm{d}x = D(x) \frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x} \Big|_{x=x_{5/2}} \cong D_3 \frac{\varphi_3 - \varphi_2}{\Delta x_3}, \qquad (32.43)$$

hiszen

$$0 = D(x) \frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x} \bigg|_{x = x_{3/2}} \cong D_2 \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{\Delta x_2}$$

Ebből következik a (32.42) feltétel. Ezzel beláttuk, hogy a (32.41) feltételnek ez másodrendű közelítése. i = 2 az első olyan rácspont, amelyre végesdifferencia-egyenletet írunk fel. Az ebben szereplő kifolyási tagot (32.43) adja meg. Az i = 1 rácspontra azért nem kell egyenletet felírni, mert a hozzá tartozó fluxust (Φ_1) a (32.42) feltétel meghatározza. Az i = 2 rácspontra vonatkozó integrál alakja attól függ, hogy (32.38) és (32.39) közül melyiket alkalmazzuk. Megmutatjuk, hogy az utóbbi használata nem jár különösebb előnnyel. A (32.36) polinom együtthatói az i = 2 rácspont esetében egyszerűbbek, mint a (32.37) képletek:

$$b = \frac{d_1(\Phi_3 - \Phi_2)}{d_2(d_1 + d_2)}$$

és

$$c = \frac{\Phi_3 - \Phi_2}{d_2 \left(d_1 + d_2 \right)}$$

A (32.41) feltételt többnyire a reaktor középpontjában alkalmazzuk, ahol a rácsosztás egyenletes, és a csoportállandók nem változnak. Emiatt (32.39) általában a következőre egyszerűsödik:

$$\int_{x_{3/2}}^{x_{5/2}} \mathcal{L}(x) \Phi(x) dx \cong \mathcal{L}_2 \Phi_2 \Delta x_2 + \mathcal{L}_2 \frac{\Phi_3 - \Phi_2}{24} \Delta x_2 = \mathcal{L}_2 \frac{\Phi_3 + 23\Phi_2}{24} \Delta x_2.$$

Ezt közvetlenül is megkaphatjuk (32.40)-ből, ha figyelembe vesszük a (32.42) képletet is. A $\Sigma_2 \Phi_2 \Delta x_2$ tag a (32.38) közelítésnek felel meg. Mivel $\Phi_2 \approx \Phi_3$, a

$$\Sigma_2 \frac{\Phi_3 - \Phi_2}{24} \Delta x_2$$

parabolikus korrekció kicsi, tehát a (32.38) képlet a határfelület közelében mindig jó közelítés.

A határfeltételnek ez a kezelésmódja egyszerű, de megvan az a hátránya, hogy nem kapunk fluxusértéket az x = 0 pontra. A (2) módszer ezzel szemben megadja ezt a fluxusértéket. Ugyanakkor a dolognak csak a (32.36) parabolikus közelítéssel együtt van értelme. Ennek belátására felírjuk az $x = x_1 = 0$ ponthoz tartozó végesdifferenciaegyenleteket. A kifolyási tag felírásához szükségünk van az i = 0 indexű pontra, amely az x = 0 síktól balra van. (Nem látszik a 32.20. ábrán.) A szimmetria következtében $\Phi_0 = \Phi_2$ és $D_1 = D_2$. Ezzel a kifolyási tag így írható:

$$\int_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}(x)}{\mathrm{d}x} \right] \mathrm{d}x = \left[D(x) \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}(x)}{\mathrm{d}x} \right]_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} \cong$$
$$\cong D_2 \frac{\boldsymbol{\Phi}_2 - \boldsymbol{\Phi}_1}{\Delta x_2} + D_1 \frac{\boldsymbol{\Phi}_0 - \boldsymbol{\Phi}_1}{\Delta x_2} = 2D_2 \frac{\boldsymbol{\Phi}_2 - \boldsymbol{\Phi}_1}{\Delta x_2}, \qquad (32.44a)$$

ahol $x_{1/2}=-\Delta x_2/2$ és $x_{3/2}=\Delta x_2/2$. Ha a (32.33a) egyenletet integráljuk, akkor első rendben a

$$2D_2 \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{\Delta x_2} - \Sigma_1 \Phi_1 \Delta x_2 + Q(x_1) \Delta x_2 = 0, \qquad (32.44b)$$

egyenlőséget kapjuk. Ebből következik, hogy ($\Phi_2 - \Phi_1$) különbség vezető tagja (Δx_2)²tel arányos, vagyis az (x_1, x_2) intervallumban a (32.36) képlet csak úgy alkalmazható, hogy b = 0 és $c \neq 0$. A c együttható értéke ekkor

$$c = \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{(\Delta x_2)^2}.$$

Így az integrál egyetlen elfogadható közelítése

$$\int_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} \Sigma(x) \Phi(x) dx \cong \Sigma_1 \Phi_1 \Delta x_2 + \Sigma_1 \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{12} \Delta x_2 = \Sigma_1 \frac{\Phi_2 + 11\Phi_1}{12} \Delta x_2.$$

Ennek azonban csak akkor van értelme, ha az i > 1 rácspontokban a (32.39) képletet alkalmazzuk. A fentiekben azonban úgy döntöttünk, hogy az integrálra nem ezt, hanem a (32.38) képletet alkalmazzuk. Így tehát a zérus fluxusderivált határfeltételre a (2) módszer alkalmazása nem konzisztens a többi végesdifferencia-egyenlettel. Ezért az (1) és (2) megoldások közül inkább (1)-et ajánljuk.

1D gömbi és hengeres geometriák

A fenti megfontolások a síkgeometriára szorítkoztak. Ami a deriváltak közelítését illeti, az elmondottak könnyen általánosíthatók az 1D gömb- és hengergeometriára. Az általánosítás az integrálok esetében is egyszerű, amennyiben a (32.38) képlet megfelelőjét alkalmazzuk. Ugyanez érvényes a határfeltételekre is. Természetesen maguk a képletek némileg eltérnek (lásd 3.2.1. szakasz), de a fenti konklúziók érvényben maradnak.

Amikor azonban a (32.39) parabolikus képletet alkalmazzuk, a helyzet elbonyolódik. A megfelelő képletek felírásától eltekintünk, mert ezt a közelítést nem javasoljuk. Természetesen levezetésük nem igényelne különösebb ötleteket.

Megfontolások a 2D geometriákra vonatkozóan

A síkgeometriára vonatkozó fenti megfontolásokat általánosítjuk a 2D X–Y geometriára. Ebben hivatkozunk a 32.2. ábrára. Először feltételezzük, hogy a csoportállandók ugyanazok a négy kvadránsban. A fluxust Taylor-sorba fejtjük az (i, j) rácspont körül:

$$\Phi(x, y) = \Phi_0 + ax + bx^2 + cy + dy^2 + exy + \dots,$$

ahol az a, b, c, d, e együtthatóknak a következő egyenleteket kell kielégíteniük:

$$\Phi(\Delta x_i, 0) = \Phi_{i-1,j}, \qquad \Phi(\Delta x_{i+1}, 0) = \Phi_{i+1,j},$$
 (32.45a)

$$\Phi(0, \Delta y_j) = \Phi_{i,j-1}, \quad \Phi(0, \Delta y_{j+1}) = \Phi_{i,j+1}.$$
 (32.45b)

Ez négy egyenlet öt ismeretlen együtthatóra. Az *e* együtthatót emiatt egyelőre határozatlannak hagyjuk. Meghatározásához további rácspontokhoz tartozó fluxusokra lenne szükség.

A kifolyási tag integrálja négy tag összegeként írható fel:

$$\iint \operatorname{div}(D\operatorname{grad} \Phi) \, \mathrm{d}V = \oint D\operatorname{grad} \Phi \, \mathrm{d}\mathbf{f} =$$
$$= \int_{\text{fent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial y} \, \mathrm{d}x - \int_{\text{lent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial y} \, \mathrm{d}x + \int_{\text{jobbra}} D \frac{\partial \Phi}{\partial x} \, \mathrm{d}y - \int_{\text{balra}} D \frac{\partial \Phi}{\partial x} \, \mathrm{d}y \,,$$

ahol az integrálok alá írt szavak a *32.2. ábra* szaggatott vonalának megfelelő szakaszait jelentik. Példaként a "fent" és "lent" jelű szakaszokat tekintjük, amelyek az (1) és (2) kvadránsok felső, illetve a (3) és (4) kvadránsok alsó határát jelentik. A többi szakaszt analóg módon lehet kezelni.

$$\int_{\text{fent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial y} dx = \int_{-\Delta x_i/2}^{\Delta x_{i+1}/2} D \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=\Delta y_j/2} dx = \int_{-\Delta x_i/2}^{\Delta x_{i+1}/2} D \left(c + 2d \frac{\Delta y_j}{2} + ex \right) dx =$$
$$= \int_{-\Delta x_i/2}^{\Delta x_{i+1}/2} D \left(c + 2d \frac{\Delta y_j}{2} \right) dx + e \frac{(\Delta x_{i+1}/2)^2 - (\Delta x_i/2)^2}{2}.$$

Hasonlóan:

$$\int_{\text{lent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial y} \, \mathrm{d}x = \int_{-\Delta x_i/2}^{\Delta x_{i+1}/2} D \left(c - 2d \frac{\Delta y_{j+1}}{2} \right) \mathrm{d}x + e \frac{\left(\Delta x_{i+1}/2 \right)^2 - \left(\Delta x_i/2 \right)^2}{2} \, .$$

Az *e* együtthatóval arányos tagok kiesnek, amikor e két integrált egymásból kivonjuk. Ebből következik, hogy az *e* együttható értéke a kifolyási tagot nem befolyásolja, így akár nullával is egyenlővé tehetjük. Ami a térfogati integrált illeti, a

$$e \iint xy \mathrm{d} V$$

integrál *csak akkor* tűnik el, amikor a rácsosztás egyenletes mind az x-, mind az ytengely mentén. Ennek ellenére mindig e = 0-val számolunk. Így az a és b, c és degyütthatókat külön-külön kiszámíthatjuk a (32.45a), illetve (32.45b) egyenletekből. Mindkét párra alkalmazható a (32.35) képlet.

Az általánosítás nem olyan egyszerű, amikor a csoportállandók változnak a *32.2. ábra* szaggatott vonalain belül. A részletektől eltekintünk. Sajnos a fenti megfontolások szigorúan nem vihetők át a 2D és 3D gömb- és hengergeometriákra. Ezt az R–Z geometria példájával illusztráljuk, feltéve, hogy a csoportállandók ugyanazok mind a négy kvadránsban (vö. *32.4. ábra*). A kifolyási tag alakja

$$\iiint \operatorname{div}(D\operatorname{grad} \Phi) \mathrm{d}V = \oint D\operatorname{grad} \Phi \mathrm{d}\mathbf{f} = \int_{\text{fent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial z} 2\pi r \mathrm{d}r - \int_{\text{lent}} D \frac{\partial \Phi}{\partial z} 2\pi r \mathrm{d}r + 2\pi r_{i+1} \int_{\text{jobbra}} D \frac{\partial \Phi}{\partial r} \mathrm{d}z - 2\pi r_i \int_{\text{balra}} D \frac{\partial \Phi}{\partial r} \mathrm{d}z \,.$$

Pillanatnyilag csak az *e* együtthatót tartalmazó tag integráljával foglalkozunk:

$$2\pi e D\left(\int_{\text{fent}} r^2 dr - \int_{\text{lent}} r^2 dr\right) = 0,$$

mint az X-Y geometriában. A másik két integrál azonban nem ejti ki egymást:

$$2\pi eD\left(r_{i+1}\int_{jobbra} zdz - r_i\int_{balra} zdz\right) = 2\pi eD\frac{(z_{j-1/2})^2 - (z_{j+1/2})^2}{2}(r_{i+1} - r_i) \neq 0.$$

Végeredményben megállapíthatjuk, hogy a véges differenciákra használt szokásos közelítés csak az 1D geometriákban pontos másodrendig. Következésképpen a 2D és 3D geometriákban nem érdemes a parabolikus közelítést alkalmazni. Más kérdés, hogy – ráadásul – az *e* együttható határozatlansága miatt nem is tudnánk ezt konzekvensen megtenni. 1D geometriákban a parabolikus közelítés még alkalmazható, tehát megfontolandó, de itt sem ad sokat, mivel a rácsosztás alkalmas sűrítésével az egyszerűbb képletekkel is könnyen elérhetjük ugyanazt a pontosságot.

Befejezésül még röviden visszatérünk a gömb- és hengergeometriákban a szögváltozók szerinti deriváltakra, amelyeket úgy közelítjük, hogy a húr hosszát a körív hosszával helyettesítjük. Példaként az R– Θ hengergeometriát tekintjük. A (32.8a) képlet első és harmadik tagjának nevezőjében szereplő $r_i \Delta \Theta_j$ és $r_i \Delta \Theta_{j+1}$ kifejezések az (i, j) és (i, j-1), illetve az (i, j) és (i, j+1) rácspontok közötti körívek hoszszát adják meg. Valójában nem ezeknek, hanem a megfelelő húroknak a hosszával kellene a véges differenciákat közelíteni. Az ábráról könnyen leolvasható, hogy a húrok hossza

$$2r_i \sin(\Delta \Theta_j/2)$$
, illetve $2r_i \sin(\Delta \Theta_{j+1}/2)$.

Ha ezeket sorba fejtjük, belátjuk, hogy az ívhosszal való közelítés ugyanúgy másodrendű, mint a deriváltak egyéb, fent alkalmazott közelítései:

$$2r_i \sin(\Delta \Theta_j/2) \cong r_i \Delta \Theta_j \left[1 - \frac{(\Delta \Theta_j)^2}{24} + \dots\right].$$

A véges differencia relatív hibája tehát $(\Delta \Theta_j)^2$ -tel arányos.

3.3. A végesdifferencia-egyenletek megoldása iterációval

Ebben a fejezetben csak a sztatikus sajátérték-egyenlettel foglalkozunk, ezért a *t* változót elhagyjuk.

3.3.1. Az egyenletrendszer felírása

Az előző fejezetben több geometriára is kiszámítottuk a véges differenciákat. Az alábbiakban az 5-pont sémákkal foglalkozunk részletesen, de az elmondottak egyszerűen átvihetők a hatszöges geometria 7-pont sémájára és a háromdimenziós sémákra is. Az 5-pont végesdifferencia-egyenlet kifolyási tagja az alábbi alakban írható fel:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \Phi_g(\mathbf{r}) \mathrm{d} \mathbf{f} \cong$$
(33.1)

$$\cong a\Phi_{g,i-1,j} + b\Phi_{g,i+1,j} + c\Phi_{g,i,j-1} + d\Phi_{g,i,j+1} - (a+b+c+d)\Phi_{g,ij}$$

Az egyszerűség kedvéért az *a*, *b*, *c*, *d* együtthatókhoz egyelőre nem írjuk oda a (*g*, *i*, *j*) indexeket. A szabályozórudakra vonatkozó (32.32a) alakú egyenletre ez annyiban igaz, hogy az "(*i*, *j*)" rácspontnak azok a szomszédai hiányoznak, amelyek a szabályozórúd belsejébe esnek. Φ_g együtthatója ekkor két részből tevődik össze: egyrészt a megmaradó szomszédok együtthatóinak az összege, másrészt a γ -val arányos tagok. (32.32a) szerint:

$$-(a+b+c+d)-\gamma \frac{\Delta y_{j+1}+\Delta x_i}{2}.$$

Azt kaptuk tehát, hogy $\Phi_{g,ij}$ együtthatója (33.1) szerint a szomszédok együtthatóinak az összege, amikor az "(*i*, *j*)" rácspont nem határos szabályozórúddal. Ha az "(*i*, *j*)" rácspont egy szabályozórúd felületén van, $\Phi_{g,ij}$ együtthatója határozottan nagyobb, mint a többi együttható összege. Általában igaz tehát az a megállapítás, hogy $\Phi_{g,ij}$ együtthatója nagyobb vagy egyenlő, mint a szomszédok együtthatóinak az összege.²³

A (33.1)-ben felírtakhoz még járulnak $\Phi_{g,ij}$ -vel arányos tagok, amelyek a következő három típusba sorolhatók: (1) az abszorpciós és a removal hatáskeresztmetszet, (2) a neutronlassulási tag és (3) a hasadások járuléka. Az első típusba tartozó tagok előjele negatív, és ezeket összevonjuk a (33.1)-ben levő együtthatókkal:

$$\oint D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) \mathrm{d} \mathbf{f} - \iint \left[\boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{R}}(\mathbf{r}) \right] \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) \mathrm{d} \mathbf{r} \cong$$

$$\cong a \boldsymbol{\Phi}_{g,i-1,j} + b \boldsymbol{\Phi}_{g,i+1,j} + c \boldsymbol{\Phi}_{g,i,j-1} + d \boldsymbol{\Phi}_{g,i,j+1} - e \boldsymbol{\Phi}_{g,ij}, \qquad (33.2a)$$

ahol

$$e = a + b + c + d + \frac{\iint \left[\Sigma_g^{a}(\mathbf{r}) + \Sigma_g^{R}(\mathbf{r}) \right] \Phi_g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\Phi_{g,ij}} > a + b + c + d.$$
(33.2b)

Az e > a+b+c+d reláció döntő szerepet játszik a végesdifferencia-egyenletek megoldásában. A hasadási forrás járulékát a következőképpen jelöljük:

$$S_{g,ij} = f_g \sum_{g'=1}^G \iint_{(i,j)} \nu \Sigma_{g'}^{\mathbf{f}}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} .$$
(33.3)

Az integráljel alatti (i, j)-vel azt jelöljük, hogy az integrálást az (i, j) rácspont körüli kvadránsokra kell kiterjeszteni. Végül bevezetjük a lassulási forrást:

$$L_{g,ij} = \sum_{g' \neq g} \iint_{(i,j)} \mathcal{L}_{g' \to g}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}) \mathrm{d}\mathbf{r} \,.$$
(33.4)

Mindkét összegben az integrált a különböző geometriákban a 3.2.2. szakaszban felírt képletek szerint kell kiszámítani.

Végeredményben tehát a (31.2) kevéscsoport diffúzióegyenletnek az ábrákon kiszemelt osztópontjára vonatkozó végesdifferencia-egyenlet a következő alakú:

²³ 1-nél nagyobb albédójú rudak esetében (3.2.31a) szerint $\gamma < 0$, ez a megállapítás tehát nem igaz. Látni fogjuk, hogy ez konvergenciaproblémákhoz vezethet, ezért kerülendő. Az ilyen rudak belsejében többnyire alkalmazható a diffúzióegyenlet, tehát szükség sincs a logaritmikus határfeltételre.
$$a_{g,ij} \Phi_{g,i-1,j} + b_{g,ij} \Phi_{g,i+1,j} + c_{g,ij} \Phi_{g,i,j-1} + d_{g,ij} \Phi_{g,i,j+1} - e_{g,ij} \Phi_{g,ij} + L_{g,ij} + \frac{S_{g,ij}}{k_{\text{eff}}} = 0.$$
(33.5)

Mostantól az *a*, *b*, *c*, *d* és *e* együtthatókat is ellátjuk indexekkel annak érdekében, hogy világosabban látsszon: értékük függ a csoport indexétől (vagyis *g*-től), továbbá a kiszemelt rácsponttól (*i*, *j*). Ha ezt az egyenletet minden osztópontra felírjuk, annyi lineáris egyenletet kapunk, ahány ismeretlen van. Ez tehát k_{eff} -re vonatkozóan algebrai sajátérték-egyenlet, amelyet – legalábbis elvileg – az ismert algebrai módszerek valamelyikével meg lehet oldani.

Az ismeretlenek nagy számára való tekintettel az iterációs eljárások a leginkább célravezetők. A numerikus nehézségeken túlmenően a közvetlen módszerek (például Gauss-elimináció) lassabbak, mint az iteráció, ha az osztópontok *n* száma elég nagy. A közvetlen eljárások ugyanis n^3 -bel arányos számú szorzást igényelnek, viszont egy iterációs lépésben végzett szorzások száma n^2 -tel arányos. Ha tehát az iteráció száma *n*-től gyengén függ, az iteráció gyorsabban szolgáltatja a megoldást. Mivel csak összeadásokat tartalmaz, nem jár jegyveszteségekkel. Az iterációt a gyakorlatban két szakaszra szokás bontani:

• Kezdetben ismertnek tételezzük fel az $S_{g,ij}$ hasadási forrást. Ezt a (33.5) egyenletben adottnak véve, megoldjuk az

$$a_{g,ij} \Phi_{g,i-1,j} + b_{g,ij} \Phi_{g,i+1,j} + c_{g,ij} \Phi_{g,i,j-1} + d_{g,ij} \Phi_{g,i,j+1} - e_{g,ij} \Phi_{g,ij} + L_{g,ij} + S_{g,ij} = 0.$$
(33.6)

egyenletet. Az ehhez szükséges iterációt nevezzük belső iterációnak.

A belső iteráció végeredményével újraszámoljuk k_{eff}-et és a hasadási forrást, amelyet (33.6)-ba helyettesítve egy újabb belső iterációt hajtunk végre. Ennek alapján tovább javítjuk a hasadási forrást, amíg el nem érjük a konvergenciát. A hasadási forrás újraszámítását külső iterációnak nevezzük.

Tekintve, hogy a külső iteráció minden lépésében k_{eff} -et is újraszámoljuk, végeredményben a teljes sajátérték-problémát megoldjuk.

3.3.2. Belső iteráció

A belső iteráció (33.6) alapján azt jelenti, hogy minden osztópontban újraszámoljuk a fluxust:

$$\Phi_{g,ij} = \frac{a_{g,ij} \Phi_{g,i-1,j} + b_{g,ij} \Phi_{g,i+1,j} + c_{g,ij} \Phi_{g,i,j-1} + d_{g,ij} \Phi_{g,i,j+1} + L_{g,ij} + S_{g,ij}}{e_{g,ij}}.$$

Ennek matematikai elemzéséhez bevezetjük a következő jelöléseket:

- Φ_g : a *g*-edik csoporthoz tartozó fluxusok vektora. A fluxusokat a belső osztópontok szerint rendezzük sorba: a bal felső saroktól kezdve balról jobbra haladunk, majd a vízszintes rácsvonalakat felülről lefelé vesszük sorba.
- S_g : a *g*-edik csoporthoz tartozó hasadási forrásokból képzett $S_{g,ij}/e_{g,ij}$ mennyiségek vektora. Az osztópontok sorrendje ugyanaz, mint a fluxusok esetében.
- L_g : a *g*-edik csoporthoz tartozó lassulási forrásokból képzett $L_{g,ij}/e_{g,ij}$ mennyiségek vektora. Az osztópontok sorrendje ugyanaz, mint a fluxusok esetében. A fluxusok vektoraival a következő kapcsolatban van:

(33.7)

$$\mathbf{L}_{g} = \sum_{g' \neq g} \mathbf{B}_{g' \to g} \mathbf{\Phi}_{g'}$$
(33.8)

ahol a $\mathbf{B}_{g' \to g}$ mátrix elemeit a (33.4) és a (32.2b), illetve (32.3b) képletek alapján számíthatjuk ki. A kevéscsoport elméletben általában energiában csak "lefelé" való szórás lehetséges, ami azt jelenti, hogy a **B** mátrixok eltűnnek, amikor $g' \ge g$.

 A_g : a (33.7)-ben szereplő $a_{g,ij}/e_{g,ij}$, ..., $d_{g,ij}/e_{g,ij}$ együtthatókból képzett mátrix. Szerkezetének részleteire még visszatérünk.

Ezekkel a jelölésekkel a (33.7) iterációs képlet vektori alakja a következő:

$$\mathbf{\Phi}_{g} = \mathbf{A}_{g} \mathbf{\Phi}_{g} + \sum_{g' \neq g} \mathbf{B}_{g' \to g} \mathbf{\Phi}_{g'} + \mathbf{S}_{g}.$$
(33.9)

A számítási séma könnyebb megértése érdekében ezt a vektoregyenletetekből álló rendszert célszerű az egyes csoportokra külön-külön felírni. Mivel csak "lefelé" való szórás van, a g = 1 csoportra vonatkozóan (33.9) így fest:

$$\mathbf{\Phi}_1 = \mathbf{A}_1 \mathbf{\Phi}_1 + \mathbf{S}_1.$$

Itt S_1 adott, tehát az egyenlet – az 1. csoportra alkalmazott belső iterációval – megoldható. Tegyük fel, hogy ez megtörtént. Ezután tekintjük a g = 2 csoportra vonatkozó egyenletet:

$$\mathbf{\Phi}_2 = \mathbf{A}_2 \mathbf{\Phi}_2 + \mathbf{B}_{1 \to 2} \mathbf{\Phi}_1 + \mathbf{S}_2$$

Mivel az 1. csoportra már kiszámítottuk a fluxust, ez az egyenlet – a 2. csoportra alkalmazott újabb belső iterációval – megoldható, hiszen a jobb oldal utolsó két tagja ismert. Ezt folytathatjuk a 3. csoportra, amelyre a következő egyenlet vonatkozik:

$$\mathbf{\Phi}_3 = \mathbf{A}_3 \mathbf{\Phi}_3 + \mathbf{B}_{1 \to 3} \mathbf{\Phi}_1 + \mathbf{B}_{2 \to 3} \mathbf{\Phi}_2 + \mathbf{S}_3$$

Ezt ismét megoldhatjuk, és így tovább a g = G csoportig.

Ezen a módon a belső iteráció konvergenciája az egyes A_g mátrixok tulajdonságaitól függ. A konvergencia elemzése emiatt szétcsatolható az egyes csoportokra. A vizsgálandó vektoregyenlet tehát (g = 1, 2, ..., G)

$$\boldsymbol{\Phi}_{g} = \mathbf{A}_{g}\boldsymbol{\Phi}_{g} + \mathbf{L}_{g} + \mathbf{S}_{g} = \mathbf{A}_{g}\boldsymbol{\Phi}_{g} + \mathbf{s}_{g}, \qquad (33.10)$$

ahol az \mathbf{s}_g vektor adott. Tételezzük fel, hogy már ℓ belső iterációs lépést tettünk. Ekkor az (ℓ +1)-edik iteráltat a

$$\Phi_{g,\ell+1} = \mathbf{A}_g \Phi_{g,\ell} + \mathbf{s}_g \tag{33.11}$$

képlet adja meg. (33.10)-et kivonjuk (33.11)-ből:

$$\boldsymbol{\Delta}_{g,\ell+1} = \boldsymbol{\Phi}_{g,\ell+1} - \boldsymbol{\Phi}_g = \mathbf{A}_g \left(\boldsymbol{\Phi}_{g,\ell} - \boldsymbol{\Phi}_g \right) = \mathbf{A}_g \boldsymbol{\Delta}_{g,\ell} = \mathbf{A}_g^2 \boldsymbol{\Delta}_{g,\ell-1} = \ldots = \mathbf{A}_g^\ell \boldsymbol{\Delta}_{g,1}.$$

Nyilvánvaló, hogy ez a hibavektor akkor tart 0-hoz (vagyis az iteráció akkor konvergál), ha az A_g mátrixnak minden sajátértéke 1-nél kisebb. Az alábbiakban ezt látjuk be.

Írjuk fel az A_g mátrix legnagyobb abszolút értékű sajátértékéhez tartozó sajátérték-egyenletet:

$$\mathbf{A}_{g}\mathbf{\phi} = \lambda \mathbf{\phi}$$
.

Ha a sajátvektor legnagyobb abszolút értékű komponensének indexe k, akkor az erre vonatkozó egyenlet alapján írhatjuk:

$$\lambda = \sum_{k'} A_{g,kk'} \frac{\varphi_{k'}}{\varphi_k}, \qquad \text{vagyis} \qquad \left|\lambda\right| \le \sum_{k'} A_{g,kk'} \left|\frac{\varphi_{k'}}{\varphi_k}\right| \le \sum_{k'} A_{g,kk'} \ .$$

Itt kihasználtuk, hogy A_g minden eleme nem-negatív. A (33.2b) egyenlőtlenségből következik, hogy a jobboldal határozottan kisebb 1-nél. Ezzel beláttuk, hogy

$$|\lambda| < 1$$

ami a mondottak szerint a belső iteráció konvergenciáját jelenti. Természetesen más kérdés, milyen gyors a konvergencia. Az iteráció gyorsítására számos módszert dolgoztak ki, amelyekről a 3.4. fejezetben lesz szó. A gyakorlatban nem nehéz biztosítani, hogy a konvergencia 10–15 lépésben bekövetkezzen. A helyzetet könnyíti a következő két körülmény:

- A külső iteráció kezdeti lépéseiben nem érdemes a belső iterációt különösen nagy pontosságig erőltetni.
- A külső iteráció utolsó lépéseiben viszont az előző külső iterációban kapott fluxus jó kezdőértéket jelent a belső iteráció számára.

Mindkét körülmény csökkenti a belső iterációk számát.

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy a fenti gondolatmenetben kihasználtuk az A_g mátrixoknak a (33.7) iterációs képletből adódó szerkezetét. Ha a 3.2.5. szakaszban vizsgált egyéb végesdifferencia-sémákat alkalmaznánk, a fenti levezetés érvényét vesztené. Megjegyezzük ugyanakkor, hogy az iteráció konvergenciájára vonatkozó állításunk érvényes a 3.2.3. szakaszban levezetett 3D sémákra is.

3.3.3. Külső iteráció

A külső iteráció konvergenciája külön vizsgálandó kérdés. Az alábbi elemzésben feltételezzük, hogy a külső iteráció mindegyik lépésében olyan pontosságig folytatjuk a belső iterációt, hogy annak hibája elhanyagolható. A külső iteráció konvergenciáját a hasadási forrás konvergenciája jelenti. Ennek vizsgálatához tovább egyszerűsítjük a jelöléseket. Legyen **F** a Φ_g vektorokból álló hipervektor:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Phi}_1 \\ \mathbf{\Phi}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{\Phi}_G \end{bmatrix}.$$

Hasonlóan képezzük az S vektort, amelynek a komponenseit ugyanabban a sorrendben alkotják a (33.3) egyenletben szereplő $S_{g,ij}$ hasadási források, mint a F vektor komponenseit a $\Phi_{g,ij}$ fluxusok. (33.3) alapján definiálhatunk egy *produkciós operátor*t (mátrixot), amely a fluxusvektorból előállítja a forrásvektort:

$$\mathbf{S} = \mathbf{PF}$$
.

A (33.5) sajátérték-egyenlet ennek segítségével a következő vektoros alakba írható:

$$\frac{1}{k_{\text{eff}}}\mathbf{PF} - \mathbf{DF} = 0, \qquad (33.12)$$

ahol **D** a (33.5) egyenlet többi tagját magába foglaló *destrukciós operátor*.

A konvergencia vizsgálatához bevezetünk egy egyszerű vektornormát, amely a vektor komponenseinek az összegét jelenti:²⁴

$$\left[\mathbf{x}\right] = \sum_{k} x_{k} \; .$$

(33.12)-ből következik, hogy a két norma hányadosa k_{eff} .

$$k_{\rm eff} = \frac{\left[\mathbf{PF}\right]}{\left[\mathbf{DF}\right]}.$$

Mielőtt a külső iteráció konvergenciáját vizsgálnánk, közbevetőleg érdemes megmutatni, hogy a végesdifferencia-közelítés ellenére ez a kifejezés megőrizte eredeti fizikai értelmét: a sokszorozási tényezőt megkapjuk, ha a hasadások által a reaktorban időegység alatt termelt neutronok számát elosztjuk az abszorpció és a kifolyás révén időegység alatt eltűnő neutronok számával.

Az osztópontok azonosítására továbbra is az (i, j) indexeket fogjuk használni, amelyek végigfutnak az összes belső osztópontokon. Ennek segítségével a **DF** vektor normája

$$[\mathbf{DF}] =$$

$$= -\sum_{g=1}^{G} \sum_{i,j} \left(a_{g,ij} \boldsymbol{\Phi}_{g,i-1,j} + b_{g,ij} \boldsymbol{\Phi}_{g,i+1,j} + c_{g,ij} \boldsymbol{\Phi}_{g,i,j-1} + d_{g,ij} \boldsymbol{\Phi}_{g,i,j+1} - e_{g,ij} \boldsymbol{\Phi}_{g,ij} + L_{g,ij} \right) \cong$$

$$\cong -\sum_{g=1}^{G} \oint D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) d\mathbf{f} + \sum_{g=1}^{G} \iint_{\operatorname{reaktor}} \boldsymbol{\Sigma}_g^a(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \qquad (33.13)$$

Ennek belátásához a 3.2. fejezet képleteiből indulunk ki. (33.4)-ből és (31.1c)-ből következik, hogy

$$\begin{split} &\sum_{g=1}^{G} \left(-e_{g,ij}\boldsymbol{\varPhi}_{g,ij} + L_{g,ij}\right) \cong \\ &\cong \sum_{g=1}^{G} \left[-\left(a_{g,ij} + b_{g,ij} + c_{g,ij} + d_{g,ij}\right)\boldsymbol{\varPhi}_{g,ij} - \iint_{(i,j)} \left(\boldsymbol{\varSigma}_{g}^{a} + \boldsymbol{\varSigma}_{g}^{R}\right)\boldsymbol{\varPhi}_{g} d\mathbf{r} + \iint_{(i,j)} \sum_{g' \neq g} \boldsymbol{\varSigma}_{g' \to g} \boldsymbol{\varPhi}_{g'} d\mathbf{r}\right] = \\ &= \sum_{g=1}^{G} \left[-\left(a_{g,ij} + b_{g,ij} + c_{g,ij} + d_{g,ij}\right)\boldsymbol{\varPhi}_{g,ij} - \iint_{(i,j)} \left(\boldsymbol{\varSigma}_{g}^{a} + \boldsymbol{\varSigma}_{g}^{R}\right)\boldsymbol{\varPhi}_{g} d\mathbf{r}\right] + \sum_{g'=1}^{G} \iint_{(i,j)} \boldsymbol{\varSigma}_{g'}^{R} \boldsymbol{\varPhi}_{g'} d\mathbf{r} = \\ &= \sum_{g=1}^{G} \left[-\left(a_{g,ij} + b_{g,ij} + c_{g,ij} + d_{g,ij}\right)\boldsymbol{\varPhi}_{g,ij} - \iint_{(i,j)} \boldsymbol{\varSigma}_{g}^{a} \boldsymbol{\varPhi}_{g} d\mathbf{r}\right]. \end{split}$$

Itt kihasználtuk, hogy

$$\sum_{g=1}^G \mathcal{L}_{g' \to g} = \mathcal{L}_{g'}^{\mathsf{R}},$$

²⁴ Ez valójában nem is vektornorma. Ezért alkalmazzuk rá a Gauss-féle összegzési jelet: [...].

ami miatt az integrálokból csak az abszorpciót megadó tagok maradnak meg. Ezzel a (33.1) egyenlet alapján kapjuk:

$$[\mathbf{DF}] \cong \sum_{g=1}^{G} \sum_{i,j} \left\{ -\oint_{(i,j)} D_g \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) d\mathbf{f} + \iint_{(i,j)} \boldsymbol{\Sigma}_g^a(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\}.$$

A térbeli integrálok összege (33.13) jobb oldalának második tagját adja. A felületi integrálok összegében a szomszédos osztópontok környezetének érintkező felületein egymást kölcsönösen kiejtik – kivéve a legkülső osztópontok környezetének a reaktor külső felülete felé eső felületeit. Az így fennmaradó integrálok összege a reaktor külső felületére vonatkozó felületi integrált adja ki, ahogy (33.13)-ban állítjuk. Szigorúan véve az integrál nem a tényleges külső felületre vonatkozik, hanem ahhoz képest fél rácsosztásnyival beljebb van. Mivel ez az abszorpció és a hasadás térbeli integráljára is érvényes, ezt a körülményt figyelmen kívül hagyhatjuk.

Amikor szabályozórudak is vannak, az (j, j)-re való összegzésből ki kell hagyni a rudak belső pontjait. A 3.2.4. szakasz végén írtak alapján be lehet látni, hogy legutóbbi képletünk ebben az esetben is igaz. A norma tehát a reaktor *egészében* abszorbeálódó és a reaktor külső felületén kifolyó neutronok együttes száma, $-D_g$ grad Φ_g ugyanis a \mathbf{J}_g áramvektor, amely a külső felületen kifelé irányul. Ezért a felületi integrál pozitív mennyiség. A **PF** vektor normájáról hasonlóan be lehet látni, hogy:

$$[\mathbf{PF}] = \sum_{g=1}^{G} \sum_{i,j} S_{g,ij} \cong \sum_{g=1}^{G} \iint_{\text{reaktor}} \nu \Sigma_{g}^{f}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \qquad (33.14)$$

ami a reaktorban a hasadások által termelt neutronok teljes száma. Ezzel fenti állításunkat igazoltuk.

Vizsgáljuk meg ezekkel a jelölésekkel a külső iteráció konvergenciáját. Az ℓ edik lépésben a forrás az ℓ -edik lépésben számolt fluxushoz tartozik. (33.6) szerint tehát az iteráció a következőt jelenti:

$$\mathbf{F}_{\ell+1} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}_{\ell} \,. \tag{33.15a}$$

Az iterációt akkor tekintjük konvergensnek, ha az \mathbf{F}_{ℓ} iteráltak a (valahogy normált) \mathbf{F} megoldással arányossá válnak, hiszen egy sajátfüggvény csak egy tetszőlegesen választható szorzótényező erejéig van meghatározva:

$$\mathbf{F}_{\ell} \cong \alpha \mathbf{F}$$
,

ahol α alkalmas arányossági tényező. Megmutatjuk, hogy a fenti iteráció még ebben az értelemben sem konvergens, ugyanis az α tényező értéke még akkor is függ ℓ -től, amikor az arányosság már kialakult. Helyettesítsük ugyanis a fenti arányosságot az iterációs képletbe:

$$\mathbf{F}_{\ell+1} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}_{\ell} \cong \alpha \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F} = \alpha k_{\text{eff}} \mathbf{F} \cong k_{\text{eff}} \mathbf{F}_{\ell},$$

vagyis az iteráltak – a konvergencia közelében – minden lépésben k_{eff} -vel szorzódnak. Ez azt jelenti, hogy szuperkritikus esetben az iteráció divergens, szubkritikus esetben pedig 0-hoz tartó fluxust eredményez. Ennek kivédésére a hasadási forrást minden lépésben normálni kell. Legegyszerűbb azt megkövetelni, hogy a norma 1 legyen:

$$\left[\mathbf{PF}_{\ell}\right] = 1. \tag{33.15b}$$

A gyakorlatban ez a következőt jelenti. Először (33.15a) szerint kiszámítjuk az

$$\mathbf{F}_{\ell+1}' = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}_{\ell}$$

vektort, majd ezt normáljuk:

$$\mathbf{F}_{\ell+1} = \frac{\mathbf{F}_{\ell+1}'}{\left[\mathbf{PF}_{\ell+1}'\right]}.$$

A fentiekben beláttuk, hogy a konvergencia közelében $\mathbf{F}'_{\ell+1} \cong k_{\text{eff}} \mathbf{F}_{\ell}$. Az ebből kapott hasadási forrás normája (33.15b) szerint

$$\left[\mathbf{P}\mathbf{F}_{\ell+1}'\right] \cong k_{\mathrm{eff}}\left[\mathbf{P}\mathbf{F}_{\ell}\right] = k_{\mathrm{eff}},$$

ami a külső iteráció minden lépésében felhasználható keff számítására.

Ezután bebizonyítjuk: *az így módosított iteráció konvergens*. A (33.12) sajátérték-probléma sajátértékei legyenek k_1 , k_2 , ..., a megfelelő sajátfüggvények pedig rendre φ_1 , φ_2 , ..., vagyis $\mathbf{P}\varphi_n = k_n \mathbf{D}\varphi_n$. Az n = 1 indexhez tartozik a keresett megoldás, tehát $k_1 = k_{\text{eff}}$, és φ_1 arányos **F**-fel. A k_n sajátértékek monoton csökkenő sorozatot alkotnak. A sajátfüggvényeket is (33.15b) szerint normáljuk: $[\mathbf{P}\varphi_n] = 1$. Az ℓ -edik iteráltat fejtsük ezek szerint haladó sorba:²⁵

$$\mathbf{F}_{\ell} = \sum_{n} w_{n\ell} \mathbf{\varphi}_{n}$$

A (33.15b) normálási feltétel és a sajátfüggvények normálása azt jelenti, hogy

$$\sum_{n} w_{n\ell} = 1$$

Helyettesítsük a sorfejtést a (33.15a) iterációs képletbe:

$$\mathbf{F}_{\ell+1}' = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{F}_{\ell} = \sum_{n} w_{n\ell} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{\varphi}_{n} = \sum_{n} w_{n\ell} k_{n} \mathbf{\varphi}_{n} = \sum_{n} w_{n,\ell+1}' \mathbf{\varphi}_{n},$$

amiből a sajátfüggvények ortogonalitása miatt

$$w_{n,\ell+1}' = w_{n\ell}k_n.$$

A vesszőt azért tettük ki, mert ezt még normálni kell ahhoz, hogy az $(\ell+1)$ -edik iteráltat megkapjuk:

$$w_{n,\ell+1} = \frac{w'_{n,\ell+1}}{\sum_{n'} w'_{n',\ell+1}} = \frac{w_{n\ell}k_n}{\sum_{n'} w_{n'\ell}k_{n'}}.$$

Teljes indukcióval egyszerűen beláthatjuk, hogy ezek az együtthatók a következőképpen is felírhatók:

$$w_{n,\ell+1} = \frac{w_{n1}k_n^{\ell}}{\sum_{n'} w_{n'1}k_{n'}^{\ell}} = \frac{w_{n1}(k_n/k_1)^{\ell}}{\sum_{n'} w_{n'1}(k_{n'}/k_1)^{\ell}}.$$
(33.16)

Ennek alapján már egyszerűen beláthatjuk, hogy

²⁵ Mivel az operátorok mátrixok, és a sajátfüggvények vektorok, ezt mindig meg lehet tenni.

$$\lim_{\ell \to \infty} w_{n,\ell+1} = \delta_{n1}$$

Valóban, (33.16) jobb oldalán $k_n/k_1 < 1$, ha n > 1, így az n = 1-nek megfelelő $w_{1\ell}$ együtthatót kivéve mindegyik 0-hoz tart. n = 1 esetén viszont a határérték 1. Ezzel megmutattuk, hogy a (33.15b) szerinti normálással a külső iteráció konvergens, és határértéke

$$\lim_{\ell\to\infty}\mathbf{F}_\ell=\boldsymbol{\varphi}_1.$$

3.4. A belső iteráció gyorsítása

A 3.3. alfejezetben tárgyalt belső iteráció konvergenciája az A_g mátrixok legnagyobb sajátértékétől függő sebességgel konvergál. A belső iteráció gyorsításának számos módszere ismert, köztük a legelterjedtebb a *szukcesszív túlrelaxálás*. Ezen túlmenően tárgyaljuk még a *közvetlen mátrixinverziót* és a *durvahálós kiegyenlítést*. Általánosan alkalmazható módszer még a *Csebisev-iteráció*, amelyet az 5. fejezetben ismertetünk a külső iteráció gyorsítására. A jelölések egyszerűsítése érdekében a következőkben elhagyjuk a g csoportindexet.

3.4.1. Gauss-Seidel iteráció

Mindenekelőtt tisztáznunk kell, hogy az iteráció valójában nem a (33.11) képlettel történik. Amikor ugyanis a számításban végigmegyünk a belső rácspontokon, az ℓ -edik iterációhoz tartozó fluxust azonnal kicseréljük az (ℓ +1)-edik iterációhoz tartozó értékre, mihelyt az utóbbit kiszámítottuk. Ha nem így tennénk, az iteráció programozásakor külön kellene tárolni a Φ_{ℓ} és $\Phi_{\ell+1}$ iteráltakat, ami felesleges bonyodalom, továbbá kétszeres helyet igényel az operatív memóriában. Amikor az első végesdifferencia-programok készültek (az 1960-as évek elején), a számítógépek túlságosan kicsik voltak a két iterált külön való tárolásához. Emiatt azóta – máig tartóan – a fluxusokat egyetlen tömbben tároljuk, jóllehet a korszerű gépek megengednék a Φ_{ℓ} és $\Phi_{\ell+1}$ iteráltak külön való tárolását is. Ha csak a legfrissebb iteráltakat tároljuk, *kénytelenek vagyunk* az új iteráltat azonnal a régi érték helyére beírni. Ezt az eljárást *Gauss-Seidel iteráció*nak nevezzük. Tárgyalásához az **A** mátrixot egy alsó és egy felső háromszögmátrix összegére bontjuk:

$$\mathbf{A} = -\mathbf{U} - \mathbf{V},\tag{34.1}$$

ahol –U tartalmazza az A mátrix főátlója alatti elemeket, –V pedig a főátló felettieket, a többi elem pedig zérus. Ezekkel a jelölésekkel a (33.11) képlet helyett a következő iterációs képletünk van:

$$\mathbf{\Phi}_{\ell+1} = -\mathbf{U}\mathbf{\Phi}_{\ell+1} - \mathbf{V}\mathbf{\Phi}_{\ell} + \mathbf{s},$$

vagyis

$$\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1} = -(\mathbf{E} + \mathbf{U})^{-1} \mathbf{V} \boldsymbol{\Phi}_{\ell} + (\mathbf{E} + \mathbf{U})^{-1} \mathbf{s}.$$

A konvergencia sebességét meghatározó iterációs mátrix ezzel a

$$\mathbf{T} = -\left(\mathbf{E} + \mathbf{U}\right)^{-1} \mathbf{V} \tag{34.2}$$

alakban írható.

Szimmetrikus pozitív definit A mátrix esetében be lehet bizonyítani,²⁶ hogy a Gauss-Seidel iteráció konvergens. A véges differenciák módszerében nem tételezhetjük fel, hogy a mátrix szimmetrikus, így az idézett tétel közvetlenül nem alkalmazható. A konvergenciát az alábbiakban általánosabb összefüggésben fogjuk vizsgálni és bebizonyítani.²⁷

3.4.2. Közvetlen mátrixinverzió egy dimenzióban

Mielőtt továbbmennénk a két- vagy háromdimenziós véges differenciák tárgyalásában, megmutatjuk, hogy egy dimenzióban nincs feltétlenül szükség iterációra, mert a végesdifferencia-egyenletek egyszerűen megoldhatók. Amikor egydimenziós rendszert vizsgálunk, a (33.6) egyenletben csak az (i-1, j) és (i+1, j) indexű tagok maradnak meg, hiszen az (i, j-1) és (i, j+1) indexűek a második dimenzió miatt jelentek meg. Ezért ekkor a *j* index el is maradhat:

$$a_i \Phi_{i-1} + b_i \Phi_{i+1} - e_i \Phi_i + L_i + S_i = 0, \qquad (34.3)$$

ahol az *i* index végigfut a belső rácspontokon: i = 2, 3, ..., m-1. Ha a rácspontokat balról jobbra haladva rendezzük sorba, akkor ez a következőképpen írható át vektoros alakba:

$$\mathbf{C}\boldsymbol{\Phi} = \mathbf{s}\,,\tag{34.4}$$

ahol Φ az ismeretlen Φ_i fluxusok vektora, **s** elemeit pedig az $L_i + S_i$ összegnek az egyes rácspontokhoz tartozó értékei adják, végül **C** az egyenlet együtthatóiból képzett kontinuáns mátrix:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} e_2 & -b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_3 & e_3 - b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -a_4 & e_4 & -b_4 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & -a_{m-1} & e_{m-1} \end{bmatrix}.$$
(34.5)

Alsó indexbe írtuk annak a rácspontnak az "*i*" sorszámát (i = 2, 3, ..., n-1), amelyhez az a_i , b_i és e_i együtthatók tartoznak. Az első és utolsó sorból hiányzik az "*a*", illetve "*b*" együttható, mert a határfeltételek miatt a megfelelő egyenletben sem szerepelnek – legalábbis vákuum-határfeltételek esetén. A zérus fluxusderivált határfeltétel figyelembevételének a módját úgy vezethetjük le, hogy a (34.3) egyenletet felírjuk i = 2-re és i = m-1-re:

$$a_2 \Phi_1 + b_2 \Phi_3 - e_2 \Phi_2 + L_2 + S_2 = 0 \tag{34.3a}$$

²⁶ Lásd például Rózsa Pál *Lineáris algebra és alkalmazásai* című könyvében (Műszaki Könyvkiadó, 1974).

²⁷ Fentebb beláttuk, hogy a belső iteráció konvergens, de ez nem a Gauss-Seidel iterációra vonatkozott, vagyis akkor még úgy tekintettük, hogy Φ_{ℓ} -t és $\Phi_{\ell+1}$ -et külön tároljuk. Az ember ösztönösen sejti, hogy a Gauss-Seidel iteráció konvergenciája ennél csak gyorsabb lehet, de a sejtést nem árt be is bizo-nyítani.

$$a_{m-1}\Phi_{m-2} + b_{m-1}\Phi_m - e_{m-1}\Phi_{m-1} + L_{m-1} + S_{m-1} = 0.$$
 (34.3b)

(32.24) alapján a (34.5) szerinti mátrix módosul:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} e_2' & -b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_3 & e_3 - b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -a_4 & e_4 & -b_4 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & -a_{m-1} & e_{m-1}' \end{bmatrix},$$
(34.5a)

ahol $e'_2 = e_2 - a_2$. Ha a rendszer jobb oldalán írunk elő zérus fluxusderivált határfeltételt, akkor $e'_{m-1} = e_{m-1} - b_{m-1}$. A periodikus határfeltétel figyelembevétele (32.27) szerint történik. Ekkor a C mátrixnak még szerkezete is megváltozik:

A szimmetrikus szektor-határfeltétel egyik esete a *32.15b. ábrán* látható, amikor a periodikusan ismétlődő 60°-os szektoron belül tükrözési szimmetria érvényesül. A megfelelő határfeltételt a (32.29) képletek adják. Ekkor az első és utolsó pontra felírt egyenletek (34.3a) és (34.3b) szerint a következők:

$$a_2\Phi_3 + b_2\Phi_3 - e_2\Phi_2 + L_2 + S_2 = 0,$$

illetve

$$a_{m-1}\Phi_{m-2} + b_{m-1}\Phi_{m-1} - e_{m-1}\Phi_{m-1} + L_{m-1} + S_{m-1} = 0.$$

Ekkor a C mátrix a következőképpen módosul:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} e_2 & -b'_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_3 & e_3 - b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -a_4 & e_4 & -b_4 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & -a_{m-1} & e'_{m-1} \end{bmatrix},$$
(34.5c)

ahol $b'_2 = b_2 + a_2$ és $e'_{m-1} = e_{m-1} - b_{m-1}$. A megfelelő határfeltételeknek a pálcakódok esetében való felírását az Olvasóra bízzuk.

A mátrixok felírása után rátérünk C invertálására. (34.5b) kivételével a C mátrixok felbonthatók két mátrix szorzatára:

Egyenletrendszert kapunk a C_1 és C_2 mátrixok elemeire, ha közvetlenül felírjuk a két mátrix szorzatának elemeit. Megoldása a következő egyszerű algoritmussal történhet:

$$\begin{array}{ll} \beta_k = -a_{k+1}, & \gamma_k = -b_k / \alpha_k , & (k = 2, 3, ..., m-2); \\ \alpha_2 = e_2, & \alpha_k = e_k - \beta_{k-1} \gamma_{k-1}, & (k = 3, 4, ..., m-1). \end{array}$$

Felhasználásukkal a fluxusokat a következő módon számíthatjuk ki. Először C_1 -et invertáljuk, vagyis megoldjuk a $C_1s' = s$ egyenletrendszert:

$$s'_{2} = \frac{s_{2}}{\alpha_{2}}, \qquad \qquad s'_{k} = \frac{s_{k} - \beta_{k-1} s'_{k-1}}{\alpha_{k}}, \qquad (k = 3, 4, ..., m-1)$$

Ezután C₂ invertálása, vagyis a C₂ $\Phi = s'$ egyenletrendszer megoldása adja a keresett fluxusértékeket:

$$\Phi_{m-1} = s'_{m-1}, \qquad \Phi_k = s'_k - \gamma_k \Phi_{k+1}, \qquad (k = m-2, m-3, ..., 2).$$

Ez az algoritmus közvetlenül nem használható a (34.5b) szerinti mátrix invertálására. Felírható azonban egy 2×2-es hipermátrix alakjában:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_2 & \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{a} & \boldsymbol{\Gamma} \end{bmatrix},$$

ahol

A Γ mátrix már (34.5) szerinti alakú, tehát a fenti algoritmussal invertálható. (Rendje természetesen 1-gyel kisebb.) Az ismeretlen Φ vektort és **s**-et is felbontjuk ezen a módon:

$$\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_2 \\ \boldsymbol{\Phi}_3 \\ . \\ . \\ . \\ \boldsymbol{\Phi}_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_2 \\ \boldsymbol{\Phi}' \end{bmatrix} \qquad \mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_2 \\ s_3 \\ . \\ . \\ s_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_2 \\ \mathbf{s}' \end{bmatrix}.$$

Ezekkel a jelölésekkel a (34.4) egyenletrendszer így írható:

$$e_2 \boldsymbol{\Phi}_2 + \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Phi}' = s_2,$$

$$\mathbf{a} \boldsymbol{\Phi}_2 + \mathbf{\Gamma} \mathbf{\Phi}' = \mathbf{s}'.$$

A megoldás triviális:

$$\Phi' = \Gamma^{-1} \mathbf{s}' - \Gamma^{-1} \mathbf{a} \, \boldsymbol{\Phi}_2,$$
$$\Phi_2 = \frac{s_2 - \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \Gamma^{-1} \mathbf{s}'}{e_2 - \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \Gamma^{-1} \mathbf{a}}.$$

3.4.3. Sorról sorra való iteráció két dimenzióban

A közvetlen mátrixinverzióra talált fenti algoritmusnak kettős jelentősége van. Egyrészt önmagában is jelentős dolog, hogy az egydimenziós végesdifferencia-egyenletek megoldásában nincs szükség iterációra. Másrészt felhasználható a két- vagy háromdimenziós sémákra vonatkozó iteráció gyorsítására. Vegyük az 5-pont egyenleteket (például az X–Y geometriát, 32.1. *ábra*). Ha a (33.6) egyenletet felírjuk valamelyik, az x tengellyel párhuzamos rácsvonal mindegyik rácspontjára, akkor az ezekhez tartozó fluxusokat közvetlen inverzióval kiszámíthatjuk a felső és alsó rácsvonalhoz tartozó fluxusok függvényében. Ezzel nem rácspontról rácspontra, hanem rácsvonalról rácsvonalra halad az iteráció, ami gyorsabb konvergenciát biztosít (lásd alább).

A (33.6) alatti egyenlet vektoros alakja formálisan most is a (34.4) képlet, ahol az előbbi C helyett két dimenzióban a következő hipermátrix áll:

Ebben a struktúrában a fluxusok soronként vannak sorba rendezve. A C_j mátrixok a *j*-edik sorra (34.5) szerint vonatkozó mátrixok. Az U' mátrixok a -c, az V' mátrixok pedig a -d együtthatókat tartalmazzák a főátlóban (vö. (33.1) egyenlet), a többi elem zérus. Írjuk fel a rácsosztás *j*-edik sorára az ennek megfelelő végesdifferencia-egyenleteket:

$$\mathbf{U}_{j-1}^{\prime}\boldsymbol{\Phi}_{j-1} + \mathbf{C}_{j}\boldsymbol{\Phi}_{j} + \mathbf{V}_{j}^{\prime}\boldsymbol{\Phi}_{j+1} = \mathbf{s}_{j},$$

ahol Φ_j és \mathbf{s}_j a *j*-edik sor pontjaihoz tartozó fluxusokból, illetve forrásokból képzett vektor. Az előzőkben megbeszéltük, hogy ezt az egyenletet közvetlen inverzióval megoldhatjuk a *j*-edik sorhoz tartozó fluxusokra, vagyis ez az egyenlet a következő alakra hozható:

$$\mathbf{U}_{j-1}\boldsymbol{\Phi}_{j-1} + \boldsymbol{\Phi}_j + \mathbf{V}_j\boldsymbol{\Phi}_{j+1} = \mathbf{C}_j^{-1}\mathbf{s}_j,$$

ahol

$$\mathbf{U}_{j-1} = \mathbf{C}_j^{-1} \mathbf{U}_{j-1}' \qquad \text{és} \qquad \mathbf{V}_j = \mathbf{C}_j^{-1} \mathbf{V}_j'.$$

Ilyen módon a C' mátrix átmegy a következő alakba:

ahol mindegyik E_i egységmátrix. A sorról sorra való iteráció képlete tehát

$$\mathbf{\Phi}_{j} = -\mathbf{U}_{j-1}\mathbf{\Phi}_{j-1} - \mathbf{V}_{j}\mathbf{\Phi}_{j+1} + \mathbf{C}_{j}^{-1}\mathbf{s}_{j},$$

ahol *j* végigfut az összes belső rácsvonalon: j = 2, 3, ..., n-1. Megjegyezzük még, hogy ha nem alkalmazzuk a sorokra vonatkozó inverziót, hanem minden rácspontra külön iterálunk, akkor az \mathbf{E}_j mátrixok helyett más szerkezetű mátrixok állnak. Ennek részleteire még visszatérünk.

A sorról sorra való iterációs képlet alkalmazásakor a határfeltételeket ugyanúgy kell figyelembe venni, ahogy fentebb tettük, de most az osztópontok helyett rácsvonalakra vonatkozóan. Érdemes ezeket az egyes határfeltétel-típusokra specializálni:

<u>vákuum határfeltétel</u>: $\Phi_1 = 0$ és/vagy $\Phi_n = 0$;

<u>zérus fluxusderivált határfeltétel</u>: $\Phi_1 = \Phi_2$ és/vagy $\Phi_n = \Phi_{n-1}$; <u>szektor-, illetve eltolásos határfeltétel</u>: $\Phi_1 = \Phi_{n-1}$ és $\Phi_n = \Phi_2$; <u>szimmetrikus szektor-határfeltétel</u>: $\Phi_1 = \Phi_3$ és $\Phi_n = \Phi_{n-1}$.

Ezeket a feltételeket a gyakorlatban úgy vesszük figyelembe, hogy amikor valamelyik sorvektorra egy új iteráltat kapunk, vele felülírjuk a megfelelő határpontokhoz tartozó fluxusvektorokat.

Könnyű belátni, hogy a C' mátrixnak a (34.6) képlet szerinti szerkezete hatszöges geometriákra is érvényes. Egyetlen különbség, hogy az U' és V' mátrixok most nem diagonálisak, hanem a főátlójuk mellett van még egy zérustól különböző átlójuk is: U' esetében a főátló alatt, V' esetében pedig a főátló felett. Hatszöges geometria esetében a (34.6) és (34.7) szerinti hipermátrixok főátlójában szereplő C_j, illetve E_j blokkok rendje változó (vö. például *32.17a. ábra*), aminek megfelelően az U_j és V_j blokkok nem négyzetes mátrixok. Az egyetlen kivétel a 120°-os szektorszimmetria esete, mert ekkor a C_j és E_j blokkok rendje azonos, aminek megfelelően az U_j és V_j blokkok négyzetesek. Mielőtt az előbbi iterációt átírnánk Gauss-Seidel iterációra, és megvizsgálnánk a konvergencia gyorsításának lehetőségeit, megmutatjuk, hogy a sorról sorra való iteráció önmagában már gyorsítást jelent a pontról pontra való iterációhoz képest. Csak az 5-pont egyenletekkel foglalkozunk, de az elmondottak átvihetők hatszöges és háromszöges geometriákra is.

A (34.1) alatti U és V mátrixok most az U_j, illetve V_j mátrixokból állnak a (34.7) szerinti elrendezésben. Mindenek előtt be kell látnunk, hogy a segítségükkel végzett iteráció konvergens, vagyis az (U + V) mátrix minden sajátértékének abszolút értéke 1-nél kisebb. A z sajátvektorokat ugyanúgy z_j blokkokra bontjuk, mint a C mátrixot (34.7)-ben. A *j*-edik blokkra vonatkozó sajátérték-egyenlet

$$\mathbf{U}_{j-1}\mathbf{z}_{j-1} + \mathbf{V}_{j}\mathbf{z}_{j+1} = \mu \mathbf{z}_{j},$$

illetve

$$\mathbf{C}_{j}^{-1}\mathbf{U}_{j-1}'\mathbf{z}_{j-1} + \mathbf{C}_{j}^{-1}\mathbf{V}_{j}'\mathbf{z}_{j+1} = \mu \mathbf{z}_{j}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1).$$

Ezt balról beszorozzuk C_i-vel:

$$\mathbf{U}'_{j-1}\mathbf{z}_{j-1} + \mathbf{V}'_{j}\mathbf{z}_{j+1} = \mu \mathbf{C}_{j}\mathbf{z}_{j}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1)$$

(34.5) szerint a C_j mátrixok főátlójában az *e* együtthatók állnak [vö. (33.1) egyenlet]. Ha mindegyik egyenletet a megfelelő *e* együtthatóval elosztjuk, a C_j mátrixok helyén adódó mátrix főátlójának minden eleme 1-gyel lesz egyenlő, a főátló melletti elemek pedig -a/e-vel, illetve -b/e-vel. Az így kapott mátrixot ($E_j + C''_j$) alakban írjuk fel. A másik két mátrixból keletkező mátrixok legyenek rendre U''_j és V''_j , amelyek főátlójában álló elemek -c/e, illetve -d/e. Ezzel a sajátérték-egyenlet a következő alakba megy át:

$$\mathbf{U}''_{j-1}\mathbf{z}_{j-1} - \mu \,\mathbf{C}''_{j}\mathbf{z}_{j} + \mathbf{V}''_{j}\mathbf{z}_{j+1} = \mu \,\mathbf{z}_{j}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1).$$
(34.8a)

Ha nem alkalmazzuk a soronkénti mátrixinverziót, hanem rácspontonként haladva iterálunk, akkor a megfelelő sajátérték-egyenlet a következő:

$$\mathbf{U}''_{j-1}\mathbf{z}_{j-1} + \mathbf{C}''_{j}\mathbf{z}_{j} + \mathbf{V}''_{j}\mathbf{z}_{j+1} = \lambda \mathbf{z}_{j}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1).$$
(34.8b)

Az eltérés a második tag előjele, továbbá μ megjelenése a bal oldalon. A 3.3. alfejezetben beláttuk: (34.8b) minden sajátértékére fennáll, hogy $|\lambda| < 1$, ami azon alapul, hogy minden sorban a mátrixelemek abszolút értékének összege 1-nél kisebb. Ezt a gondolatmenetet általánosíthatjuk a (34.8a) sajátérték-egyenletre is. Megkeressük a \mathbf{z}_j vektorok legnagyobb abszolút értékű elemét. Legyen ez a $z_{j,i}$ elem²⁸. Felírjuk a (34.8a) egyenletrendszernek ehhez tartozó egyenletét, majd elosztjuk ezzel az elemmel:

$$-\frac{c_{j,i}}{e_{j,i}}\frac{z_{j-1,i}}{z_{j,i}}-\mu\left(-\frac{a_{j,i}}{e_{j,i}}\frac{z_{j,i-1}}{z_{j,i}}-\frac{b_{j,i}}{e_{j,i}}\frac{z_{j,i+1}}{z_{j,i}}\right)-\frac{d_{j,i}}{e_{j,i}}\frac{z_{j+1,i}}{z_{j,i}}=\mu$$

Vesszük mindkét oldal abszolút értékét:

²⁸ A *j*-edik blokk *i*-edik eleme.

$$\frac{c_{j,i}}{e_{j,i}} + |\mu| \left(\frac{a_{j,i}}{e_{j,i}} + \frac{b_{j,i}}{e_{j,i}} \right) + \frac{d_{j,i}}{e_{j,i}} > |\mu|$$

ahol már azt is figyelembe vettük, hogy $z_{j,i}$ abszolút értéke a legnagyobb. Ha bevezetjük a

$$q_i = \frac{a_{j,i}}{e_{j,i}} + \frac{b_{j,i}}{e_{j,i}} > 0$$
 és $p_i = \frac{c_{j,i}}{e_{j,i}} + \frac{d_{j,i}}{e_{j,i}} > 0$

jelöléseket, akkor azt kapjuk, hogy

$$\left|\mu\right| < \frac{p_i}{1 - q_i} < p_i + q_i < 1$$

tehát minden sajátértékre érvényes a $|\mu| < 1$ egyenlőtlenség. Ezzel megmutattuk, hogy a soronkénti mátrixinverzióval végzett iteráció is konvergens, mivel a pontonkénti iteráció is az, hiszen $p_i + q_i < 1$. Az is látszik, hogy μ -re kisebb felső korlátot kaptunk, mint λ -ra. Ebből azonban még nem következik, hogy a μ sajátértékek szükségképpen kisebbek is.

Nyilván azért alkalmazzuk a soronkénti mátrixinverziót, mert ettől a konvergencia gyorsulását várjuk. Konkrét számításokban valóban tapasztaljuk, hogy kevesebb iterációs lépésre van szükség, mint a pontonkénti iteráció esetében. Ennek az a magyarázata, hogy a μ sajátértékek valóban kisebbek, mint a λ sajátértékek. A kérdést nem vizsgáljuk általában, megelégszünk egy jellegzetes példa elemzésével. Legyenek a C''_i mátrixok azonosak és a következő alakúak:

$$\mathbf{C}''_{j} = -\frac{q}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} = -\frac{q}{2} \mathbf{K}_{mm},$$

továbbá U_j'' és V_j'' azonos diagonális mátrixok, és a főátlóban ugyanaz a -p/2 szám áll. (p és q értelemszerűen pozitív számok.) Az indexelés egyszerűsítése érdekében a korábbi (m-1) és (n-1) helyett m-et, illetve n-et írunk. Mivel a sorösszegeknek 1-nél kisebbeknek kell lenniük, teljesülnie kell a 0 egyenlőtlenségnek.²⁹ Ebbenaz esetben a sajátérték-probléma elemi eszközökkel megoldható. Közvetlen behelyettesítéssel meggyőződhetünk arról, hogy a**K**mátrix sajátértékei és sajátvektorai a következők:

$$v_k = 2\cos\alpha_k$$
 $[\mathbf{u}_k]_i = \cos(i\alpha_k), \quad k = 1, 2, ..., m; \quad i = 1, 2, ..., m,$

ahol

²⁹ Egy ilyen szerkezetű mátrix felel meg egy homogén reaktornak, amelyben mindkét koordinátatengely mentén egyenletes rácsosztást alkalmazunk.

$$\alpha_k = \frac{k\pi}{m+1} \, .$$

A megfelelő z sajátvektort n darab m elemű blokkra bontott hipervektor alakjában írjuk fel. A j-edik blokkot

$$\mathbf{z}_{j} = x_{j} \mathbf{u}_{k}, \qquad j = 1, 2, ..., n$$

alakban keressük. Ha ezt a (34.8a) egyenletbe helyettesítjük,

$$-\frac{p}{2}x_{j-1} + \mu \frac{q}{2}v_k x_j - \frac{p}{2}x_{j+1} = \mu x_j, \qquad (j = 1, 2, ..., n)$$

adódik. Átrendezés után ez átmegy a következő sajátérték-egyenletbe:

$$-\frac{p}{2}\mathbf{K}_{nn}\mathbf{x} = \mu \left(1 - \frac{q}{2}v_k\right)\mathbf{x},$$

ahol $\mathbf{K}_{nn} n \times n$ méretű kontinuáns mátrix (lásd fent). Sajátértékeit és sajátvektorait a fentiek mintájára írhatjuk fel. Végeredményben az (U + V) mátrixra a következő sajátértékeket kapjuk:

$$\mu_{kl} = -\frac{p \cos \beta_l}{1 - q \cos \alpha_k}, \qquad l = 1, 2, ..., n; \qquad k = 1, 2, ..., m;$$

a megfelelő sajátvektor pedig

$$[\mathbf{z}_{kl}]_{ji} = \cos(j\beta_l)\cos(i\alpha_k), \qquad j = 1, 2, ..., n \qquad i = 1, 2, ..., m.$$

A sajátvektor normálása a továbbiak szempontjából érdektelen. Ha ugyanezt a számítást a (34.8b) egyenletre vonatkozóan elvégezzük, azt kapjuk, hogy a sajátvektorok ugyanazok, de a sajátértékek eltérnek:

$$\lambda_{kl} = -p \cos \beta_l - q \cos \alpha_k, \qquad l = 1, 2, ..., n; \qquad k = 1, 2, ..., m.$$

Könnyű belátni, hogy – adott p és q mellett – a legnagyobb abszolút értékű sajátérték μ_{11} , illetve λ_{11} , amelyekhez tartozó sajátvektor mindegyik eleme pozitív. Nyilvánvaló, hogy ezek negatívja μ_{n1} , illetve λ_{mn} . Az utóbbihoz tartozó sajátvektor elemeinek az előjele elemről elemre változik. A μ_{n1} -hez tartozó sajátvektorban a blokkokon belül nem változik az előjel, de blokkról blokkra haladva változik. A váltakozó előjelű sajátvektoroknak a hibavektorhoz adott járuléka csak az iteráció kezdetén lehet jelentős, de az is csak akkor, ha a kezdő fluxusban nagy szakadások voltak. Emiatt néhány iteráció után a hibavektorban a mindenütt pozitív sajátvektor fokozatosan uralkodóvá válik. Az iteráció gyorsulását tehát az szabja meg, mennyivel kisebb μ_{11} abszolút értéke, mint λ_{11} -é.



34.1. ábra. A pontonkénti és a soronkénti iteráció sajátértékeinek összehasonlítása

Nyilvánvaló, hogy $|\mu_{11}| < |\lambda_{11}|$, hiszen

$$\frac{p\cos\beta_1}{1-q\cos\alpha_1} < p\cos\beta_1 + q\cos\alpha_1,$$

ameddig p + q = r < 1. A két sajátérték különbsége attól függ, hogyan viszonyul egymáshoz p és q. Amikor (szélső esetben) q = 0, akkor a két sajátérték egymással megegyezik, és értékük $r\cos\beta_1$. Ha r nem változik, a különbség annál nagyobb, minél nagyobb q. Ezt illusztrálja a 34.1. *ábra*, amely r = 0.95 mellett mutatja μ_{11} és λ_{11} változását q függvényében. Látható, hogy q = r/2 mellett $\mu_{11} = 0.8881$, de $\lambda_{11} = 0.9435$. Ezt követően a csökkenés felgyorsul, vagyis az iteráció annál jobban gyorsul, minél nagyobbak az együtthatók a végesdifferencia-séma soraiban, mint az oszlopaiban. Ez az oka annak, hogy a soronkénti iteráció kevésbé eredményes hatszöges geometriában, mint például az X–Y vagy R–Z geometriákban. Hatszöges geometriában ugyanis $q \approx r/3$. Ennek ellenére mindig kifizetődő a soronkénti iteráció.

3.4.5. Iteráció síkról síkra három dimenzióban

Az elmondottaknak van kihatása a 3D geometriákra is. Vegyük példának az X–Y–Z geometriát. Amikor valamelyik X–Y síkban alkalmazzuk a soronkénti iterációt, akkor addig nem célszerű a következő síkra áttérni, amíg az iteráció az adott síkban be nem konvergál. Az iterációnak ez a szervezése úgy is felfogható, hogy a végesdifferencia-egyenleteknek az egyes síkokhoz tartozó blokkjait közvetlenül invertáljuk, más szóval: síkról síkra iterálunk. A fenti, a sorokra vonatkozó gondolatmenetet szinte szóról szóra megismételhetjük a síkokra vonatkozóan is. Végeredményben beláthatjuk, hogy a síkról síkra való iteráció tovább gyorsítja a konvergenciát. A gyorsítás még nagyobb mértékű, hiszen a síkban levő négy együttható a 3D-ben szereplő hat együtthatónak közel a kétharmadát teszi ki, vagyis $q \approx 2r/3$.

A dolognak további tanulságai is vannak:

• Ha az *a+b*, illetve *c+d* együttható-összegek között általában nagy különbség van, akkor a koordinátatengelyeket úgy célszerű megválasztani, hogy a nagyobb összegek a sorokhoz tartozzanak, mert ez gyorsítja az iterációt.

• A következő szakaszban tárgyalt túlrelaxálásban a sorokra és a síkokra különböző optimális túlrelaxálási tényezőt célszerű keresni, mivel a sajátértékek mások a soronkénti iterációban, mint a síkonkénti iterációban.

3.4.6. Szukcesszív túlrelaxálás

Az iteráció gyorsításának leggyakoribb módszere a szukcesszív túlrelaxálás. Mielőtt alkalmaznánk a soronkénti iterációra, először általánosságban definiáljuk a módszert. Egyelőre Φ legyen az ismeretlen fluxusok vektora. Ismét felírjuk a Gauss-Seidel iterációs képletet:

$$\mathbf{\Phi}_{\ell+1} = -\mathbf{U}\mathbf{\Phi}_{\ell+1} - \mathbf{V}\mathbf{\Phi}_{\ell} + \mathbf{s}.$$

Mint korábban is, ℓ az iterációs lépések indexe. A szukcesszív túlrelaxálás módszere abban áll, hogy az ezáltal adott javulást egy ω tényezővel megszorozzuk, és az ℓ -edik iterálthoz hozzáadjuk:

$$\Phi_{\ell+1} = \Phi_{\ell} + \omega [(-U\Phi_{\ell+1} - V\Phi_{\ell} + s) - \Phi_{\ell}] = \Phi_{\ell} + \omega (-U\Phi_{\ell+1} - (E+V)\Phi_{\ell} + s),$$

amiből

$$\mathbf{\Phi}_{\ell+1} = -(\mathbf{E} + \omega \mathbf{U})^{-1} [(\omega \mathbf{V} + (\omega - 1)\mathbf{E})\mathbf{\Phi}_{\ell} - \omega \mathbf{s}].$$

Az ennek megfelelő iterációs mátrix

$$\mathbf{T}(\boldsymbol{\omega}) = -(\mathbf{E} + \boldsymbol{\omega}\mathbf{U})^{-1}(\boldsymbol{\omega}\mathbf{V} + (\boldsymbol{\omega} - 1)\mathbf{E}).$$
(34.9)

 ω értékétől függően az alábbi elnevezéseket használjuk:

- ω=1 esetében szukcesszív relaxációról beszélünk; ez tehát nem más, mint a Gauss-Seidel iteráció;
- ω> 1 esetében az iteráció szukcesszív túlrelaxálás, amelynek két alesete van: amikor sorról sorra iterálunk, szukcesszív sor-túlrelaxálásról beszélünk, pontról pontra való iteráció esetében viszont a módszer neve egyszerűen csak szukcesszív túlrelaxálás;
- $\omega < 1$ esetében az iteráció *szukcesszív alulrelaxálás*.

Ebből következik, hogy a Gauss-Seidel iteráció konvergenciájának bizonyításához elég megmutatni, hogy $T(\omega)$ minden sajátértékének abszolút értéke 1-nél kisebb, amikor $\omega = 1$.

Az előző szakaszban beláttuk, hogy az (U+V) mátrix minden sajátértékének abszolút értéke kisebb, mint 1. Jelöljük μ -vel a legnagyobb abszolút értékű sajátértéket. Egyelőre érdektelen, hogy ez egyszeres-e vagy sem. Megkeressük a T(ω) mátrix ezzel összefüggő legnagyobb abszolút értékű sajátértékét.

Először belátjuk, hogy ha μ sajátérték, akkor $-\mu$ is az. A μ -re vonatkozó

$$(\mathbf{U} + \mathbf{V})\mathbf{z} = \mu \mathbf{z}$$

sajátérték-egyenletet a (34.7) mátrix szerinti blokkonként írjuk fel:

$$V_{1}z_{2} = \mu z_{1},$$

$$U_{j-1}z_{j-1} + V_{j}z_{j+1} = \mu z_{j},$$

$$U_{n-1}z_{n-1} = \mu z_{n},$$

(j = 2, 3, ..., n-1)

ahol z_i olyan méretű vektor, mint amilyen rendű mátrix E_i . Legyen

$$\mathbf{z}_{j} = -(-1)^{j} \mathbf{y}_{j},$$
 (j = 1, 2, ..., n)

amivel a fenti egyenletrendszer a következő alakba megy át:

$$-\mathbf{V}_{1}\mathbf{y}_{2} = \mu \,\mathbf{y}_{1},$$

$$(-1)^{j} \,\mathbf{U}_{j-1}\mathbf{y}_{j-1} + (-1)^{j} \,\mathbf{V}_{j}\mathbf{y}_{j+1} = -\mu(-1)^{j} \,\mathbf{y}_{j}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1)$$

$$(-1)^{n} \,\mathbf{U}_{n-1}\mathbf{y}_{n-1} = -\mu(-1)^{n} \,\mathbf{y}_{n}.$$

A *j*-edik egyenletet $(-1)^j$ -vel beszorozva látható, hogy $-\mu$ is sajátérték, és a megfelelő sajátvektor az **y**_j vektorokból álló hipervektor.

Ezután felírjuk az iterációs mátrix sajátérték-egyenletét:

$$\mathbf{T}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{w} = \lambda \mathbf{w} ,$$

amit (34.9) alapján a

$$-(\mathbf{E} + \omega \mathbf{U})(\mathbf{T}(\omega) - \lambda \mathbf{E})\mathbf{w} = (\omega \mathbf{V} + \lambda \omega \mathbf{U} + (\lambda + \omega - 1)\mathbf{E})\mathbf{w} = \mathbf{0}$$

alakra hozhatunk. Ha (**z**-hez hasonlóan) a **w** vektort is blokkokra bontjuk a (34.7) szerinti mátrix blokkjai szerint, ez a sajátérték-egyenlet a következő alakra hozható:

$$(\lambda + \omega - 1)\mathbf{w}_1 + \omega \mathbf{V}_1 \mathbf{w}_2 = \mathbf{0},$$

$$\lambda \omega \mathbf{U}_{j-1} \mathbf{w}_{j-1} + (\lambda + \omega - 1)\mathbf{w}_j + \omega \mathbf{V}_j \mathbf{w}_{j+1} = \mathbf{0},$$

$$\lambda \omega \mathbf{U}_{n-1} \mathbf{w}_{n-1} + (\lambda + \omega - 1)\mathbf{w}_n = \mathbf{0}.$$
 $(j = 2, 3, ..., n-1)$

A *j*-edik egyenletet elosztjuk $\omega \lambda^{(j-1)/2}$ -vel:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega} \mathbf{w}_1 + \mathbf{V}_1 \mathbf{w}_2 &= \mathbf{0}, \\ \lambda^{-(j-3)/2} \mathbf{U}_{j-1} \mathbf{w}_{j-1} + \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \lambda^{(j-1)/2}} \mathbf{w}_j + \lambda^{-(j-1)/2} \mathbf{V}_j \mathbf{w}_{j+1} &= \mathbf{0}, \\ \lambda^{-(n-3)/2} \mathbf{U}_{n-1} \mathbf{w}_{n-1} + \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \lambda^{(n-1)/2}} \mathbf{w}_n &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Ha bevezetjük a

$$\mathbf{w}_{j} = \lambda^{(j-2)/2} \mathbf{x}_{j},$$
 (j = 1, 2, ..., n)

jelölést, akkor ez az egyenletrendszer a

$$\frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \sqrt{\lambda}} \mathbf{x}_1 + \mathbf{V}_1 \mathbf{x}_2 = \mathbf{0},$$

$$\mathbf{U}_{j-1} \mathbf{x}_{j-1} + \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \sqrt{\lambda}} \mathbf{x}_j + \mathbf{V}_j \mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{0}, \qquad (j = 2, 3, ..., n-1)$$

$$\mathbf{U}_{n-1} \mathbf{x}_{n-1} + \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \sqrt{\lambda}} \mathbf{x}_n = \mathbf{0}$$

alakba megy át, amely nem más, mint az (U+V) mátrix sajátérték-egyenlete. Ebből pedig az következik, hogy

$$\pm \mu = \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega \sqrt{\lambda}}$$

Négyzetre emelés és átrendezés után λ -ra a

$$\lambda^{2} + \lambda \left(2(\omega - 1) - \omega^{2} \mu^{2} \right) + (\omega - 1)^{2} = 0$$
(34.10)

másodfokú egyenlet adódik.





Először nézzük az $\omega = 1$ esetet. (34.10) szerint ekkor a két gyök $\lambda = 0$ és $\lambda = \mu^2$. Mivel μ abszolút értéke 1-nél határozottan kisebb, az is fennáll, hogy $|\lambda| < 1$. Ezzel igazoltuk a Gauss-Seidel iteráció konvergenciáját. Mivel $|\mu|^2 < |\mu|$, az is látszik, hogy a Gauss-Seidel séma túlrelaxálás nélkül is gyorsítja az iterációt. Amikor $\omega > 1$, szét kell választani a valós és komplex λ sajátértékek esetét. A gyökök és együtthatók közötti összefüggés szerint a (34.10) egyenlet két gyökére fennáll, hogy

$$\lambda_+ \cdot \lambda_- = (\omega - 1)^2$$
.

Amikor a diszkrimináns pozitív, a konvergencia sebességét meghatározó sajátérték a nagyobbik abszolút értékű. Mivel $|\lambda_+| \ge |\lambda_-|$, ez λ_+ , ahol

$$\lambda_{+} = \frac{-2(\omega - 1) + \omega^{2} \mu^{2} + \omega \mu \sqrt{\omega^{2} \mu^{2} - 4(\omega - 1)}}{2}.$$
 (34.11a)

Amikor a diszkrimináns negatív, a két gyök azonos abszolút értékű komplex szám, amelyekre fennáll, hogy

$$\left|\lambda_{\pm}\right| = \omega - 1. \tag{34.11b}$$

Innen látszik, hogy $\omega > 2$ esetén $|\lambda_{\pm}| > 1$, tehát az iteráció divergens. Ezért kell ω értékét az (1, 2) nyílt intervallumra korlátozni. A *34.2. ábrán* μ néhány értéke mellett látható λ_{+} abszolút értéke ω függvényében. Ebből látható, hogy $\omega = 1$ -től kezdve a sajátérték a (34.11a) képlet szerint csökken: kezdetben lassan, majd egyre meredekebben. Egy bizonyos ω értéknél minimumot vesz fel, majd a (34.11b) képlet szerint lineárisan növekszik. A minimumhoz tartozó érték ω optimumának tekinthető, amely akkor lép fel, amikor a diszkrimináns eltűnik:

$$\omega^2\mu^2-4(\omega-1)=0,$$

amiből

$$\omega_{\rm opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}.$$
(34.12)

Ez tehát az az érték, amellyel a szukcesszív túlrelaxálás a leggyorsabban konvergál. Meghatározásához ismerni kell az (U+V) mátrix legnagyobb abszolút értékű μ sajátértékét. Több módszer képzelhető el, amelyek közül egyet ismertetünk. Választunk egy ω_0 értéket, amelyről feltehetjük, hogy kisebb, mint az optimális érték. Elvégzünk néhány iterációt. Könnyű belátni, hogy az egymást követő hibavektorok hosszának hányadosa $|\lambda_+|$ -hoz tart:

$$\frac{\left|\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1} - \boldsymbol{\Phi}_{\ell}\right|}{\left|\boldsymbol{\Phi}_{\ell} - \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1}\right|} \rightarrow \left|\boldsymbol{\lambda}_{+}\right|$$

Amikor ez az arány stabilizálódott, (34.10) alapján becsülhetjük μ^2 -et, majd (34.12)be helyettesítve megkapjuk ω optimális értékét. A *34.2. ábrá*ról látható, hogy a konvergencia sebessége szempontjából célszerű ω_{opt} felülbecslésére törekedni. ω_{opt} alulbecslése esetén ugyanis $|\lambda_+|$ gyorsan nő μ^2 felé, ami egyre inkább azzal egyenértékű, mintha nem is lenne túlrelaxálás.

Befejezésül megjegyezzük, hogy a fenti megfontolások átvihetők a rácspontonként haladó iterációra is, sőt, a (34.11) és (34.12) képletek érvényben maradnak.



34.3. ábra. Durvahálós kiegyenlítés X-Y geometriában

3.4.7. Durvahálós kiegyenlítés

A durvahálós kiegyenlítés módszerét az X–Y geometriában mutatjuk be. Az elmondottak egyszerűen átvihetők más geometriákra is. Tekintsük a 34.3. ábrát, amely úgy keletkezett, hogy a 32.2. ábrán tartományokat jelöltünk ki. Az y tengely mentén 3, az x tengely mentén pedig 4 tartományt vettünk fel. Ez utóbbiak rendszerét nevezzük *durva* hálónak, szemben az eredeti felosztás szerinti *finom* hálóval. Amikor

a pontonkénti iterációban valamelyik rácspontra egy iterációs lépést végrehajtunk, az ez által eredményezett javulás csak lassan terjed tovább a távolabbi rácspontokig. Emiatt a finomhálós iteráció sok lépést igényelhet. Tegyük fel például, hogy a legnagyobb fluxusok az I = 1, M = 3 tartományban lépnek fel, viszont a legkisebbek az I = 4, M = 1 tartományban (vö. 34.3. ábra), miközben az iterációt térben egyenletes fluxussal szoktuk indítani. A két tartomány meglehetősen messze van egymástól. Egy olyan eszközt keresünk, amellyel minél gyorsabban tudjuk a fluxust az I = 1, M = 3tartományban növelni és az I = 4, M = 1 tartományban csökkenteni. Ez a durvahálós kiegyenlítés célja. Megjegyezzük, hogy ezt a módszert a P_L és S_N módszerek esetében is alkalmazni lehet. Az alábbiakban az 5-pont egyenleteket tartjuk szem előtt.

Tételezzük fel, hogy már végrehajtottunk néhány finomhálós iterációs lépést. Legyen (i, j) egy finomhálós rácspont az (I, M) tartományban. Ha az aktuális iterációs lépésben a fluxus értéke Φ_{ij} , a durvahálós kiegyenlítés módszere abban áll, hogy az egyes tartományok számára keresünk olyan f_{IM} szorzótényezőket, amelyek a rendszer egészére vonatkozóan beállítják a tartományok közötti, közelítőleg helyes fluxusarányokat. Ha ilyeneket találtunk, az iterált fluxusok Φ_{ij} helyett a $f_{IM}\Phi_{ij}$ szorzatok lesznek. Egyenleteket fogunk levezetni az f_{IM} kiegyenlítő tényezők meghatározására. Látni fogjuk, hogy ezek szerkezete ugyanolyan lesz, mint az eredeti végesdifferenciaegyenleteké. Ezek akár egy segéditerációval, akár közvetlen mátrixinverzióval megoldhatók.

Az f_{IM} tényezők meghatározása érdekében a legutolsó finomhálós iterációs lépés eredményét felhasználva átlagoljuk a csoportállandókat az egyes tartományokra. A (31.2) egyenletet integráljuk az (*I*, *M*) tartományra. Az egyszerűség kedvéért bevezetjük a következő jelöléseket:

$$\Sigma = \Sigma_g^a + \Sigma_g^R, \qquad Q = Q_g, \qquad J = -D_g \operatorname{grad} \Phi_g, \qquad \Phi = \Phi_g.$$

Az integrálás a

$$\oint \mathbf{J} d\mathbf{f} + \iint \Sigma \Phi dx dy = \iint Q dx dy$$
(34.13)

egyenletre vezet. A térfogati integrálokat a 32.2. táblázatban szereplő $v_{1,ij}$, ..., $v_{4,ij}$ térfogatelemek segítségével számítjuk ki. A régióhatárok mentén ügyelni kell arra, hogy csak olyan kvadránsokat vegyünk figyelembe, amelyek az (*I*, *M*) tartományhoz tartoznak. Bevezetjük a

átlagokat, ahol ΔX_I és ΔY_M az (*I*, *M*) tartomány oldalhosszúságai. A neutronáramnak a (34.13) egyenletben szereplő felületi integrálját a

$$\oint_{(I,M)} \mathbf{Jdf} = \left(J_{I+,M}^{\mathbf{x}} - J_{I-,M}^{\mathbf{x}}\right) \Delta Y_M + \left(J_{I,M+}^{\mathbf{y}} - J_{I,M-}^{\mathbf{y}}\right) \Delta X_I$$

alakra hozhatjuk, ahol $J_{I+,M}^{x}$ az átlagos neutronáram a tartomány jobboldali felületén, $J_{I-,M}^{x}$ pedig a baloldali felületén. $J_{I,M+}^{y}$ és $J_{I,M-}^{y}$ jelentése analóg.



34.4. ábra. Az (I, M) tartomány jobb oldalán fekvő osztópont körüli kvadránsok X-Y geometriában

Ezekkel a jelölésekkel a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\left(J_{I+,M}^{x} - J_{I-,M}^{x}\right) \Delta Y_{M} + \left(J_{I,M+}^{y} - J_{I,M-}^{y}\right) \Delta X_{I} + \Sigma_{IM} \Phi_{IM} \Delta X_{I} \Delta Y_{M} =$$

$$= Q_{IM} \Delta X_{I} \Delta Y_{M} .$$

$$(34.14)$$

A 34.3. *ábra* esetében ez az I = 1, 2, 3, 4 és M = 1, 2, 3 indexértékekre vonatkozik. Az egyenlet ebben a formájában még nem használható kiegyenlítésre. A neutronáramokat szét kell bontanunk a szomszédos tartományok közötti részáramok összegére. Az (I, M) tartományból kifelé menő áramok a következők:

balra:
$$J_{IM}^{x-}$$
, jobbra: J_{IM}^{x+} , lefelé: J_{IM}^{y+} , felfelé: J_{IM}^{y-}

Az f_{IM} kiegyenlítő tényezőt ezekhez a részáramokhoz és a Φ_{IM} fluxushoz kapcsoljuk. A (34.14) egyenletben szereplő teljes áramok ezeknek a részáramoknak és a szomszédos tartományokból kifolyó analóg részáramoknak az összege lesz:³⁰

$$\begin{split} J^{\rm X}_{I+,M} &= J^{\rm X+}_{IM} + J^{\rm X-}_{I+1,M} , \qquad \qquad J^{\rm X}_{I-,M} &= J^{\rm X-}_{IM} + J^{\rm X+}_{I-1,M} , \\ J^{\rm Y}_{I,M+} &= J^{\rm Y+}_{IM} + J^{\rm Y-}_{I,M+1} , \qquad \qquad J^{\rm Y}_{I,M-} &= J^{\rm Y-}_{IM} + J^{\rm Y+}_{I,M-1} . \end{split}$$

Az (I, M) tartomány szomszédjaiból kifolyó részáramokat a szomszédokhoz tartozó kiegyenlítő tényezőkkel kapcsoljuk össze. Így jutunk a következő egyenletekre:

$$\begin{pmatrix} f_{IM} \left(J_{IM}^{x+} - J_{IM}^{x-} \right) + f_{I+1,M} J_{I+1,M}^{x-} - f_{I-1,M} J_{I-1,M}^{x+} \right) \Delta Y_M + \\ + \left(f_{IM} \left(J_{IM}^{y+} - J_{IM}^{y-} \right) + f_{I,M+1} J_{I,M+1}^{y-} - f_{I,M-1} J_{I,M-1}^{y+} \right) \Delta X_I + \\ \end{pmatrix}$$

 $^{^{30}}$ Vegyük észre, hogy a részáramok előjelét itt nem a szokásos módon definiáljuk: azok a részáramok negatívok, amelyek a negatív x- és y-irányokba repülő neutronok számát adják meg (azaz azok, amelyek felső indexe x– és y–). Képleteinkben ezt figyelembe vesszük.

$$+ \Sigma_{IM}^{\mathsf{t}} f_{IM} \Phi_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M = Q_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M . \tag{34.15}$$

Amint már említettük, a kiegyenlítő tényezőkre vonatkozóan ezek ugyanolyan 5-pont egyenletek, mint maguk a finomhálós végesdifferencia-egyenletek.

A (34.15) egyenletet csak akkor tudjuk alkalmazni, ha van képletünk a részáramok kiszámítására. Ennek érdekében a 32.2. *ábrá*t egy kicsit átalakítjuk, és így kapjuk a 34.4. *ábrá*t az (*I*, *M*) tartomány jobb oldalán fekvő belső osztópontra. A neutronáram x-komponense nem itt, hanem az $x = x_{i-1/2}$ és $x = x_{i+1/2}$ rácsvonalakon jelenik meg a finomhálós végesdifferencia-egyenletekben. A következőképpen közelítjük:

$$J_{i-1/2,j}^{x} \cong D_{IM} \frac{\Phi_{ij} - \Phi_{i-1,j}}{\Delta x_{i}} \qquad \text{és} \qquad J_{i+1/2,j}^{x} \cong D_{I+1,M} \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{ij}}{\Delta x_{i+1}}.$$
 (34.16)

Amint a 3.2.5. szakaszban meghatározzuk, ezek a képletek $(\Delta x)^2$ rendig pontosak. Nekünk az $x = x_i$ rácsvonalon van szükségünk a neutronáramra. Az utóbbira ugyanilyen rendű közelítésre van szükségünk, hiszen e nélkül a durvahálós kiegyenlítés nem lenne elég hatékony. $(\Delta x)^2$ rendű közelítést a (32.36) parabolából kiindulva kaphatunk, amely érvényes az $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ intervallumban. Ha ezt z szerint differenciáljuk, akkor az $x = x_i$ -hez tartozó neutronáramot a z = 0 helyettesítéssel kapjuk:

$$J_{ij}^{x} = \frac{d_{1}^{2} \Phi_{i+1,j} - d_{2}^{2} \Phi_{i-1,j} - (d_{1}^{2} - d_{2}^{2}) \Phi_{ij}}{d_{1} d_{2} (d_{1} + d_{2})},$$
(34.17)

ahol

$$d_1 = \Delta x_i / D_{IM}$$
 és $d_2 = \Delta x_{i+1} / D_{I+1,M}$.

A (34.17) képlet érvényes az (I, M) tartomány bal oldalán is, ha a d_1 és d_2 paramétereket egy kicsit eltérően definiáljuk:

$$d_1 = \Delta x_i / D_{I-1,M}$$
 és $d_2 = \Delta x_{i+1} / D_{IM}$.

Az (I, M) tartomány alsó határán a neutronáram y-komponensét analóg módon számíthatjuk ki:

$$J_{ij}^{y} = \frac{d_1^2 \Phi_{i,j+1} - d_2^2 \Phi_{i,j-1} - (d_1^2 - d_2^2) \Phi_{ij}}{d_1 d_2 (d_1 + d_2)}$$
(34.18)

ahol

$$d_1 = \Delta y_j / D_{IM}$$
 és $d_2 = \Delta y_{j+1} / D_{I,M+1}$

Az (*I*, *M*) tartomány felső határán a (34.18) képlet a paraméterek következő értékénél érvényes:

$$d_1 = \Delta y_j / D_{I,M-1}$$
 és $d_2 = \Delta y_{j+1} / D_{IM}$.

Mielőtt továbbmennénk, a (34.17) és (34.18) képletek jobb megértése érdekében érdemes ezeket az egyenletes rácsosztás és konstans diffúzióállandó esetére specializálni. Ekkor $d_1 = d_2 = d$, amivel

$$J_{ij}^{x} = \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j}}{2d} = D \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

,	
\mathbf{n}	C
C	5
-	~

$$J_{ij}^{y} = \frac{\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j-1}}{2d} = D \frac{\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

Ezeket a képleteket akár közvetlenül is fel lehetett volna írni.

A neutronáram x- és y-komponensének az ismeretében már kiszámíthatjuk a részáramokat is. A fentiekhez hasonlóan a tekintett tartomány négy oldalán különböző képleteket kell alkalmaznunk:

az (I, M) tartomány baloldali határa:

$$J_{ij}^{x-} = -\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2} \qquad \text{és} \qquad J_{ij}^{x+} = \frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2}; \qquad (34.19a)$$

az (I, M) tartomány jobboldali határa:

$$J_{ij}^{x-} = \frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2} \qquad \text{és} \qquad J_{ij}^{x+} = -\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2}; \qquad (34.19b)$$

az (I, M) tartomány felső határa:

$$J_{ij}^{y-} = -\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{y}}{2} \qquad \text{és} \qquad J_{ij}^{y+} = \frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{y}}{2}; \qquad (34.19c)$$

az (I, M) alsó határa:

$$J_{ij}^{y-} = \frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{y}}{2} \qquad \text{és} \qquad J_{ij}^{y+} = -\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{y}}{2}. \tag{34.19d}$$

Ezeket a részáramokat a (34.15) egyenletbe való helyettesítés előtt a megfelelő oldalakra átlagolni kell.

A (34.17) és (34.18) képletek nem használhatók a vizsgált rendszer külső határfelületein, mivel a benne szereplő fluxusok a rendszeren kívül eső pontokhoz tartozhatnak. Ezt a problémát úgy kerülhetjük meg, hogy a (34.13) egyenletben szereplő integrálási tartományt csökkentjük: ilyen határfelületek mentén a finomhálós rácsosztásnak a felét elhagyjuk. Ekkor a (34.19) képletekben szereplő neutronáramokat a (34.16) képlettel analóg formulákkal számítjuk ki.

Ezután már csak egy megoldatlan probléma marad. Miután megoldottuk a (34.15) egyenleteket, a fluxusokat és részáramokat megszorozzuk az f_{IM} kiegyenlítő tényezőkkel. Ez ellentmondáshoz vezet a tartományok határán fekvő finomhálós osztópontra vonatkozóan, hiszen ezeket két kiegyenlítő tényezővel is meg kellene szoroznunk, nevezetesen a két csatlakozó tartományhoz tartozókkal. A következő megfontolással találhatunk egyetlen kiegyenlítő tényezőt. Példaként tekintsük a baloldali határt. A (34.19a) képleteknek fenn kell állniuk a kiegyenlítés után is:

$$J_{ij}^{\prime x-} = -\frac{\Phi_{ij}^{\prime}}{4} + \frac{J_{ij}^{\prime x}}{2} \qquad \text{és} \qquad J_{ij}^{\prime x+} = \frac{\Phi_{ij}^{\prime}}{4} + \frac{J_{ij}^{\prime x}}{2},$$

ahol vesszővel jelöltük a kiegyenlítés után kapott mennyiségeket. A részáramokat olyan kiegyenlítő tényezőkkel szorozzuk meg, amelyek kielégítik a következő egyenletrendszert:

$$f_{IM}\left(-\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2}\right) = -\frac{\Phi_{ij}'}{4} + \frac{J_{ij}'^{x}}{2}$$

és

$$f_{I-1,M}\left(\frac{\Phi_{ij}}{4} + \frac{J_{ij}^{x}}{2}\right) = \frac{\Phi_{ij}'}{4} + \frac{J_{ij}'^{x}}{2}.$$

Ebből kapjuk, hogy

$$\Phi_{ij}' = \frac{f_{I-1,M} + f_{IM}}{2} \Phi_{ij} + (f_{I-1,M} - f_{IM}) J_{ij}^{x}.$$

Az adódott tehát, hogy – első közelítésben – a legjobb kiegyenlítő tényezők az érintkező régiókhoz tartozó kiegyenlítő tényezők számtani közepei. A képletben szereplő második tag csak egy korrekció, amely az áram folytonosságát biztosítja. Mivel az iteráció konvergenciájához közeledve a kiegyenlítő tényezők azonosan 1-hez tartanak, ez a korrekciós tag a zérushoz tart. Hasonló képletet kapunk a kiegyenlített neutronáramra is:

$$J'_{ij} = \frac{f_{I-1,M} + f_{IM}}{2} J_{ij} + (f_{I-1,M} - f_{IM}) \frac{\Phi_{ij}}{4}$$

Erre a képletre a gyakorlatban nincs szükség, csak a teljesség kedvéért írtuk fel.

3.5. Az időfüggő diffúzióegyenlet megoldása

A (31.1) időfüggő diffúzióegyenlet megoldására is a véges differenciák módszerét alkalmazzuk. A térfüggő részt ugyanúgy írjuk át véges differenciákra, mint az időtől független (31.2) egyenlet esetében. Ha ezt megtesszük, a jobb oldalon megjelenik a (33.12) egyenletben szereplő **P** és **D** produkciós, illetve destrukciós operátor. Ha bevezetjük a **V** diagonális mátrixot³¹, amely a *g*-edik csoportban mindegyik osztópontra vonatkozóan a v_g csoportsebességet tartalmazza (megszorozva a geometriától függően a (32.7b), (32.8b), (32.9b) stb. képletekben szereplő együtthatókkal), az időfüggő diffúzióegyenletet a következőképpen írhatjuk át a térbeli véges differenciák segítségével:

$$\mathbf{V}^{-1}\frac{\mathrm{d}\mathbf{F}(t)}{\mathrm{d}t} = (\mathbf{P} - \mathbf{D})\mathbf{F}(t), \qquad (35.1)$$

ahol $\mathbf{F}(t)$ a különböző rácspontokhoz és energiacsoportokhoz tartozó fluxusokból képzett vektor. Az alábbiak alkalmazhatók akkor is, amikor a **P** és **D** operátorok is függnek az időtől, de – az egyszerűség kedvéért – ezt nem tűntetjük fel. Egyelőre figyelmen kívül hagyjuk a késő neutronokat is.

3.5.1. Véges differenciák az idő szerint

Választunk diszkrét időpontokat: t_0 , t_1 , t_2 , ..., amelyek nem szükségképpen egyenletesek. A (35.1)-hez tartozó kezdőfeltétel t_0 -ra vonatkozik:

³¹ Nem tévesztendő össze a szukcesszív túlrelaxálás tárgyalásakor szereplő V felső háromszögmátrixszal.

$$\mathbf{F}(t_0) = \mathbf{F}_0. \tag{35.2}$$

Integráljuk (35.1)-et a *k*-adik időintervallumra (k = 1, 2, ...):

$$\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{F}(t_k) - \mathbf{F}(t_{k-1})) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t) \mathrm{d}t .$$
(35.3)

Az egyes időbeli végesdifferencia-sémák aszerint különböznek egymástól, hogyan közelítjük az integrált. A három leggyakoribb séma ($\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$):

előremutató:
$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t) dt \cong (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t_{k-1}) \Delta t_k; \qquad (35.4a)$$

hátramutató:
$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t) dt \cong (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t_k) \Delta t_k; \qquad (35.4b)$$

centrális:
$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{F}(t) dt \simeq (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \frac{\mathbf{F}(t_{k-1}) + \mathbf{F}(t_k)}{2} \Delta t_k.$$
(35.4c)

Nézzük ezeket a sémákat sorjában. Az előremutató véges differenciák esetében (35.4a)-t behelyettesítjük (35.3)-ba:

$$\mathbf{F}(t_k) = \mathbf{F}(t_{k-1}) + \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\mathbf{F}(t_{k-1})\Delta t_k.$$
(35.5a)

k = 1-től indulva a fluxusvektor ebből mindegyik időpontra vonatkozóan felépíthető. Vegyük észre, hogy itt semmiféle iterációra nincs szükség. Iterálni kell azonban a hátramutató véges differenciák esetében, hiszen ekkor

$$\mathbf{F}(t_k) = \mathbf{F}(t_{k-1}) + \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\mathbf{F}(t_k)\Delta t_k.$$

Ez egyenlet a t_k -hoz tartozó fluxusra, amely önként kínálja az iterációt. Kezdeti értéknek ($\ell = 0$) a t_{k-1} -hez tartozó fluxust választjuk:

$$\mathbf{F}_0(t_k) = \mathbf{F}(t_{k-1}),$$

majd a későbbi lépésekben

$$\mathbf{F}_{\ell+1}(t_k) = \mathbf{F}(t_{k-1}) + \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\mathbf{F}_{\ell}(t_k)\Delta t_k.$$

Könnyen belátható, hogy ez a következő Neumann-sor alakjában írható fel:

$$\mathbf{F}_{\ell+1}(t_k) = \sum_{\ell'=0}^{\ell} (\mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D}) \Delta t_k)^{\ell'} \mathbf{F}(t_{k-1}).$$

Ha ez konvergál $\ell \rightarrow \infty$ esetén, a határérték

$$\mathbf{F}(t_k) = \left(\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\Delta t_k\right)^{-1} \mathbf{F}(t_{k-1}), \qquad (35.5b)$$

amit a kiindulási egyenletből közvetlenül is felírhattunk volna. Az itt megjelenő inverz kiszámítása egyenértékű a fenti iterációval. A későbbiekben belátjuk, hogy ezt az iterációt a gyakorlatban nem célszerű alkalmazni, valami mást kell keresni. Általában persze csak kevés lépésre van szükség, ha Δt_k minden k-ra elég kicsi. Ha a Neumannsor első tagjánál megállunk, vagyis csak egyetlen iterációs lépést teszünk, visszakapjuk (35.5a)-t, hiszen

$$(\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\Delta t_k)^{-1} \approx \mathbf{E} + \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\Delta t_k + \mathbf{O}(\Delta t_k)^2.$$

A centrális differenciák esetében a fenti módon a következőt kapjuk:

$$\mathbf{F}(t_k) = \left(\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\frac{\Delta t_k}{2}\right)^{-1} \left(\mathbf{E} + \mathbf{V}(\mathbf{P} - \mathbf{D})\frac{\Delta t_k}{2}\right) \mathbf{F}(t_{k-1}).$$
(35.5c)

Ennek alkalmazásához szintén szükség van iterációra.

3.5.2. Konvergencia

A fenti időbeli végesdifferencia-sémákkal kapcsolatban fontos kérdés, fognake a (35.5) képletek egyikével számolt fluxusok a valóságos $\mathbf{F}(t)$ megoldáshoz konvergálni, amikor minden *k*-ra $\Delta t_k \rightarrow 0$. Ennek vizsgálatát egy alapvető kritérium teljesülésére korlátozzuk, amely szerint az $\mathbf{F}(t)$ megoldás – tetszőleges kezdeti fluxusból kiindulva is – átmegy a megmaradó módusba, vagyis egy időben exponenciális függvény és a legnagyobb időállandóhoz tartozó alakfüggvény szorzatába. Definiáljuk a (35.1) egyenlet kinetikus sajátértékeit:

$$\omega \mathbf{V}^{-1} \mathbf{\varphi} = (\mathbf{P} - \mathbf{D}) \mathbf{\varphi} \,. \tag{35.6}$$

A sajátértékeket monoton csökkenő sorozatba rendezzük: $\omega_0 > \omega_1 > \omega_2 > ...$ Az ω_j -nek megfelelő sajátvektort φ_j -vel jelöljük (j = 0, 1, ...). A (35.1) egyenlet megoldását ezek szerint sorba fejtve kapjuk az

$$\mathbf{F}(t) = \sum_{j} w_{0j} \mathbf{e}^{\omega_{j} t} \mathbf{\varphi}_{j} \approx w_{00} \mathbf{e}^{\omega_{0} t} \mathbf{\varphi}_{0}$$
(35.7)

kifejezést, amely elegendően nagy *t*-re átmegy a "j = 0" indexű tagba, ahogy a képletben jelöltük is. A w_{0j} együtthatók a kezdeti eloszlás sorfejtési együtthatói, vagyis a $t = t_0$ időpontra vonatkoznak. Az alábbiakban megvizsgáljuk, mennyire igaz ez az egyes végesdifferencia-sémák segítségével számított közelítő megoldásra.

Alkalmazzuk a sajátvektorok szerint való sorfejtést az időbeli végesdifferencia-egyenletekkel kapott megoldásokra:

$$\mathbf{F}(t_k) = \sum_j w_{kj} \mathbf{\varphi}_j \; .$$

1

\ **,**

Ha az előremutató sémák esetében ezt (35.5a)-ba helyettesítjük, a sajátvektorok ortogonalitása alapján a

$$w_{kj} = (1 + \omega_j \Delta t_k) w_{k-1,j} = w_{0j} \prod_{k'=1}^k (1 + \omega_j \Delta t_{k'})$$
(35.8a)

rekurziót kapjuk. Ha az időbeosztás egyenletes, ez azt jelenti, hogy

$$w_{kj} = \left(1 + \omega_j \Delta t\right)^k w_{0j}. \tag{35.8b}$$

Konvergenciától beszélhetünk, ha $(1 + \omega_j \Delta t)^k \rightarrow e^{\omega_j k \Delta t}$, amikor $\Delta t \rightarrow 0$. Véges Δt -re ennek triviális feltétele, hogy $|\omega_j \Delta t| \ll 1$ fennálljon minden *j*-re. (35.8b)-ből követke-

zik az előremutató sémának egy nagyon kellemetlen tulajdonsága. A későbbiekben részletesen megvizsgáljuk az ω_j sajátérték-spektrum jellegzetességeit. Ebből megelőlegezünk néhány konklúziót:

- Legfeljebb egy sajátérték van, amely pozitív lehet; ezt ω_0 -lal jelöljük, és rá vonatkozóan könnyen teljesíthető az $|\omega_0 \Delta t| \ll 1$ feltétel.
- A többi sajátérték általában negatív, és vannak köztük nagyon nagy abszolút értékűek is. Ez utóbbiakra fennáll, hogy a térbeli felosztás finomodásával –∞-hez tartanak.

Ha feltesszük, hogy mindegyik sajátértékre fennáll az $|\omega_j \Delta t| < 1$ összefüggés, akkor a (35.8) képletek szerint a legnagyobb sajátértékekhez tartozó módusok amplitúdói is 0-hoz tartanak, ahogy reméli az ember. Ha azonban van olyan módus, amelyre $|\omega_j \Delta t| > 1$, akkor az ennek megfelelő w_{kj} amplitúdó váltakozó előjellel a végtelenbe tart, aminek a valósághoz semmi köze nincs. Másrészt viszont az $|\omega_j \Delta t| << 1$ feltételnek eleget tevő módusok együtthatói (35.8a) szerint a

$$w_{kj} \approx w_{0j} \prod_{k'=1}^{k} e^{\omega_j \Delta t_{k'}} = w_{0j} e^{\omega_j t_k}$$
(35.8c)

függvénnyel közelíthetők. Ez pedig nem más, mint az időben folytonos (35.1) egyenletnek a *j*-edik módus szerinti megoldása. Azt találtuk tehát, hogy az előremutató séma esetében az első néhány időlépésnek olyan rövidnek kell lennie, hogy az $|\omega_j \Delta t| < 1$ feltétel mindegyik módusra biztonsággal teljesüljön. Mivel $(1 + \omega_j \Delta t_k)$ a legnagyobb abszolút értékű sajátértékekre a legkisebb, ezek tűnnek el leggyorsabban. Miután ez bekövetkezett, fokozatosan növelhetjük az időlépéseket, de akkor is vigyáznunk kell arra, hogy a megmaradó – és számunkra érdekes módusokra – teljesüljön a másik feltétel: $|\omega_j \Delta t| << 1$. Elengedhetetlen tehát, hogy legyen becslésünk a sajátértékek nagyságrendjére. Enélkül ugyanis nem tudjuk egymással összhangba hozni a térbeli és időbeli véges differenciákat (lásd alább).

Az imént elemzett probléma szempontjából lényegesen kedvezőbb a hátramutató séma. Ha ugyanis (35.5b)-ből indulunk ki, (35.8a) helyett a

$$w_{kj} = \frac{w_{k-1,j}}{1 - \omega_j \Delta t_k} = \frac{w_{0j}}{\prod_{k'=1}^k (1 - \omega_j \Delta t_{k'})}$$
(35.9)

összefüggés adódik. Ez az együttható a lassú időállandókra átmegy a (35.8c) szerinti exponenciálisba, ha rájuk vonatkozóan teljesül az $|\omega_j \Delta t| <<1$ feltétel. A nagy abszolút értékű, negatív időállandók viszont biztosan kihalnak. Ugyan lassabban tartanak zérushoz, mint az exponenciális függvény, de mégis kielégítően gyorsan. A hátramutató sémák tehát mindenképpen kedvezőbbek, mint az előremutatók, hiszen nem feltétlenül igénylik, hogy a kezdeti időlépések nagyon kicsik legyenek. A fentiekben mutatott iterációs séma, illetve a neki megfelelő Neumann-sor konvergenciájának az a feltétele, hogy $|\omega_j \Delta t| < 1$ legyen minden *j*-re. Ha tehát a (35.5b)-ben szereplő inverz mátrix kiszámítására ezt az iterációt alkalmazzuk, a kezdeti időlépéseknek ugyan-

olyan kicsiknek kell lenniük, mint az előremutató séma esetében. Ebből következik, hogy a hátramutató séma esetében a mátrix invertálásához olyan algoritmusra van szükség, amely nem épít erre a feltételre. A 3.3. alfejezetben tárgyalt algoritmus meg-felelő.

Közbenső helyet foglalnak el a centrális sémák. Ezekre ugyanis – (35.5c)-ből kiindulva – a következő együtthatók adódnak:

$$w_{kj} = \frac{1 + \omega_j \Delta t_k/2}{1 - \omega_j \Delta t_k/2} w_{k-1,j} = w_{0j} \prod_{k'=1}^k \frac{1 + \omega_j \Delta t_{k'}/2}{1 - \omega_j \Delta t_{k'}/2}.$$
(35.10)

A lassú módusokra ez magasabb rendű közelítést jelent, ugyanis

$$\frac{1+\omega_j\Delta t_{k'}/2}{1-\omega_j\Delta t_{k'}/2} = 1+\omega_j\Delta t_{k'} + \frac{(\omega_j\Delta t_{k'})^2}{2} + O(\omega_j\Delta t_{k'})^3.$$

Az exponenciális kifejezés sora:

$$e^{\omega_j \Delta t_{k'}} = 1 + \omega_j \Delta t_{k'} + \frac{\left(\omega_j \Delta t_{k'}\right)^2}{2} + O\left(\omega_j \Delta t_{k'}\right)^3.$$

Ha ezt (35.10)-be helyettesítjük, a (35.8c) összefüggésre jutunk. Látjuk, hogy az előre- és hátramutató sémákkal szemben, amelyek Δt -ben csak első rendig pontosak, a centrális sémák Δt -ben második rendig pontosak. Ebből a szempontból tehát az utóbbiak tűnnek az idézett három séma közül a legjobbnak. A nagy abszolút értékű módusokkal szemben viszont tulajdonképpen rosszabbul viselkednek, mint a hátramutató sémák, mert nagy $|\omega_i \Delta t|$ -re, a (35.10)-ben szereplő tényezők –1-hez tartanak. Tehát ezek a módusok nem tűnnek el, hanem minden t_k -ra megmaradnak, és váltakozó előjelű, de gyakorlatilag állandó abszolút értékű járulékot adnak. Ennek megakadályozása érdekében itt is szükség van arra, hogy kezdetben kellő számú kis időlépést válasszunk, amíg ezek a módusok el nem tűnnek. A centrális sémáknak az előremutató sémákkal szemben az a járulékos hátrányuk is megvan, hogy a velük kapott eredményeken nem nyilvánvaló a helytelen eredmény: az előremutató sémák esetében az iteráció $t_k \rightarrow \infty$ esetén divergál (ami nyilvánvaló hiba), de ilyen divergencia nem lép fel a centrális sémáknál, vagyis a hiba rossz esetben rejtve maradhat. A dolog akkor jelentkezik szembetűnő módon, amikor az alapmódus időállandója (ω_0) negatív, ugyanis ekkor az alapmódus $t_k \rightarrow \infty$ esetén 0-hoz tart. Ha a megoldást nem számítjuk ki olyan hosszú időkig, amelyeknél az alapmódus már elhanyagolhatóvá válik, előfordulhat, hogy észre sem vesszük a váltakozó előjellel megjelenő, el nem tűnő magasabb módusokat.

Az elmondottakat a következőképpen foglalhatjuk össze:

- 1. Mindenképpen becslést kell adnunk a legnagyobb abszolút értékű időállandókra. Ennek alapján dönthetjük el, hogy a kezdeti időlépéseket mekkorára kell választanunk.
- Centrális és előremutató sémák esetében a kezdeti időlépéseket ennek megfelelően kis értékre kell beállítani.
- 3. A (35.5b) és (35.5c) egyenletekben megjelölt mátrixinverziókat ténylegesen végre kell hajtani (nem a fenti, hanem alkalmas iterációval vagy közvetlen inverzióval), különben számításunk ugyanúgy viselkedik, mint egy előremutató séma esetében.

- 4. Azt, hogy a kezdeti lépésekben előre- vagy hátramutató sémát célszerű-e alkalmazni, praktikus szempontok döntik el. Megbecsüljük, hogy az előremutató séma szerint hány időlépésre van szükség a magasabb módusok kiöléséhez. Ha ez több ráfordítást igényel, mint a hátramutató sémához szükséges mátrixinverzióhoz alkalmazott algoritmus, akkor előnyösebb a hátramutató séma.
- 5. A leggyorsabban változó módusok eltűnése után célszerű áttérni a centrális sémákra.

3.5.3. Az időbeli sajátértékek becslése

Az időbeli sajátértékeket a legegyszerűbb esetben, egy egydimenziós homogén réteg esetében becsüljük. Egy ilyen rendszerben a (34.3) egyenlet alakja a következő:

$$D_{g} \frac{\Phi_{g,i-1} + \Phi_{g,i+1} - 2\Phi_{g,i}}{(\Delta x)^{2}} - \Sigma_{g} \Phi_{g,i} + L_{g,i} + S_{g,i} = 0, \qquad (35.11)$$
$$(g = 1, 2, ..., G).$$

Az itt szereplő C mátrix sajátértékei és sajátfüggvényei egyszerűen meghatározhatók: $^{\rm 32}$

$$D_g \lambda_j = -\frac{4D_g}{(\Delta x)^2} \left(\sin\frac{\theta_j}{2}\right)^2, \quad \theta_j = \frac{j\pi}{n+1}, \quad (j = 1, 2, ..., n), \quad (35.12a)$$

ahol *n* az x tengely mentén felvett Δx hosszúságú intervallumok száma. A *j*-ediknek megfelelő sajátvektor

$$\varphi_{ji} = \sin i\theta_j, \qquad (i = 1, 2, ..., n).$$
 (35.12b)

Az egyes módusokhoz tartozó időbeli sajátvektorokat a következő hipervektor alakjában keressük:

$$\mathbf{F}_{j} = \begin{bmatrix} \psi_{1} \mathbf{\varphi}_{j} \\ \psi_{2} \mathbf{\varphi}_{j} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{G} \mathbf{\varphi}_{j} \end{bmatrix}.$$
 (35.13a)

(31.1) alapján az erre vonatkozó kinetikus sajátérték-egyenlet (g = 1, 2, ..., G)

$$D_g \lambda_j \psi_g - \left[\Sigma_g^a + \Sigma_g^R \right] \psi_g + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \psi_{g'} + f_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{g'}^f \psi_{g'} = \frac{\omega}{v_g} \psi_g.$$
(35.13b)

Ez egy *G*-edrendű mátrix sajátérték-egyenlete, amelynek *G* megoldása van, vagyis mindegyik térbeli módushoz *G* kinetikus sajátérték tartozik. Hogy fogalmat kapjunk a nagyságrendekről, ezt az egyenletet két csoportban vizsgáljuk tovább, de az egyszerű-ség kedvéért elhanyagoljuk a gyors neutronok által kiváltott hasadást. (35.13b) ekkor a következő alakba megy át:

³² Lásd például Rózsa Pál *Lineáris algebra és alkalmazásai* című könyvében (Műszaki Könyvkiadó, 1974).

$$D_1 \lambda_j \psi_1 - \left[\Sigma_1^{a} + \Sigma_1^{R} \right] \psi_1 + \nu \Sigma_2^{f} \psi_2 = \frac{\omega}{v_1} \psi_1,$$
$$D_2 \lambda_j \psi_2 - \Sigma_2^{a} \psi_2 + \Sigma_1^{R} \psi_1 = \frac{\omega}{v_2} \psi_2.$$

Ha bevezetjük a szokásos

$$k_{\infty} = \frac{\nu \Sigma_2^{\text{f}} \Sigma_1^{\text{R}}}{\Sigma_1 \Sigma_2^{\text{a}}}, \qquad \qquad \Sigma_1 = \Sigma_1^{\text{a}} + \Sigma_1^{\text{R}}, \qquad \tau = \frac{D_1}{\Sigma_1}, \qquad L^2 = \frac{D_2}{\Sigma_2^{\text{a}}}$$

jelöléseket, a fenti sajátérték-probléma az

$$\frac{\omega^2}{v_1 \Sigma_1 v_2 \Sigma_2^{a}} + \omega \left(\frac{1 - \tau \lambda_j}{v_2 \Sigma_2^{a}} + \frac{1 - L^2 \lambda_j}{v_1 \Sigma_1} \right) + \left(1 - \tau \lambda_j \right) \left(1 - L^2 \lambda_j \right) - k_{\infty} = 0$$

másodfokú egyenletre vezet.

Nézzük meg a legnagyobb és legkisebb abszolút értékű térbeli sajátértékhez tartozó kinetikus sajátértékeket. A legkisebb abszolút értékű térbeli sajátérték

$$\lambda_1 = -\frac{4}{(\Delta x)^2} \left(\sin \frac{\theta_1}{2} \right)^2 \approx -\frac{\theta_1^2}{(\Delta x)^2} = -\left(\frac{\pi}{(n+1)\Delta x} \right)^2 = -B_1^2, \qquad (35.14a)$$

vagyis a geometriai görbületi paraméter negatívja. A kritikussághoz közel erre fennáll a

$$(1-\tau\lambda_1)(1-L^2\lambda_1)\approx k_\infty$$

közelítés. Ha ezt a fenti másodfokú egyenletbe helyettesítjük, beláthatjuk, hogy a sajátérték-probléma egyik megoldása $\omega_{11} \approx 0$, a másik pedig

$$\omega_{12} \approx -(1-\tau\lambda_1) v_1 \Sigma_1 - (1-L^2\lambda_1) v_2 \Sigma_2^{a},$$

,

ami ω_{11} -hez képest nagy abszolút értékű negatív szám. A fenti jelölések szerint ω_{11} felel meg ω_0 -nak. A legnagyobb abszolút értékű térbeli sajátérték

$$\lambda_n = -\frac{4}{(\Delta x)^2} \left(\sin \frac{\theta_n}{2} \right)^2 \approx -\frac{4}{(\Delta x)^2},$$
(35.14b)

amelyre mindig fennáll, hogy

$$(1-\tau\lambda_n)(1-L^2\lambda_n) >> k_{\infty},$$

vagyis az ennek megfelelő két kinetikus sajátérték:

$$\omega_{n1} \approx -(1 - \tau \lambda_n) v_1 \Sigma_1 \approx -\frac{4\tau v_1 \Sigma_1}{(\Delta x)^2} = -\frac{4D_1 v_1}{(\Delta x)^2}$$

és

$$\omega_{n2} \approx -\left(1 - L^2 \lambda_n\right) v_2 \Sigma_2^a \approx -\frac{4L^2 v_2 \Sigma_2^a}{\left(\Delta x\right)^2} = -\frac{4D_2 v_2}{\left(\Delta x\right)^2}$$

Mindkettő nagy abszolút értékű negatív szám.

Mivel általában $-\omega_{n1} > -\omega_{n2}$, az első időlépések nagyságát ω_{n1} -hez kell igazítani. A fenti kritériumok szerint $|\omega_{n1}\Delta t|$ -nek 1-nél lényegesen kisebbnek kell lennie ahhoz, hogy az *n*-edik módus néhány időlépés után eltűnjön. Ebből következik, hogy Δt nem lehet nagyobb, mint

$$\Delta t \le \Delta t_{\max} = \frac{(\Delta x)^2}{4D_1 v_1} \,. \tag{35.15}$$

Ezt úgy szoktuk kifejezni, hogy a $\Delta t/(\Delta x)^2$ hányadosnak felülről korlátosnak kell maradnia ahhoz, hogy a végesdifferencia-egyenletek megoldása a felosztás finomításakor a (31.1) időfüggő diffúzióegyenlet megoldásához konvergáljon. (35.15) megadja, hogy ez a felső korlát 1/(4D₁v₁).

Ha ezt a következtetést az időlépések szempontjából nézzük, azt látjuk, hogy nem csak ω_{n1} nagysága okoz problémát, hanem az a körülmény is, hogy a térbeli eloszlás finomodásakor, vagyis Δx csökkenésekor a mértékadó kinetikus sajátérték abszolút értéke $1/(\Delta x)^2$ -nel arányosan (tehát gyorsan) tart a végtelenhez. Ebből következik, hogy a térbeli pontosság javítása négyzetesen csökkenti a válaszható időlépéseket: ha kétszeresre csökkentjük a térbeli eloszlás hibáját, négyszeresre kell csökkentenünk az időlépéseket.

E rész befejezéséül veszünk egy számszerű példát. Termikus reaktorok esetében tipikus értékek a következők:

$$\Delta x = 1 \text{ cm};$$
 $D_1 = 1 \text{ cm};$ $v_1 = 2 \cdot 10^6 \text{ cm/s};$ $\Delta t_{\text{max}} \approx 10^{-7} \text{ s}$

Egy kritikushoz közeli állapotban levő reaktorra – még nagyon gyors tranziensek esetében is – a jellegzetes időlépés $\Delta t \sim$ ms nagyságrendű, de többnyire 10–100 ms. Ezzel szemben azt találtuk, hogy a leggyorsabban változó módusok kiöléséhez kezdetben 0,1 µs-nál kisebb, tehát 0,01 µs nagyságrendű időlépéseket kell választani. Ez első látásra logikátlan, hiszen azt várná az ember, hogy már kezdetben lehet olyan Δt ket választani, amilyen időskálán lejátszódó folyamatokat vizsgálunk. A hátramutató sémák esetében ez így is van.

Más kérdés, hogy a (35.2) szerint választott kezdeti eloszlás tartalmazza-e a nagy negatív időállandójú módusokat. Tekintve, hogy (35.12b) szerint ezek térfüggése nagyon gyors változásokat tartalmaz, a szóban forgó módusok csak akkor jelennek meg, amikor a kezdeti eloszlásban nagyon éles változások, ugrások, vagyis szintén gyors változások vannak. Ilyen például az az eset, amikor azt vizsgáljuk, időben hogyan terül szét egy kezdetben pontszerű vagy egy szűk térrészre éles ugrásokkal lokalizált térbeli eloszlás. Ekkor gyakorlatilag minden módus megjelenik, és – előremutató vagy centrális séma használatakor – a számítás során végig meg is marad (esetleg divergál), ha a kezdeti időlépéseket nem megfelelően választjuk meg.

3.5.4. A késő neutronok figyelembevétele

Dinamikai számítások érdekében a (31.1) egyenleteket ki kell egészíteni a késő neutronokat figyelembe vevő tagokkal. Ehhez a forrástagot a következőképpen kell módosítani:

$$Q_{0g}(\mathbf{r},t) = \sum_{g' \neq g} \mathcal{L}_{g' \rightarrow g} \boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r},t) +$$

$$+\sum_{m}\left\{h_{m}(1-\beta_{m})f_{pg}\sum_{g'=1}^{G}\nu\Sigma_{g'}^{f}\Phi_{g'}(\mathbf{r},t)+\sum_{i=1}^{6}f_{img}\lambda_{im}C_{im}(\mathbf{r},t)\right\},$$
(35.16)

ahol az m index végigfut a hasadó izotópokon. További jelölések:

- h_m az *m*-mel jelölt izotópban keletkező hasadási neutronok részaránya;
- f_{pg} a prompt neutronok spektruma, amelyet a hasadó izotóp fajtájától függetlennek tekintjük;
- f_{img} az *i*-edik későneutron-csoport spektruma az *m*-mel jelölt izotópra vonatkozóan.

A későneutron-anyagmagok koncentrációi kielégítik a

$$\frac{\partial C_{im}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\lambda_{im}C_{im}(\mathbf{r},t) + h_m\beta_{im}\sum_{g'=1}^G v\Sigma_{g'}^{f}\Phi_{g'}(\mathbf{r},t)$$
(35.17)

egyenleteket. A későbbiekben szükségünk lesz még a sztatikus hasadási spektrumra, amely a prompt és a késő neutronok spektrumának az átlaga:

$$f_{\rm sg} = \sum_{m} h_m \left[(1 - \beta_m) f_{\rm pg} + \sum_{i=1}^6 f_{img} \beta_{im} \right].$$
(35.18)

A képletek egyszerűsítése érdekében operátoros jelölést vezetünk be:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{D}}_g \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t) + Q_g(\mathbf{r}, t) + S_g(\mathbf{r}, t), \qquad (35.19a)$$

ahol a destrukciós operátor jelentését (31.1a)-ból olvashatjuk ki:

$$\hat{\mathbf{D}}_{g}\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t) = \operatorname{div}\left[D_{g}(\mathbf{r})\operatorname{grad}\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t)\right] - \left[\boldsymbol{\Sigma}_{g}^{a}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\Sigma}_{g}^{R}(\mathbf{r})\right]\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t).$$
(35.19b)

A hátramutató séma szerint a $t = t_k$ időpontra felírt egyenletet ekkor az

$$\frac{1}{v_g} \frac{\boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_k) - \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_{k-1})}{\Delta t_k} \cong \hat{\mathbf{D}}_g \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_k) + Q_g(\mathbf{r}, t_k) + S_g(\mathbf{r}, t_k)$$
(35.20a)

alakban írhatjuk fel, amelynek a (formális) megoldása

$$\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t_{k}) \cong \left(\frac{\hat{\mathbf{I}}}{v_{g}\Delta t_{k}} - \hat{\mathbf{D}}_{g}\right)^{-1} \left(\frac{\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},t_{k-1})}{v_{g}\Delta t_{k}} + Q_{g}(\mathbf{r},t_{k}) + S_{g}(\mathbf{r},t_{k})\right).$$
(35.20b)

 $\hat{\mathbf{I}}$ -vel jelöltük az egységoperátort.

Mivel a $Q_g(\mathbf{r}, t_k)$ forrástag (35.16) szerint függ a $\Phi_g(\mathbf{r}, t_k)$ fluxustól, ez a formula egy forrásiteráció. Ezt a $t = t_{k-1}$ korábbi időpontra már kiszámolt $Q_g(\mathbf{r}, t_{k-1})$ forrással indítjuk, és a (35.20a) egyenletet $\Phi_g(\mathbf{r}, t_k)$ -ra mint ismeretlenre megoldjuk. Miután ezt g = 1, 2, ..., G-ra végrehajtottuk, újraszámoljuk a $Q_g(\mathbf{r}, t_k)$ forrást, és a (35.20a) egyenletet ismét megoldjuk $\Phi_g(\mathbf{r}, t_k)$ -ra, és így tovább, amíg a forrás nem konvergál. A konvergencia vizsgálatához fel kell még írnunk a (35.17) egyenlet végesdifferencia-alakját is:

$$\frac{C_{im}(\mathbf{r},t_k)-C_{im}(\mathbf{r},t_{k-1})}{\Delta t_k}\cong -\lambda_{im}C_{im}(\mathbf{r},t_k)+h_m\beta_{im}\sum_{g'=1}^G \nu\Sigma_{g'}^{f}\boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r},t_k),$$

amely a

$$C_{im}(\mathbf{r}, t_k) \cong \frac{C_{im}(\mathbf{r}, t_{k-1}) + h_m \beta_{im} q(\mathbf{r}, t_k) \Delta t_k}{1 + \lambda_{im} \Delta t_k}$$

iterációs képletre vezet. Itt bevezettük a

$$q(\mathbf{r},t_k) = \sum_{g'=1}^{G} \nu \Sigma_{g'}^{f} \boldsymbol{\Phi}_{g'}(\mathbf{r},t_k)$$
(35.21)

jelölést. Ha ezt (35.16)-be helyettesítjük, megkapjuk a forrásiteráció végső képletét:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{g}(\mathbf{r},t_{k}) &= \sum_{g'\neq g} \mathcal{L}_{g'\rightarrow g} \boldsymbol{\varPhi}_{g'}(\mathbf{r},t_{k}) + \sum_{m} h_{m} (1-\beta_{m}) f_{pg} q(\mathbf{r},t_{k}) + \\ &+ \sum_{m} \sum_{i=1}^{6} f_{img} \lambda_{im} \frac{C_{im}(\mathbf{r},t_{k-1}) + h_{m} \beta_{im} q(\mathbf{r},t_{k}) \Delta t_{k}}{1+\lambda_{im} \Delta t_{k}} \,. \end{aligned}$$

Az alábbiakban ennek a konvergenciáját fogjuk megvizsgálni. A forrás utolsó két tagja ismert, amikor (35.20b) szerint a $t = t_k$ időponthoz tartozó fluxust számoljuk. Ehhez a számoláshoz szükség van egy belső iterációra is, amely a

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{I}}}{v_g \Delta t_k} - \hat{\mathbf{D}}_g\right) \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_k) = \frac{\boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_{k-1})}{v_g \Delta t_k} + Q_g(\mathbf{r}, t_k) + S_g(\mathbf{r}, t_k)$$

egyenlet megoldását jelenti [vö. (35.20a)]. Itt a jobb oldalon álló mennyiségek ismertek. Ha a destrukciós operátort a (35.19b) képletből ide behelyettesítjük, a megoldandó egyenletre a következőt kapjuk:

$$div \left[D_g(\mathbf{r}) \operatorname{grad} \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_k) \right] - \left[\frac{1}{v_g \Delta t_k} + \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\Sigma}_g^{\mathrm{R}}(\mathbf{r}) \right] \boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_k) + \frac{\boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_{k-1})}{v_g \Delta t_k} + Q_g(\mathbf{r}, t_k) + S_g(\mathbf{r}, t_k) = 0,$$

ami ugyanolyan alakú, mint a (31.2) egyenlet, ha $\Sigma_g^a(\mathbf{r})$ helyére a $\left(\frac{1}{v_g \Delta t_k} + \Sigma_g^a(\mathbf{r})\right)$

kifejezést helyettesítjük.

Átrendezés után a (35.20a) jobb oldalán található tagok a következő három típusba sorolhatók. Először vannak az ismert tagok:

$$s_g(\mathbf{r}, t_k) = \frac{\boldsymbol{\Phi}_g(\mathbf{r}, t_{k-1})}{\boldsymbol{v}_g(\mathbf{r})\Delta t_k} + \sum_m \sum_{i=1}^6 f_{img} \lambda_{im} \frac{C_{im}(\mathbf{r}, t_{k-1})}{1 + \lambda_{im}\Delta t_k} + S_g(\mathbf{r}, t_k); \qquad (35.22a)$$

másodszor a q forrással arányos tagok:

$$q(\mathbf{r}, t_k) \sum_{m} h_m(\mathbf{r}) \left\{ (1 - \beta_m) f_{pg} + \sum_{i=1}^{6} f_{img} \beta_{im} \frac{\lambda_{im} \Delta t_k}{1 + \lambda_{im} \Delta t_k} \right\} = q(\mathbf{r}, t_k) \left[f_{sg} - \sum_{m} h_m(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^{6} \frac{f_{img} \beta_{im}}{1 + \lambda_{im} \Delta t_k} \right];$$
(35.22b)

harmadszor a Φ_g -ben lineáris tagok:

$$\hat{\mathbf{D}}_{g}\boldsymbol{\varPhi}_{g}(\mathbf{r},t_{k}) + \sum_{g'\neq g} \boldsymbol{\varSigma}_{g'\rightarrow g}(\mathbf{r})\boldsymbol{\varPhi}_{g'}(\mathbf{r},t_{k}).$$
(35.22c)

Végeredményben a következő külső iterációs képletre jutunk:

$$\frac{\boldsymbol{\Phi}_{g}^{(l)}(\mathbf{r},t_{k})}{\boldsymbol{v}_{g}(\mathbf{r})\Delta t_{k}} = s_{g}(\mathbf{r},t_{k}) + q^{(l-1)}(\mathbf{r},t_{k}) \left[f_{sg} - \sum_{m} h_{m}(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^{6} \frac{f_{img}\beta_{im}}{1 + \lambda_{im}\Delta t_{k}} \right] + \hat{\mathbf{D}}_{g} \boldsymbol{\Phi}_{g}^{(l)}(\mathbf{r},t_{k}) + \sum_{g' \neq g} \boldsymbol{\Sigma}_{g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_{g'}^{(l)}(\mathbf{r},t_{k}).$$
(35.23)

A belső iteráció ennek az egyenletnek $\Phi_g^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$ -re való megoldását jelenti. Alkalmazhatjuk tehát a 3.2. alfejezetben bemutatott végesdifferencia-egyenleteket és a 3.4. alfejezetben tárgyalt iterációt. A külső iteráció megfelelő lépése (35.21) mintájára

$$q^{(l)}(\mathbf{r},t_k) = \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_g^{\mathrm{f}}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_g^{(l)}(\mathbf{r},t_k).$$

Képzeljük el, hogy a (35.22) és (35.23) egyenleteket már átírtuk véges differenciákra. Bevezetjük a következő jelöléseket. Az $G \times G$ rendű **A** hipermátrix főátlójában vannak a $\hat{\mathbf{D}}_g$ operátornak megfelelő \mathbf{D}_g mátrixok, a többi blokkok pedig a lassulást leíró $\mathbf{B}_{g' \to g}$ mátrixok:

$$\left[\mathbf{AF}\right]_g = \mathbf{D}_g \vec{\mathbf{\Phi}}_g + \sum_{g' \neq g} \mathbf{B}_{g' \rightarrow g} \vec{\mathbf{\Phi}}_{g'} ,$$

ahol a $\bar{\Phi}_g$ vektorok a *g*-edik csoporthoz a rácspontokban tartozó fluxusokat egyesítik egyetlen vektorban, **F** pedig a belőlük képzett hipervektor a g = 1, 2, ..., G energia-csoportok szerint. Az $1/v_g$ mennyiségeknek az egyes rácspontokhoz tartozó

$$v'_g = 1 / \int \frac{1}{v_g} \mathrm{d} V$$

integráljait egyesítjük a V_g diagonális mátrixokban, amelyekből a g = 1, 2, ..., Genergiacsoportok szerint megalkotjuk a V diagonális hipermátrixot. A produkciós operátor ebben az esetben

$$[\mathbf{PF}]_g = f_{sg} \int q(\mathbf{r}, t_k) \mathrm{d}V - \sum_m \int q(\mathbf{r}, t_k) h_m(\mathbf{r}) \mathrm{d}V \sum_{i=1}^6 \frac{f_{img} \beta_{im}}{1 + \lambda_{im} \Delta t_k},$$

ahol a térfogati integrálás a véges differenciákra való áttéréskor végzendő integrálást jelenti az **r**-nél levő rácspont körüli térrészben. Végül a (35.22a) által definiált s_g mennyiségekből megalkotjuk az **S** vektort. Ezekkel a jelölésekkel a (35.23) külső iteráció az alábbi vektoregyenlettel írható le:

$$\frac{\mathbf{V}^{-1}\mathbf{F}_l}{\Delta t_k} = \mathbf{S} + \mathbf{A}\mathbf{F}_l + \mathbf{P}\mathbf{F}_{l-1} \,.$$

Ha az iteráció határértékeként kapott megoldást **F**-fel jelöljük, akkor a $\varphi_l = \mathbf{F} - \mathbf{F}_l$ maradéktag a következő egyenletet elégíti ki:

$$\frac{\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\varphi}_l}{\Delta t_k} = \mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}_l + \mathbf{P}\boldsymbol{\varphi}_{l-1},$$

vagyis

$$\mathbf{\phi}_l = - \left(\mathbf{A} - \frac{\mathbf{V}^{-1}}{\Delta t_k} \right)^{-1} \mathbf{P} \mathbf{\phi}_{l-1} \, .$$

Az iterációs mátrix sajátérték-egyenlete

$$-\left(\mathbf{A}-\frac{\mathbf{V}^{-1}}{\Delta t_k}\right)^{-1}\mathbf{P}\boldsymbol{\varphi}=\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\varphi}$$

vagy átrendezve

$$\frac{V^{-1}\boldsymbol{\varphi}}{\Delta t_k} = \mathbf{A}\boldsymbol{\varphi} + \frac{1}{\mu} \mathbf{P}\boldsymbol{\varphi} \,.$$

Amikor $\Delta t_k \rightarrow +\infty$, visszakapjuk a sztatikus sajátérték-egyenletet:

$$0 = \mathbf{A}\boldsymbol{\varphi}_{\mathrm{s}} + \frac{1}{k_{\mathrm{eff}}} \mathbf{P}_{\mathrm{s}} \boldsymbol{\varphi}_{\mathrm{s}} \,.$$

Ez azt jelenti, hogy $\mu \rightarrow k_{\text{eff}}$, amikor $\Delta t_k \rightarrow +\infty$, vagyis szuperkritikus reaktorra a Δt_k időlépés nem lehet akármekkora, ugyanis ekkor a μ sajátérték az egységnél nagyobb lehet, vagyis a külső iteráció akár divergálhat is. A másik végletben, vagyis $\Delta t_k \rightarrow 0$ ra az egyenlet így írható:

$$\mu \mathbf{\phi} \approx \Delta t_k \mathbf{V} \mathbf{P} \mathbf{\phi} \,,$$

tehát ebben a határesetben $\mu \rightarrow 0$. Közbenső értékekre a lineáris perturbációelméletet alkalmazzuk. Az operátorok perturbációja

$$\left[\delta \mathbf{PF}\right]_{g} = -\sum_{m} \int q(\mathbf{r}, t_{k}) h_{m}(\mathbf{r}) \mathrm{d} V \sum_{i=1}^{6} \frac{f_{img} \beta_{im}}{1 + \lambda_{im} \Delta t_{k}}$$

és

$$-\delta \mathbf{A} = \frac{\mathbf{V}^{-1}}{\Delta t_k},$$

amivel

$$\frac{1}{\mu} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} = \frac{\left(\psi^+, \left(\frac{\mathbf{V}^{-1}}{\Delta t_k} - \frac{1}{k_{\text{eff}}}\delta\mathbf{P}\right)\varphi_{\text{s}}\right)}{\left(\psi^+, \mathbf{P}_{\text{s}}\varphi_{\text{s}}\right)}.$$

Az ismert definíciók alapján ez a következőképpen írható:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} + \frac{\Lambda}{\Delta t_k} + \sum_m \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_{im}^{\text{eff}}}{1 + \lambda_{im} \Delta t_k}.$$
(35.24)

Rögtön látszik, hogy $\mu < k_{\text{eff}}$. Szubkritikus rendszerben tehát a külső iteráció mindig konvergens.

Legyen most $k_{\text{eff}} > 1$. Ebben az esetben az iteráció csak akkor lesz konvergens, ha Δt_k elegendően kicsi. Keresünk egy felső korlátot Δt_k számára. A konvergenciához

144
az szükséges, hogy a (35.24) egyenlet jobb oldalán szereplő kifejezés 1-nél nagyobb legyen. Ebből következik, hogy a felső határnak ki kell elégítenie a következő egyenletet:

$$\Delta t_{\max} = \frac{\Lambda}{\rho - \sum_{m} \sum_{i=1}^{6} \frac{\beta_{im}^{\text{eff}}}{1 + \lambda_{im} \Delta t_{\max}}},$$

ami nem más, mint a reciprokóra egyenlet, ha azt mondjuk, hogy Δt_{max} legyen egyenlő $T_{2x}/\ln 2$ -vel. 1 \$-nál nagyobb reaktivitások esetében jó közelítés a következő:

$$\Delta t_{\max} \approx \frac{\Lambda}{\rho - \beta_{\text{eff}}} = \frac{1}{\alpha_{\text{crit}} \left(\frac{\rho}{\beta_{\text{eff}}} - 1\right)}.$$

Ez egyébként nem nagy megszorítás, hiszen egy megszaladásban úgysem választ az ember a reaktorperiódusnál nagyobb időlépést. Az viszont figyelemreméltó, hogy ennél hosszabb időlépés mellett a külső iteráció nem is konvergál.

A perturbációelmélet jelentősége a (35.24) képlet levezetése, amely adott Δt_k ra lehetővé teszi a μ sajátérték kiszámítását, vagy megfordítva: annak a Δt_k -nak a meghatározását, amellyel egy kívánt sajátértéket be tudunk állítani. Tételezzük fel, hogy valamilyen Δt mellett *N* külső iterációt kellett végezni. Ha az iteráció pontossága ε , akkor ez azt jelenti, hogy

$$\mu^N = \varepsilon, \qquad N = \frac{\ln \varepsilon}{\ln \mu},$$

ahol μ (35.24) szerint tartozik Δt -hez. Ugyanezt a Δt időlépést $\Delta t/n$ lépésekben is megtehettük volna. Ekkor minden lépésben a (35.24) szerint számolt

$$\frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} + \frac{n\Lambda}{\Delta t} + \sum_m \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_{im}^{\text{eff}}}{1 + \lambda_{im} \,\Delta t/n}$$

sajátérték határozza meg a külső iterációk $\ln \epsilon / \ln \mu_n$ számát. Az időlépések csökkentése akkor éri meg, ha

$$n \frac{\ln \varepsilon}{\ln \mu_n} \le \frac{\ln \varepsilon}{\ln \mu}$$
, vagyis $\mu_n \le \mu^n$.

Természetesen itt csak a számítási idő szempontjait vettük figyelembe. A számítási pontosság növelése szempontjából minden esetben előnyös a lépésköz csökkentése. Végül megjegyezzük, hogy néhány iterációs lépést meg lehet takarítani, ha az első lépésben az előremutató séma szerint számolunk.

4. P_L közelítés

A P_L közelítést időtől független egyenletekre dolgozzuk ki, mert ez matematikailag egyszerűbb. Az elmondottakat minden különösebb nehézség nélkül lehet időfüggő esetekre kiterjeszteni.

4.1. A gömbfüggvények szerint való sorfejtés

A P_L közelítés azon alapul, hogy a szögfüggő fluxust a gömbfüggvények szerint sorba fejtjük:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(\mathbf{r}, E) Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}), \qquad (41.1)$$

ahol nem-negatív *m*-re a gömbfüggvény:

$$Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} \frac{(-\sin\theta)^m}{\ell! 2^\ell} \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \frac{d^{\ell+m}(\cos^2\theta - 1)^\ell}{d(\cos\theta)^{\ell+m}}, \qquad (41.2a)$$

Negatív *m*-re a gömbfüggvényeket a

$$Y_{\ell,-m}(\mathbf{\Omega}) = (-1)^m Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega})$$
(41.2b)

képlettel definiáljuk, ahol a * komplex konjugáltat jelent. A különböző indexű gömbfüggvények egymásra ortogonálisak:

$$\int_{0}^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_{0}^{2\pi} Y_{\ell'm'}(\theta,\varphi) Y_{\ell m}^{*}(\theta,\varphi) \mathrm{d}\varphi = \frac{4\pi}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$
(41.3)

Az m = 0 indexű gömbfüggvények a Legendre-polinomok:

$$Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\ell! 2^{\ell}} \frac{d^{\ell} \left(\cos^{2} \theta - 1\right)^{\ell}}{d \left(\cos \theta\right)^{\ell}} = P_{\ell} \left(\cos \theta\right).$$
(41.4)

A gömbfüggvények a következő rekurziós képleteket elégítik ki (4. függelék):

$$(2\ell+1)\cos\theta Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \sqrt{(\ell+1)^2 - m^2} Y_{\ell+1,m}(\theta,\varphi) + \sqrt{\ell^2 - m^2} Y_{\ell-1,m}(\theta,\varphi),$$
(41.5a)

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{i\varphi}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = (41.5b) = -\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}Y_{\ell+1,m+1}(\theta,\varphi) + \sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}Y_{\ell-1,m+1}(\theta,\varphi),$$

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{-i\varphi}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) =$$
(41.5c)

$$=-\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}Y_{\ell-1,m-1}(\theta,\varphi)+\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}Y_{\ell+1,m-1}(\theta,\varphi).$$

A gömbfüggvényekre vonatkozó rekurziós képletek befejezéséül felírjuk az ún. *addíciós tételt*, amely $\mu_0 = \cos \theta_0 = \Omega \Omega'$ Legendre-polinomjait a gömbfüggvényekkel öszszekapcsolja:

$$P_{\ell}(\cos\theta_0) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}').$$
(41.6)

Az ortogonalitás miatt a (41.1) sorfejtés együtthatóit a

$$\boldsymbol{\varPhi}_{\ell m}(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} \boldsymbol{\varPhi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \int_{0}^{2\pi} d\boldsymbol{\varphi} \int_{0}^{\pi} \boldsymbol{\varPhi}(\mathbf{r}, E, \theta, \varphi) Y_{\ell m}^{*}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta$$
(41.7)

integrálok adják. A szórási magfüggvényt szintén sorba fejtjük:

$$\Sigma_{s}(E' \to E, \mu_{0}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) P_{\ell}(\mu_{0}), \qquad (41.8)$$

ahol $\mu_0 = \Omega \Omega'$ a szórási szög koszinusza. A (41.6) addíciós képlet és (41.7) felhasználásával a transzportegyenletben szereplő szórási integrál szintén sorba fejthető a gömbfüggvények szerint:

$$\int_{4\pi} \Sigma_{s}(E' \to E, \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}') \mathcal{P}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' =$$

$$= \int_{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}') \mathcal{P}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' =$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell}(E' \to E) \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{P}_{\ell m}(\mathbf{r}, E') Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}). \qquad (41.9)$$

A diffúzióelméletben megszokott mennyiségek az itteni sorfejtési együtthatókkal az alábbi kapcsolatban vannak. Mivel $Y_{00}(\mathbf{\Omega}) = 1$, a fluxus a $\mathcal{P}_{00}(\mathbf{r}, E)$ függvény, hiszen:

$$\boldsymbol{\Phi}_{00}(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) Y_{00}^*(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E) .$$

A neutronárammal való összefüggést az $\ell = 1$ indexű gömbfüggvényeken keresztül kapjuk a következő összefüggések alapján:

$$Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \frac{e^{-i\varphi}\sin\theta}{\sqrt{2}}, \qquad Y_{10}(\theta,\varphi) = \cos\theta, \qquad Y_{11}(\theta,\varphi) = -\frac{e^{i\varphi}\sin\theta}{\sqrt{2}}.$$

Ebből következnek az Ω vektor komponensei:

$$\begin{split} \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{x}} &= \sin\theta\cos\varphi = \frac{Y_{\mathrm{l},-1}(\theta,\varphi) - Y_{\mathrm{l}1}(\theta,\varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{Y_{\mathrm{l},-1}^{*}(\theta,\varphi) - Y_{\mathrm{l}1}^{*}(\theta,\varphi)}{\sqrt{2}},\\ \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{y}} &= \sin\theta\sin\varphi = \frac{Y_{\mathrm{l}1}(\theta,\varphi) + Y_{\mathrm{l},-1}(\theta,\varphi)}{i\sqrt{2}} = -\frac{Y_{\mathrm{l},-1}^{*}(\theta,\varphi) + Y_{\mathrm{l}1}^{*}(\theta,\varphi)}{i\sqrt{2}},\\ \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{z}} &= \cos\theta = Y_{\mathrm{l}0}(\theta,\varphi), \end{split}$$

amivel:

$$J_{x} = \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \Omega_{x} d\mathbf{\Omega} = \frac{\Phi_{1,-1}(\mathbf{r}, E) - \Phi_{11}(\mathbf{r}, E)}{\sqrt{2}}, \qquad (41.10a)$$

$$J_{y} = \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \Omega_{y} d\mathbf{\Omega} = -\frac{\Phi_{1,-1}(\mathbf{r}, E) + \Phi_{11}(\mathbf{r}, E)}{i\sqrt{2}}, \qquad (41.10b)$$

$$J_{z} = \int_{4\pi}^{\pi} \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \Omega_{z} d\mathbf{\Omega} = \Phi_{10}(\mathbf{r}, E).$$
(41.10c)

4.2. P_L egyenletek több dimenzióban

A P_L egyenleteket két többdimenziós geometriára vezetjük le:

- X–Y–Z és
- henger.

Az előbbi tekinthető az általános esetnek, bár csak abban az esetben célszerű alkalmazni, amikor a vizsgált rendszert a derékszögű koordinátatengelyekkel párhuzamos síkok osztják homogén tartományokra.

4.2.1. P_L egyenletek az általános esetben

Ha a (41.1) sorfejtést behelyettesítjük a transzportegyenletbe, majd beszorzunk $Y_{\ell m}^*(\Omega)$ -val és integrálunk Ω szerint, megkapjuk a P_L egyenleteket. Először az Ω grad Φ tagra vonatkozóan végezzük el az integrálást. Az alábbi képletekben az $\ell = 0$ esetben az (ℓ -1) indexű tagok értelemszerűen eltűnnek.³³ A *z* komponensre vonatkozóan a (41.5a) rekurziós képletet alkalmazzuk:

$$\begin{split} \int_{4\pi} \Omega_z \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}{\partial z} Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{2\ell'+1}{4\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \Phi_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial z} \int_{4\pi} \cos \theta \, Y_{\ell'm'}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{4\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \Phi_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial z} \bullet \\ &\bullet \int_{4\pi} \left(\sqrt{(\ell'+1)^2 - m'^2} Y_{\ell'+1,m'}(\mathbf{\Omega}) + \sqrt{\ell'^2 - m'^2} Y_{\ell'-1,m'}(\mathbf{\Omega}) \right) Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \frac{1}{2\ell+1} \left(\sqrt{\ell^2 - m^2} \, \frac{\partial \Phi_{\ell-1,m}(\mathbf{r}, E)}{\partial z} + \sqrt{(\ell+1)^2 - m^2} \, \frac{\partial \Phi_{\ell+1,m}(\mathbf{r}, E)}{\partial z} \right). \end{split}$$

Az x komponens esetében a (41.5b) és (41.5c) képletekből indulhatunk ki, figyelembe véve, hogy

$$\Omega_{\rm x} = \sin\theta\cos\varphi = \sin\theta\frac{{\rm e}^{{\rm i}\varphi}+{\rm e}^{-{\rm i}\varphi}}{2}.$$

³³ Ezt a megjegyzést mindegyik egyenlethez hozzá fogjuk fűzni annak érdekében, hogy használatukat függetlenítsük levezetésüktől.

Ezzel:

$$\begin{split} &\int_{4\pi} \Omega_{\mathbf{x}} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}{\partial \mathbf{x}} Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{2\ell'+1}{4\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sin \boldsymbol{\theta} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\varphi}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\varphi}}}{2} Y_{\ell'm'}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= -\sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{8\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sqrt{(\ell' + m' + 2)(\ell' + m' + 1)} Y_{\ell'+1,m'+1}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} - \\ &+ \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{8\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sqrt{(\ell' - m')(\ell' - m' - 1)} Y_{\ell'-1,m'+1}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} + \\ &+ \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{8\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sqrt{(\ell' - m' + 2)(\ell' - m' + 1)} Y_{\ell'+1,m'-1}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} - \\ &- \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{8\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sqrt{(\ell' + m')(\ell' + m' - 1)} Y_{\ell'-1,m'-1}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell + m)(\ell + m - 1)}}{\partial \mathbf{x}} \int_{4\pi} \sqrt{(\ell' - m' + 2)(\ell' - m' + 1)} Y_{\ell'-1,m'-1}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell - m)(\ell - m - 1)}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell-1,m-1}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell - m + 2)(\ell - m + 1)}}{2\ell + 1} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell-1,m+1}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}} - \\ &- \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell + m + 2)(\ell + m + 1)}}{2\ell + 1} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\ell-1,m+1}(\mathbf{r}, E)}{\partial \mathbf{x}}. \end{split}$$

Az

$$\Omega_{y} = \sin\theta\sin\varphi = \sin\theta\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$$

képletből kiindulva analóg levezetéssel kapjuk az y komponensre vonatkozó összefüggést. A végeredmény:

$$\begin{split} &\int_{4\pi} \Omega_{y} \frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})}{\partial y} Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{2\ell'+1}{4\pi} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}_{\ell'm'}(\mathbf{r}, E)}{\partial y} \int_{4\pi} \sin \boldsymbol{\varTheta} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\varphi}} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\varphi}}}{2\mathrm{i}} Y_{\ell'm'}(\mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}}{2\ell+1} \frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}_{\ell-1,m-1}(\mathbf{r}, E)}{\partial y} - \\ &\quad -\frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}}{2\ell+1} \frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}_{\ell+1,m-1}(\mathbf{r}, E)}{\partial y} + \\ &\quad +\frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}}{2\ell+1} \frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}_{\ell-1,m+1}(\mathbf{r}, E)}{\partial y} - \end{split}$$

$$-\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\sqrt{\ell+m+2}\ell+m+1}{2\ell+1}\frac{\partial \varPhi_{\ell+1,m+1}(\mathbf{r},E)}{\partial y}.$$

A transzportegyenlet többi tagjának az integrálja már egyszerűen adódik. A rugalmas szórási tag integrálját (41.9) alapján kapjuk:

$$\begin{split} &\int_{4\pi 4\pi} \Sigma_{s} \left(E' \to E, \mathbf{\Omega} \mathbf{\Omega}' \right) \mathcal{P} \left(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}' \right) d\mathbf{\Omega}' Y_{\ell m}^{*} \left(\mathbf{\Omega} \right) d\mathbf{\Omega} = \\ &= \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{2\ell' + 1}{4\pi} \Sigma_{s\ell'} \left(E' \to E \right) \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \mathcal{P}_{\ell' m'} \left(\mathbf{r}, E' \right) \int_{4\pi} Y_{\ell' m'} \left(\mathbf{\Omega} \right) Y_{\ell m}^{*} \left(\mathbf{\Omega} \right) d\mathbf{\Omega} = \\ &= \Sigma_{s\ell} \left(E' \to E \right) \Phi_{\ell m} \left(\mathbf{r}, E' \right). \end{split}$$

Ennek *E*' szerinti integrálja adja a rugalmas szórások teljes számát az (ℓ , *m*) indexű komponensre vonatkozóan. A rugalmatlan szórás és a hasadás izotrop, tehát a rájuk vonatkozóan csak az $\ell = m = 0$ indexű tagok maradnak meg. Ezzel a gömbfüggvények szerinti sorfejtési együtthatókra vonatkozó egyenletek végső alakja:³⁴

$$\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,m+1}(\mathbf{r},E)}{\partial x} + i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,m+1}(\mathbf{r},E)}{\partial y} \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,m-1}(\mathbf{r},E)}{\partial x} + i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,m-1}(\mathbf{r},E)}{\partial y} \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,m+1}(\mathbf{r},E)}{\partial x} - i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,m+1}(\mathbf{r},E)}{\partial y} \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,m-1}(\mathbf{r},E)}{\partial x} - i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,m-1}(\mathbf{r},E)}{\partial y} \right) - \\ - \frac{\sqrt{\ell^2 - m^2}}{2\ell+1} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,m}(\mathbf{r},E)}{\partial z} - \frac{\sqrt{(\ell+1)^2 - m^2}}{2\ell+1} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,m}(\mathbf{r},E)}{\partial z} - \mathcal{E}_{t}(\mathbf{r},E) \boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(\mathbf{r},E) + \\ + \int_{0}^{\infty} \mathcal{E}_{s\ell}(\mathbf{r},E' \to E) \boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(\mathbf{r},E') dE' + \delta_{\ell 0} \delta_{m 0} \int_{0}^{\infty} \mathcal{E}_{in}(\mathbf{r},E' \to E) \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r},E') dE' + \\ + \delta_{\ell 0} \delta_{m 0} \frac{f(E)}{k_{\text{eff}}} \int_{0}^{\infty} v \mathcal{E}_{f}(\mathbf{r},E') \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r},E') dE' = 0.$$

$$(\ell = 0, 1, 2, ...)(m = -\ell, -\ell+1, ..., \ell-1, \ell)$$

 $\ell = 0$ esetében az (ℓ -1) indexű tagok eltűnnek. Ebből úgy kapjuk a P_L egyenleteket, hogy elhagyjuk az $\ell \ge L$ indexű függvényeket, ami annak felel meg, hogy a (41.1) alatti sorfejtést levágjuk az L indexű tagnál:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \cong \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \boldsymbol{\Phi}_{\ell m}(\mathbf{r}, E) Y_{\ell m}(\mathbf{\Omega}).$$
(42.2)

³⁴ Ezeknek az egyenleteknek az alakja más Weinberg-Wigner és Stamm'ler könyvében: az (ℓ +1) indexű tagoknál a nevező (2ℓ +3), az (ℓ -1) indexűeknél pedig (2ℓ -1). Ezek ismeretlen eredetű sajtóhibák. (4.2.1) levezetését azért részleteztük ennyire, hogy megalapozzuk ezt az állítást.

A (42.1) egyenletrendszert – a differenciális és az integrális alak mellett [Brf] – nevezhetjük a *transzportegyenlet harmadik alakjá*nak is, hiszen megoldásával – elvileg – tetszőleges pontossággal kiszámíthatjuk a szögfüggő fluxust. A fenti levezetések megismételhetők az időfüggő transzportegyenletre vonatkozóan is, de a megfelelő végeredményt nem írjuk fel.

Befejezésül tisztáznunk kell a határfeltételeket. Az $\ell \ge L$ indexű függvények (42.2) szerinti elhagyásának ugyanis következményei vannak a határfeltételekre. A transzportegyenlethez tartozó határfeltétel megkövetelné, hogy a fluxus minden befelé mutató neutronirányra eltűnjön:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}_{s}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) = 0, \qquad \text{ha} \qquad \boldsymbol{\Omega} \mathbf{N}_{s} < 0, \qquad (42.3)$$

ahol \mathbf{r}_s a vákuummal határos konvex felület valamelyik pontjának helyvektora, \mathbf{N}_s a felület kifelé mutató normálisa ebben a pontban. Mivel a gömbfüggvényekben $\cos\theta$ polinomjai szerepelnek, továbbá $P_L(x)$ *L*-edfokú polinom, a fluxusnak (42.2) alatti közelítése $\cos\theta$ -nak szintén *L*-edfokú polinomja. Ha egy polinom egy véges intervallum minden pontjában eltűnik, a polinom minden együtthatója 0-val egyenlő, ami képtelenség, hiszen ekkor nem lenne kifelé irányuló neutronáramlás, márpedig ilyen áramlás van. Emiatt a túlságosan szigorú (42.3) határfeltételt enyhíteni kell. Két megoldás terjedt el a gyakorlatban:

Marshak-határfeltétel: megköveteljük, hogy a fluxus páratlan momentumai eltűnjenek a befelé mutató neutronirányokra:

$$\int_{\mathbf{\Omega}\mathbf{N}_{s}<0} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}_{s}, E, \mathbf{\Omega}) Y_{\ell m}^{*}(\mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = 0, \qquad \ell = 1, 3, ..., L.$$
(42.4)

Meg lehet mutatni, hogy minden ℓ -re van olyan, a $-\ell \le m \le \ell$ egyenlőtlenségnek eleget tevő *m*, amelyre ez a feltétel kielégíthető. Közülük általában a legkisebb abszolút értékűt szoktuk venni.³⁵ Ha a külső határfelület sík, akkor (42.4) egyszerűbb alakot vesz fel ($\mu = \Omega N_s$):

$$\int_{-1}^{0} \Phi(\mathbf{r}_{s}, E, \mu) P_{\ell}(\mu) d\mu = 0, \qquad \ell = 1, 3, ..., L.$$
(42.5)

Mivel a páratlan indexű Legendre-polinomok csak páratlan kitevőjű hatványokat tartalmaznak, ezt a határfeltételt írhatjuk a

$$\int_{-1}^{0} \Phi(\mathbf{r}_{s}, E, \mu) \mu^{\ell} d\mu = 0, \qquad \ell = 1, 3, ..., L \qquad (42.5a)$$

alakban is.

Mark-határfeltétel: megköveteljük, hogy a fluxus eltűnjön $\mu = \Omega N_s$ néhány kiszemelt értékére:

$$\Phi(0,\mu_j) = 0, \qquad j = 1, 2, ..., (L+1)/2.$$
 (42.6)

³⁵ Részletesebben lásd: B. Davison, Neutron Transport Theory, Oxford University Press (1958).

A (42.6) feltétel számára kiválasztott μ_j értékek a $P_{L+1}(\mu)$ Legendre-polinom negatív gyökei.³⁶ Mindkét határfeltétel megfogalmazása feltételezi, hogy *L* páratlan. Ez a gyakorlatban így is van: P₁, P₃, P₅, ... közelítéseket szokás alkalmazni, de nem használjuk a P₂, P₄, P₆, ... közelítéseket, bár ez matematikailag elképzelhető lenne. A dolog okára az S_N módszer tárgyalásakor térünk vissza. Végül megjegyezzük, hogy ezek a határfeltételek nem csak sík határfelületekre érvényesek, hanem átvihetők görbült felületekre – például – hengerekre is.

A vákuummal határos felületen felírt határfeltételeken kívül még megköveteljük, hogy mindegyik $\mathcal{D}_{\ell m}(\mathbf{r}, E)$ függvény folytonos legyen különböző anyagi minőségű közegek határfelületén. Ennek az az oka, hogy a $\mathcal{D}(\mathbf{r}, E, \Omega)$ függvény **r**-ben folytonos minden *E*-re és Ω -ra. (41.7) szerint ugyanennek érvényesnek kell maradnia a sorfejtési együtthatókra is.

Felmerül még a kérdés, hogy adott *L*-re melyik határfeltétel vezet pontosabb eredményekre. A tapasztalat szerint kis *L*-ekre a Marshak-, közepes *L*-ekre pedig a Mark-határfeltétel ad pontosabb eredményeket. Nagy *L*-ekre a kettő egyenértékű. A 3. fejezetben tárgyalt diffúzióegyenlet a P₁-közelítés egy speciális változata, ezért a diffúziós határfeltételeket a Marshak-határfeltételből célszerű levezetni.

4.2.2. PL egyenletek hengergeometriában

Tekintsünk egy hengerszimmetrikus rendszert, amelyet a henger tengelyével koaxiális hengerfelületek, illetve a tengelyre merőleges síkok osztanak homogén tartományokra. A szögfüggő fluxus ekkor a következő öt változó függvénye: (r,z,E,θ,φ) , ahol a θ és φ változókat az F1.1. fejezetben definiáljuk. Ilyen feltételek mellett a transzportegyenlet alakja a következő:

$$-\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial\Phi}{\partial r} + \sin\theta\frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} - \frac{\partial\Phi}{\partial z}\cos\theta - \Sigma_{t}\Phi + Q = 0.$$
(42.7)

Az egyszerűbb írásmód kedvéért elhagytuk az (r,z,E,μ,ϕ) argumentumokat. Mint korábban is, $Q(r,z,E,\theta,\phi)$ a lassulás és a hasadások által létrehozott forrás.

Ha itt elvégezzük a gömbfüggvények szerinti (41.1) sorfejtést, a 4.2.1. szakasz levezetései megismételhetők az r és z változó szerint, ha az ottani x változó szerepét most r játssza. A φ és y szerinti deriváltakat tartalmazó tagok kezelése azonban eltérő. Ha a (41.1) alatti sort φ szerint deriváljuk, a

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \Phi_{\ell m} \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta,\varphi)}{\partial \varphi} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \operatorname{im} \Phi_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

sor adódik. Ezzel (42.7) második tagja így írható:

$$\sin\theta \frac{\sin\varphi}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \sin\theta \sin\varphi \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{\mathrm{i}m}{r} \Phi_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta,\varphi).$$

Az x–y–z geometriában az y szerinti deriváltat tartalmazó tag – analóg módon – így írható:

³⁶ Ebben az a logika, hogy így a (4.2.2) levágott sor után következő első tag, az (L+1)-edik szintén 0 a kiválasztott μ -értékekre, amivel javul a közelítés.

$$-\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial\Phi}{\partial y} = -\sin\theta\sin\varphi\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{2\ell+1}{4\pi}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\frac{\partial\Phi_{\ell m}}{\partial y}Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

A (42.7) alatti második tag átalakítása tehát megegyezik az x–y–z geometria y-hoz tartozó tagjáéval, ha a $\partial/\partial y$ operátort a következővel helyettesítjük:

$$\frac{\partial \Phi_{\ell m}}{\partial y}$$
 helyére $-\frac{\mathrm{i}m}{r} \Phi_{\ell m}$

kerül. Ezzel (42.1)-nek a hengeres geometriához tartozó alakja:

$$\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varphi_{\ell+1,m+1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{m+1}{r} \varphi_{\ell+1,m+1}(r,z,E) \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \varphi_{\ell+1,m-1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{m-1}{r} \varphi_{\ell+1,m-1}(r,z,E) \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \varphi_{\ell-1,m+1}(r,z,E)}{\partial r} - \frac{m+1}{r} \varphi_{\ell-1,m+1}(r,z,E) \right) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varphi_{\ell-1,m-1}(r,z,E)}{\partial r} - \frac{m-1}{r} \varphi_{\ell-1,m-1}(r,z,E) \right) - \\ - \frac{\sqrt{\ell^2 - m^2}}{2\ell+1} \frac{\partial \varphi_{\ell-1,m}(r,z,E)}{\partial z} - \frac{\sqrt{(\ell+1)^2 - m^2}}{2\ell+1} \frac{\partial \varphi_{\ell+1,m}(r,z,E)}{\partial z} - \\ - \sum_{t} (r,z,E) \varphi_{\ell m}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(r,z,E') + E \right) \varphi_{\ell m}(r,z,E') dE' + \\ + \delta_{\ell 0} \delta_{m 0} \left(\int_{0}^{\infty} \Sigma_{in}(r,z,E') + E \right) \varphi(r,z,E') dE' + \frac{f(E)}{k_{\text{eff}}} \int_{0}^{\infty} v \Sigma_{f}(r,z,E') \varphi(r,z,E') dE' \right) = 0 \\ (\ell = 0, 1, 2, ...) \qquad (m = -\ell, -\ell + 1, ..., \ell) \qquad (42.8)$$

 $\ell = 0$ esetében az (ℓ -1) indexű tagok elmaradnak.

A negatív *m*-ekhez tartozó $\Phi_{\ell m}$ függvényeket nem kell kiszámítani, ugyanis fennáll:

$$\boldsymbol{\Phi}_{\ell,-m} = \left(-1\right)^m \boldsymbol{\Phi}_{\ell m},$$

ami a rendszer szimmetriájából következik. Ha ugyanis egy hengerszimmetrikus rendszert tükrözünk bármilyen, a henger tengelyét tartalmazó síkra, akkor a rendszer önmagába megy át. Az F1.1 ábráról leolvasható, hogy ennek következményeképpen

$$\Phi(r,\theta,\varphi) = \Phi(r,\theta,2\pi-\varphi).$$

(41.2a)-ból következik az

$$Y_{\ell m}(\theta, 2\pi - \varphi) = Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi)$$

összefüggés. Számítsuk ki ezek után a negatív indexű függvényeket (vö. (41.2b)):

$$\boldsymbol{\Phi}_{\ell,-m}(r) = \int_{0}^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_{0}^{2\pi} \boldsymbol{\Phi}(r,\theta,\varphi) Y_{\ell,-m}^{*}(\theta,\varphi) \mathrm{d}\varphi = (-1)^{m} \int_{0}^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_{0}^{2\pi} \boldsymbol{\Phi}(r,\theta,\varphi) Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \mathrm{d}\varphi$$

Ebben az integrálban végrehajtunk egy $\varphi = 2\pi - \varphi'$ helyettesítést, és figyelembe veszszük a szögfüggő fluxus fenti szimmetriáját:

$$\boldsymbol{\varPhi}_{\ell,-m}(r) = (-1)^m \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\varPhi}(r,\theta,2\pi-\varphi') Y_{\ell m}(\theta,2\pi-\varphi') \mathrm{d}\varphi' =$$
$$= (-1)^m \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\varPhi}(r,\theta,\varphi) Y_{\ell m}^*(\theta,\varphi) \mathrm{d}\varphi = (-1)^m \boldsymbol{\varPhi}_{\ell m}(r),$$

ahogy állítottuk. Amikor (42.8) szerint $m \ge 0$ -ra felírjuk a P_L egyenleteket, a negatív indexű $\Phi_{\ell m}$ függvények meg sem jelennek – az m = 0-hoz tartozók kivételével. m = 0esetében az m = -1 indexű függvények ugyan fellépnek, de egyszerűen helyettesíthetők a megfelelő m = 1 indexűek negatívjával, amivel az adódó egyenletrendszer zárttá válik az $m \ge 0$ indexű függvények tekintetében. A teljesség kedvéért az m = 0-hoz tartozó egyenleteket is felírjuk explicit formában:

$$\frac{\sqrt{(\ell+2)(\ell+1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \Phi_{\ell+1,1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{\Phi_{\ell+1,1}(r,z,E)}{r} \right) + \frac{-\sqrt{\ell(\ell-1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \Phi_{\ell-1,1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{\Phi_{\ell-1,1}(r,z,E)}{r} \right) + \frac{-\frac{\ell}{2\ell+1}}{2\ell+1} \frac{\partial \Phi_{\ell-1,0}(r,z,E)}{\partial z} - \frac{\ell+1}{2\ell+1} \frac{\partial \Phi_{\ell+1,0}(r,z,E)}{\partial z} - \frac{-\Sigma_{t}(r,z,E)\Phi_{\ell0}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(r,z,E' \to E)\Phi_{\ell0}(r,z,E')dE' + \frac{\delta_{\ell0}\left(\int_{0}^{\infty} \Sigma_{in}(r,z,E' \to E)\Phi(r,z,E')dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}}\int_{0}^{\infty} \nu \Sigma_{f}(r,z,E')\Phi(r,z,E')dE'\right) = 0.$$

$$(\ell = 0, 1, 2, ...) \qquad (42.9)$$

4.3. P_L egyenletek egy dimenzióban (1D geometriában)

A P_L egyenleteket gyakran egyetlen térbeli dimenzióban oldjuk meg. A teljes általánosságban felírt (42.1) egyenletek megoldására nincsenek közhasználatú programok. Az alábbiakban levezetjük a három egydimenziós (1D) geometriához tartozó egyenleteket, mert ezeken alapuló programok viszont léteznek.

4.3.1. P_L egyenletek 1D síkgeometriában

1D síkgeometriában a vizsgált rendszert az *x*- és *y*-irányban végtelen és a *z*tengelyre merőleges síkok osztják homogén tartományokra. Ekkor a $\Phi(\mathbf{r}, E, \Omega)$ szögfüggő fluxus csak a *z* koordinátától és az Ω vektor $\mu = \Omega_z$ komponensétől függ: $\Phi(z, E, \mu)$. Mivel:

$$\int_{0}^{2\pi} e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m0},$$

a $\Phi_{\ell m}$ függvények közül csak az m = 0 indexűek maradnak meg (vö. (41.7)). $\Phi_{\ell 0}(z)$ -t az 1D síkgeometriában egyszerűen csak $\Phi_{\ell}(z)$ -vel jelöljük. Így a (42.2) sorfejtés átmegy a Legendre-polinomok szerinti sorfejtésbe:

$$\boldsymbol{\Phi}(z, E, \mu) \cong \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} \boldsymbol{\Phi}_{\ell}(z, E) P_{\ell}(\mu).$$
(43.1)

A transzportegyenlet (42.1) szerinti alakja ebben az esetben lényegesen egyszerűsödik: egyrészt elhagyjuk az m indexet (pontosabban: m = 0-t helyettesítünk), másrészt csak a z térbeli koordinátát tartjuk meg:

$$-\frac{\ell}{2\ell+1}\frac{\partial \Phi_{\ell-1}(z,E)}{\partial z} - \frac{\ell+1}{2\ell+1}\frac{\partial \Phi_{\ell+1}(z,E)}{\partial z} - \Sigma_{t}(z,E)\Phi_{\ell}(z,E) +$$

$$+\int_{0}^{\infty}\Sigma_{s\ell}(z,E'\to E)\Phi_{\ell}(z,E')dE' + \delta_{\ell 0}\int_{0}^{\infty}\Sigma_{in}(z,E'\to E)\Phi(z,E')dE' +$$

$$+\delta_{\ell 0}\frac{f(E)}{k_{\rm eff}}\int_{0}^{\infty}\nu\Sigma_{f}(z,E')\Phi(z,E')dE' = 0, \quad (\ell=0,1,2,...). \quad (43.2)$$

 $\ell = 0$ estében az (ℓ -1) indexű tag elmarad. A megfelelő határfeltételeket megbeszéltük a 4.2. fejezetben (vö. (42.5) és (42.6) képletek).

4.3.2. P_L egyenletek gömbgeometriában

Gömbgeometriában a vizsgált rendszert koncentrikus gömbfelületek osztják homogén térfogatokra. Ekkor a szögfüggő fluxus az (r,E,μ) koordinátáktól függ, ahol r a középponttól mért távolság, μ pedig az **r** és Ω vektorok által bezárt szög koszinusza. Elképzelhető olyan eset is, amelyben Φ még a gömbi azimutszögtől is függ, sőt készült is ilyen program, de a kétdimenziós gömbgeometria csak nagyon speciális esetekben fordul elő. A gyakorlatban általában az *egydimenziós* gömbgeometriára vonatkozó P_L egyenleteket oldjuk meg. Népszerűségüket az magyarázza, hogy ez az egyetlen 1D geometria, amelyben reális rendszereket tudunk vizsgálni. A síkgeometriában például közelítő feltevéseket kellett tennünk az x és y koordinátáktól való függésre vonatkozóan. Például be kell vezetni a 4.3.5. szakaszban tárgyalt transzverzális áramot. Gömbgeometriában ilyesmire nincs szükség.

A transzportegyenlet gömbgeometriában a következő (vö. (F1.6)):

$$-\mu \frac{\partial \Phi(r, E, \mu)}{\partial r} - \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial \Phi(r, E, \mu)}{\partial \mu} - \Sigma_{t}(r, E) \Phi(r, E, \mu) + Q(r, E, \mu) = 0,$$

ahol $Q(r,E,\mu)$ a lassulás és a hasadások által létrehozott forrás. Ennek az egyenletnek mindegyik tagját – egy kivételével – ugyanúgy lehet sorba fejteni, ahogy a síkgeometria esetében tettük. A második tag sorfejtéséhez figyelembe kell vennünk az

$$(1-\mu^2)\frac{\mathrm{d}P_{\ell}(\mu)}{\mathrm{d}\mu} = \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \left(P_{\ell-1}(\mu) - P_{\ell+1}(\mu) \right)$$
(43.3)

differenciálegyenletet (4. függelék). Ha tehát alkalmazzuk a (43.1) szerinti sorfejtést, akkor a szóban forgó tagra kapjuk:

$$(1-\mu^2) \frac{\partial \Phi(r, E, \mu)}{\partial \mu} \cong \sum_{\ell'=0}^{L} \frac{2\ell'+1}{4\pi} \Phi_{\ell'}(r, E) (1-\mu^2) \frac{dP_{\ell'}(\mu)}{d\mu} =$$
$$= \sum_{\ell'=0}^{L} \frac{\ell'(\ell'+1)}{4\pi} \Phi_{\ell'}(r, E) (P_{\ell'-1}(\mu) - P_{\ell'+1}(\mu)).$$

Ha ezt beszorozzuk $P_{\ell}(\mu)$ -vel, majd integrálunk Ω -ra (d $\Omega = 2\pi d\mu$), a következő adódik:

$$2\pi \int_{-1}^{1} (1-\mu^2) \frac{\partial \Phi(r, E, \mu)}{\partial \mu} P_{\ell}(\mu) d\mu = \frac{(\ell+1)(\ell+2)}{2\ell+1} \Phi_{\ell+1}(r, E) - \frac{\ell(\ell-1)}{2\ell+1} \Phi_{\ell-1}(r, E)$$

Az egész egyenlet átalakításának az eredménye:

$$-\frac{\ell}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varPhi_{\ell-1}(r,E)}{\partial r} - \frac{\ell-1}{r} \varPhi_{\ell-1}(r,E) \right) - \frac{\ell+1}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varPhi_{\ell+1}(r,E)}{\partial r} + \frac{\ell+2}{r} \varPhi_{\ell+1}(r,E) \right) - \mathcal{L}_{t}(r,E) \varPhi_{\ell}(r,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(r,E' \to E) \varPhi_{\ell}(r,E') dE' + \mathcal{L}_{t}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') dE' + \mathcal{L}_{t}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') dE' + \mathcal{L}_{t}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E') \Phi_{\ell}(r,E')$$

 $\ell = 0$ estében az (ℓ -1) indexű tag elmarad.

4.3.3. PL egyenletek 1D hengergeometriában

Abban az esetben, amikor a vizsgált hengergeometriájú rendszer a z-irányban végtelen, továbbá a hatáskeresztmetszetek sem függnek z-től, a rendszer egydimenzióssá válik. Ekkor a (42.8) és (42.9) egyenletekben a z szerinti deriváltak elmaradnak. Így adódnak (428)-ból és (42.9)-ből az *1D hengergeometria* P_L egyenletei: $\underline{m > 0-ra}$:

$$\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \Phi_{\ell+1,m+1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{m+1}{r} \Phi_{\ell+1,m+1}(r,z,E) \right) + \\
+ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \Phi_{\ell+1,m-1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{m-1}{r} \Phi_{\ell+1,m-1}(r,z,E) \right) + \\
+ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}}{2\ell+1} \left(-\frac{\partial \Phi_{\ell-1,m+1}(r,z,E)}{\partial r} - \frac{m+1}{r} \Phi_{\ell-1,m+1}(r,z,E) \right) + \\
+ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \Phi_{\ell-1,m-1}(r,z,E)}{\partial r} - \frac{m-1}{r} \Phi_{\ell-1,m-1}(r,z,E) \right) - \\
- \Sigma_{t}(r,z,E) \Phi_{\ell m}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(r,z,E' \to E) \Phi_{\ell m}(r,z,E') dE' = 0 \quad (43.5a)$$

$$(\ell = 0, 1, 2, ...)$$
 $(m = 1, 2, ..., \ell)$

<u>*m* = 0-ra</u>:

$$\frac{\sqrt{(\ell+2)(\ell+1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varPhi_{\ell+1,1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{\varPhi_{\ell+1,1}(r,z,E)}{r} \right) + \frac{\sqrt{\ell(\ell-1)}}{2\ell+1} \left(\frac{\partial \varPhi_{\ell-1,1}(r,z,E)}{\partial r} + \frac{\varPhi_{\ell-1,1}(r,z,E)}{r} \right) + \frac{-\Sigma_{t}(r,z,E) \varPhi_{\ell 0}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(r,z,E' \to E) \varPhi_{\ell 0}(r,z,E') dE' + \delta_{\ell 0} \left(\int_{0}^{\infty} \Sigma_{in}(r,z,E' \to E) \varPhi(r,z,E') dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}} \int_{0}^{\infty} v \Sigma_{f}(r,z,E') \varPhi(r,z,E') dE' \right) = 0.$$

$$(\ell = 0, 1, 2, ...) \qquad (43.5b)$$

 $\ell = 0$ esetében az (ℓ -1) indexű tagok elmaradnak mindkét fajta egyenletből. Példaképpen felírjuk a P₃ egyenleteket 1D hengergeometriában:

$$\begin{split} &\sqrt{2} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{11}}{\partial r} + \frac{\varPhi_{11}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{00} + Q_{00} = 0 \,, \\ &\sqrt{\frac{2}{3}} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{21}}{\partial r} + \frac{1}{r} \varPhi_{21} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{10} + Q_{10} = 0 \,, \\ &\frac{1}{\sqrt{3}} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{22}}{\partial r} + \frac{2}{r} \varPhi_{22} \bigg) - \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{\partial \varPhi_{20}}{\partial r} + \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{\partial \varPhi_{00}}{\partial r} - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{11} + Q_{11} = 0 \,, \\ &\frac{2\sqrt{3}}{5} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{31}}{\partial r} + \frac{\varPhi_{31}}{r} \bigg) - \frac{\sqrt{2}}{5} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{11}}{\partial r} + \frac{\varPhi_{11}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{20} + Q_{20} = 0 \,, \\ &\frac{1}{\sqrt{5}} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{32}}{\partial r} + \frac{2\varPhi_{32}}{r} \bigg) - \frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{2}} \frac{\partial \varPhi_{30}}{\partial r} + \frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{2}} \frac{\partial \varPhi_{10}}{\partial r} - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{21} + Q_{21} = 0 \,, \\ &\sqrt{\frac{3}{10}} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{33}}{\partial r} + \frac{3\varPhi_{33}}{r} \bigg) + \frac{1}{5\sqrt{2}} \bigg(- \frac{\partial \varPhi_{31}}{\partial r} + \frac{\varPhi_{31}}{r} \bigg) + \frac{\sqrt{3}}{5} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{11}}{\partial r} - \frac{\varPhi_{11}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{22} + Q_{22} = 0 \,, \\ &- \frac{\sqrt{6}}{7} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{21}}{\partial r} + \frac{\varPhi_{21}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{30} + Q_{30} = 0 \,, \\ &\frac{1}{7\sqrt{2}} \bigg(- \frac{\partial \varPhi_{22}}{\partial r} + \frac{2\varPhi_{22}}{r} \bigg) + \frac{\sqrt{3}}{7} \frac{\partial \varPhi_{20}}{\partial r} - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{\mathfrak{31}} + Q_{\mathfrak{31}} = 0 \,, \\ &\frac{\sqrt{5}}{7} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{21}}{\partial r} - \frac{\varPhi_{21}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{\mathfrak{32}} + Q_{\mathfrak{32}} = 0 \,, \\ &\frac{\sqrt{15}}{7\sqrt{2}} \bigg(\frac{\partial \varPhi_{22}}{\partial r} - \frac{2\varPhi_{22}}{r} \bigg) - \varSigma_{\mathfrak{t}} \varPhi_{\mathfrak{33}} + Q_{\mathfrak{33}} = 0 \,. \end{split}$$

A P_L közelítés fontos speciális esete a P_1 közelítés, amelynek az 1D geometriákhoz tartozó egyenleteit viszonylag egyszerű programokkal lehet megoldani. Ezért az alábbiakban mindhárom geometriára felírjuk ezeket. A fluxus térfüggését illetően ugyan nem adnak többet, mint a diffúzióegyenlet, de a diffúzióelmélet és az aszimptotikus elmélet számos hibáját kiküszöbölik:

- figyelembe veszik az áramra vonatkozó lassulást,
- a Marshak-határfeltételek energiától függő extrapolációs távolságot engednek meg,
- a határfelületek közelében leírják a térben változó neutronfluxust (ami nem lehetséges az aszimptotikus elméletben).

Az *1D síkgeometriára* $\Phi_0(z,E)$ a $\Phi(z,E)$ fluxus, továbbá (41.10c)-ből következik, hogy $\Phi_1(z,E)$ az áram z komponense, J(z,E). Ezekkel a jelölésekkel (43.2)-ből következnek a P₁ egyenletek:

$$-\frac{\partial J(z,E)}{\partial z} - \Sigma_{t}(z,E) \Phi(z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s0}(z,E' \to E) \Phi(z,E') dE' +$$

$$+\int_{0}^{\infty} \Sigma_{in}(z,E' \to E) \Phi(z,E') dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}} \int_{0}^{\infty} v \Sigma_{f}(z,E') \Phi(z,E') dE' = 0$$
(43.6a)

és

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(z,E)}{\partial z} - \Sigma_{t}(z,E)J(z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(z,E' \to E)J(z,E')dE' = 0.$$
(43.6b)

A gömbgeometriához tartozó P1 egyenletek (43.4)-ből adódnak:

$$-\left(\frac{\partial J(r,E)}{\partial r} + \frac{2}{r}J(r,E)\right) - \Sigma_{t}(r,E)\mathcal{\Phi}(r,E) + \int_{0}^{\infty}\Sigma_{s0}(r,E'\to E)\mathcal{\Phi}(r,E')dE' + \int_{0}^{\infty}\Sigma_{in}(r,E'\to E)\mathcal{\Phi}(r,E')dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}}\int_{0}^{\infty}v\Sigma_{f}(r,E')\mathcal{\Phi}(r,E')dE' = 0$$
(43.7a)

és

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(r,E)}{\partial r} - \Sigma_{t}(r,E)J(r,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(r,E' \to E)J(r,E')dE' = 0.$$
(43.7b)

(43.7a) első tagját egyszerűbb alakra lehet hozni:

$$\frac{\partial J(r,E)}{\partial r} + \frac{2}{r}J(r,E) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial (r^2 J(r,E))}{\partial r}$$

Az *1D hengergeometriához* tartozó P_1 egyenleteket (43.5)-ből kapjuk. Ebben az esetben a Φ_{11} függvény helyett célszerű a radiális áramot használni. Az F1.2. ábrá-

ról leolvasható az Ω vektor Ω_r radiális komponense, amellyel a radiális áram a következőképpen fejezhető ki:

$$J(r, E) = \int_{4\pi} \Phi(r, E, \mathbf{\Omega}) \Omega_r d\mathbf{\Omega} = \int_{0}^{\pi} \sin\theta d\theta \int_{0}^{2\pi} \sin\theta \cos\varphi \Phi(r, E, \theta, \varphi) d\varphi.$$

Ez ugyanaz (legalábbis formálisan), mint az áram x komponensének (41.10a) szerinti alakja:

$$J(r, E) = \frac{\Phi_{1,-1} - \Phi_{11}}{\sqrt{2}} = -\Phi_{11}\sqrt{2} .$$

Az $\ell = m = 0$ egyenlet első tagja tehát így írható (vö. (43.5b)):

$$\sqrt{2}\left(\frac{\partial \Phi_{11}}{\partial r} + \frac{\Phi_{11}}{r}\right) = -\left(\frac{\partial J}{\partial r} + \frac{J}{r}\right) = -\frac{1}{r}\frac{\partial(rJ)}{\partial r}$$

Végeredményben tehát a P₁ egyenletek első tagja:

$$-\frac{1}{r}\frac{\partial(rJ(r,E))}{\partial r} - \Sigma_{t}(r,E)\varPhi(r,E) + \int_{0}^{\infty}\Sigma_{s0}(r,E'\to E)\varPhi(r,E')dE' +$$
$$+\int_{0}^{\infty}\Sigma_{in}(r,E'\to E)\varPhi(r,E')dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}}\int_{0}^{\infty}\nu\Sigma_{f}(r,E')\varPhi(r,E')dE' = 0, \qquad (43.8a)$$

ahol a Φ fluxust a Φ_{00} függvénnyel azonosítottuk. A második egyenlet $\ell = m = 1$ helyettesítéssel adódik a (43.5a) egyenletből, ha azt megszorozzuk $-\sqrt{2}$ -vel (és természetesen elhagyjuk az $\ell+1 = 2$ indexű tagokat):

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(r,E)}{\partial r} - \Sigma_{t}(r,E)J(r,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(r,E' \to E)J(r,E')dE' = 0.$$
(43.8b)

Vegyük észre, hogy a sík-, gömb- és hengergeometriában kapott P₁ egyenletek azonos alakra hozhatók, ha az első egyenlet első tagját a következő alakban írjuk fel:

$$\frac{1}{r^{\alpha}}\frac{\partial \left(r^{\alpha}J(r,E)\right)}{\partial r},$$

ahol:

 $\alpha = 0$ síkgeometriában,

 $\alpha = 1$ hengergeometriában,

 $\alpha = 2$ gömbgeometriában.

A három egydimenziós geometria íly módon ugyanazzal a programmal válik kezelhetővé.³⁷ A 4.5. fejezetben ismertetjük ezeknek az egyenleteknek a véges differenciák módszerével való megoldását.

 $^{^{37}}$ Síkgeometriában az
 rváltozó helyébe a (43.6) egyenletekben szereplő z változót kell képzelnünk.

1D síkgeometriában az x és y irányokban végtelennek tételezzük fel a reaktort, ami nyilvánvalóan csak idealizáció. Reális rendszerek mindkét irányban végesek, tehát véges az áramnak J_x és J_y komponense is. Ha ezeket kihagyjuk a P₁ egyenletekből, a neutronmérleg helytelen lesz. A mérleget egyensúlyba lehet hozni, ha ezeket a komponenseket legalább aszimptotikus közelítésben figyelembe vesszük, ami akkor lehetséges, ha a reaktor ezekben az irányokban homogén. A síkgeometriának csak ezzel a kiegészítéssel van értelme. Hasonló kijelentést lehet tenni a hengergeometriára vonatkozóan is: ott a J_z komponensnek legalább aszimptotikus közelítésben meg kell jelennie a P₁ egyenletekben. Az említett komponenseket *transzverzális áram*nak fogjuk nevezni. Értelmét és figyelembevételének módját először az egyszerűbb esetben, a hengergeometriában világítjuk meg.

(41.10c) alapján a J_z transzverzális áram a Φ_{10} függvény. Ha ez függ z-től, akkor (42.9)-ben nem hanyagolható el, vagyis (43.8a)-ban szerepeltetni kell a következő tagot is:

$$-\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{10}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{z},\boldsymbol{E})}{\partial \boldsymbol{z}} = -\frac{\partial J_{z}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{z},\boldsymbol{E})}{\partial \boldsymbol{z}}$$

A (42.8) és (42.9) egyenletek P_1 változatából úgy kaphatjuk meg a (21.14) a-szimptotikus egyenleteket, hogy feltesszük:

$$\frac{\partial J_z}{\partial z} = B_z J_z \tag{43.9a}$$

és

$$\frac{\partial \Phi(r, z, E)}{\partial z} = -B_z \Phi(r, z, E), \qquad (43.9b)$$

ahol B_z a *z* irányhoz tartozó görbületi paraméter négyzetgyöke. Ez a mennyiség a reaktornak a *z* irányban való kiterjedésétől függ, tehát a számítás bemenő adata. Az itt szereplő előjeleket úgy választottuk meg, hogy végül kiadódjanak a (21.14) aszimptotikus egyenleteknek megfelelő előjelek.³⁸ Ezzel a (43.8a) egyenlet a következőképpen alakul:

$$-\frac{1}{r}\frac{\partial(rJ(r,E))}{\partial r} - B_{z}J_{z}(r,E) - \Sigma_{t}(r,E)\varPhi(r,E) + \int_{0}^{\infty}\Sigma_{s0}(r,E'\to E)\varPhi(r,E')dE' + \\+\int_{0}^{\infty}\Sigma_{in}(r,E'\to E)\varPhi(r,E')dE' + \frac{f(E)}{k_{eff}}\int_{0}^{\infty}\nu\Sigma_{f}(r,E')\varPhi(r,E')dE' = 0.$$
(43.10)

A $J_z(r,E)$ transzverzális áramra úgy kapunk egyenletet, hogy az előzőkhöz hozzávesszük a Φ_{10} függvényre vonatkozó P₁ egyenletet. Az $\ell = 1$, m = 0 egyenlet (42.9) szerint a következő:

³⁸ A (21.14a)-ban szereplő $-iJ_{-}$ függvény az itteni J_z -nek, a ψ_{-} függvény pedig az itteni Φ -nek felel meg. A $B_z J_z$ kifolyási tagnak csak akkor lesz ugyanolyan előjele, mint a $\Sigma_t \Phi$ tagé, ha (4.3.9a)-ban pozitív az előjel. (21.14b)-ből úgy csinálhatunk csupa valós függvényt tartalmazó egyenletet, hogy beszorozzuk –i-vel. Ekkor a $B_z \Phi$ -t tartalmazó tag előjele a $\Sigma_t J_z$ tagéval ellentétes lesz, amit a transzverzális áram esetében úgy tudtunk biztosítani, hogy (4.3.9b)-ben negatívnak választottuk az előjelet.

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi_{00}(r,z,E)}{\partial z} - \Sigma_{t}\Phi_{10}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(r,z,E' \to E)\Phi_{10}(r,z,E')dE' = 0,$$

vagyis

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(r,z,E)}{\partial z} - \Sigma_{t}J_{z}(r,z,E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(r,E' \to E)J_{z}(r,z,E')dE' = 0$$

(43.9b) alapján a transzverzális áramra vonatkozó aszimpotikus egyenlet:

$$\frac{B_z}{3} \mathcal{P}(r, E) - \mathcal{L}_t J_z(r, E) + \int_0^\infty \mathcal{L}_{sl}(r, E' \to E) J_z(r, E') dE' = 0.$$
(43.11)

A dolog természetéből adódóan itt már elhagyhattuk a z-től való függést.

A síkgeometria esete bonyolultabb, mivel itt két transzverzális tengely van. A (43.6) egyenleteket annak feltételezésével kaptuk, hogy a $\Phi_{\ell m}$ függvények ($\ell = 0$ és $\ell = 1$ esetében) függetlenek x-től és y-tól. A mondottak szerint ezt nem tehetjük fel. (43.6a) nem más, mint a (42.1) egyenlet $\ell = m = 0$ -ra. Ha nem tehetjük fel, hogy nincs transzverzális függés, akkor (42.1) többi tagját is figyelembe kell venni. $\ell = m = 0$ mellett közülük csak a Φ_{11} és $\Phi_{1,-1}$ függvényekre vonatkozó tagok jelennek meg:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial \Phi_{11}}{\partial x} + i \frac{\partial \Phi_{11}}{\partial y} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\partial \Phi_{1,-1}}{\partial x} + i \frac{\partial \Phi_{1,-1}}{\partial y} \right) = -\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial J_y}{\partial y}$$

ahol figyelembe vettük a (41.10) képleteket is. Az aszimptotikus közelítés azt jelenti, hogy ezekről az áramokról feltesszük (vö. (43.9a)):

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} = B_x J_x \qquad \text{és} \qquad \frac{\partial J_y}{\partial y} = B_y J_y. \qquad (43.12a)$$

 B_x és B_y az x, illetve y irányhoz tartozó görbületi paraméter négyzetgyöke. Ugyanúgy, mint a hengeres geometriában B_z , ezek is a számítás bemenő adatai.

A (43.6b) egyenletet az $\ell = 1$ és m = 0 helyettesítéssel kaptuk (42.1)-ből. Ekkor az x és y szerinti deriváltak nem jelennek meg: egyrészt a P₁ közelítés miatt hiányoznak az $\ell+1 = 2$ indexű függvények, másrészt $\ell-1 = 0$ -nál csak az $m\pm 1 = \pm 1$ indexűek jelennének meg, de ezek nem léteznek, mivel $\Phi_{\ell m}$ -ben az indexekre mindig fennáll, hogy $\ell \ge |m|^{.39}$ (42.1)-ből az $\ell = 1$ és $m = \pm 1$ helyettesítéssel kapunk a transzverzális áramok kiszámítására szolgáló egyenleteteket. Ekkor viszont nem jelenik meg a z szerinti derivált. (42.1) a következő alakot veszi fel $\ell = 1$ és m = 1 mellett:

$$\frac{1}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{00}}{\partial x} - i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{00}}{\partial y} \right) - \boldsymbol{\Sigma}_{t} \boldsymbol{\Phi}_{11}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \boldsymbol{\Sigma}_{s1}(\mathbf{r}, E' \to E) \boldsymbol{\Phi}_{11}(\mathbf{r}, E') dE' = 0.$$

Ugyanez $\ell = 1$ és m = -1 mellett:

³⁹ Emiatt nem létezik Φ_{01} és $\Phi_{0,-1}$, hiszen ezek rendre az ℓ -1=0, *m*+1=1 és ℓ -1=0, *m*+1=-1 eseteknek felelnének meg.

$$\frac{1}{3\sqrt{2}} \left(-\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{00}}{\partial x} - i \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{00}}{\partial y} \right) - \boldsymbol{\Sigma}_{t} \boldsymbol{\Phi}_{1,-1}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \boldsymbol{\Sigma}_{s1}(\mathbf{r}, E' \to E) \boldsymbol{\Phi}_{1,-1}(\mathbf{r}, E') dE' = 0.$$

A (41.10) képletek figyelembevételével ebből két egyenletet vezethetünk le:

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E)}{\partial x} - \Sigma_{t}J_{x}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \to E)J_{x}(\mathbf{r}, E')dE' = 0,$$

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E)}{\partial y} - \Sigma_{t}J_{y}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \to E)J_{y}(\mathbf{r}, E')dE' = 0.$$

Az aszimptotikus közelítés azt jelenti, hogy (43.12a) mellett a $\Phi_{00} \equiv \Phi$ fluxusra is érvényes (vö. (43.9b)):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = -B_x \Phi$$
 és $\frac{\partial \Phi}{\partial y} = -B_y \Phi$. (43.12b)

Ha itt figyelembe vesszük ezt a feltevést, előbbi egyenleteink a következő alakba mennek át:

$$\frac{B_{\mathrm{x}}}{3} \Phi(\mathbf{r}, E) - \Sigma_{\mathrm{t}} J_{\mathrm{x}}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{\mathrm{sl}}(\mathbf{r}, E' \to E) J_{\mathrm{x}}(\mathbf{r}, E') \mathrm{d}E' = 0,$$

$$\frac{B_{\mathrm{y}}}{3} \Phi(\mathbf{r}, E) - \Sigma_{\mathrm{t}} J_{\mathrm{y}}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{\mathrm{sl}}(\mathbf{r}, E' \to E) J_{\mathrm{y}}(\mathbf{r}, E') \mathrm{d}E' = 0.$$

E két egyenlet azonos alakú, egyetlen különbség a B_x , illetve B_y szorzó. Az egyes transzverzális áramok nyilván arányosak velük:

$$J_x = B_x J_0$$
 és $J_y = B_y J_0$.

Belátjuk, hogy elég a

$$-\frac{B}{3}\mathcal{\Phi}(\mathbf{r}, E) - \Sigma_{t}J_{\text{transz.}}(\mathbf{r}, E) + \int_{0}^{\infty} \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \to E)J_{\text{transz.}}(\mathbf{r}, E')dE' = 0, \quad (43.13)$$

egyenletet valamilyen alkalmasan választott *B*-re megoldani. A (43.12a) feltevés alapján:

$$-\frac{\partial J_{x}}{\partial x} - \frac{\partial J_{y}}{\partial y} = -B_{x}J_{x} - B_{y}J_{y} = -\left(B_{x}^{2} + B_{y}^{2}\right)J_{0}.$$

Ha tehát *B*-t, illetve $J_{\text{transz.}}$ -t a

$$B^2 = B_x^2 + B_y^2 \qquad \qquad J_{\text{transz.}} = BJ_0$$

formulák szerint választjuk meg, írhatjuk:

$$-\frac{\partial J_{x}}{\partial x} - \frac{\partial J_{y}}{\partial y} = -BJ_{\text{transz.}}.$$

Ez írandó a (43.10) egyenletben $B_z J_z$ helyére (természetesen $\alpha = 0$ mellett). Végül megjegyezzük, hogy a (43.8b) alatti egyenletet nem érinti a transzverzális áram figyelembevétele.

4.4. A Milne-probléma megoldása P_L közelítésben

Az alábbiakban – illusztrációképpen – megoldjuk a *Milne-problémát*, és öszszevetjük az egzakt megoldással. A megoldást síkgeometriára vonatkozóan, egycsozport modellben számítjuk ki P₁ és P₃ közelítésben. Feltételezzük, hogy a szórás izotrop, továbbá olyan hosszúságegységet választunk, amelyben $\Sigma_t = 1$. Az egycsoport transzportelméletben szokásos jelölés szerint legyen $c = \Sigma_s/\Sigma_t$. A P₃ egyenletek ekkor (43.2) alapján:

$$\frac{\mathrm{d}\Phi_{1}(z)}{\mathrm{d}z} + (1-c)\Phi_{0}(z) = S_{0}(z), \qquad (44.1a)$$

$$\frac{1}{3}\frac{\mathrm{d}\Phi_0(z)}{\mathrm{d}z} + \frac{2}{3}\frac{\mathrm{d}\Phi_2(z)}{\mathrm{d}z} + \Phi_1(z) = 0, \qquad (44.1b)$$

$$\frac{2}{5} \frac{\mathrm{d}\Phi_1(z)}{\mathrm{d}z} + \frac{3}{5} \frac{\mathrm{d}\Phi_3(z)}{\mathrm{d}z} + \Phi_2(z) = 0, \qquad (44.1c)$$

$$\frac{3}{7}\frac{d\Phi_2(z)}{dz} + \Phi_3(z) = 0.$$
(44.1d)

 $S_0(z)$ a hasadások és szórások által létrehozott izotrop neutronforrás.

A Milne-probléma a következő. Az z = 0 síktól jobbra elhelyezkedik egy végtelen homogén közeg, amelytől balra vákuum van. A határfelülettől jobbra, végtelen távolságban található egy végtelen erős síkforrás, amelynek a hatására véges z-kre a $z \rightarrow 0$ irányban csökkenő fluxus alakul ki. Három dolgot fogunk kiszámítani:

- a csökkenés relaxációs hosszát,
- a fluxusnak a vákuum felé való extrapolációs távolságát és
- a vákuum felé kiszökő neutronok irányeloszlását.

A mondottak értelmében véges z-kre a megoldást

$$\Phi_{\ell}(z) = \varphi_{\ell}(\kappa) e^{-x/\kappa}, \ \ell = 0, 1, 2, 3$$
(44.2)

alakban keressük. Ha ezt a (44.1) egyenletrendszerbe helyettesítjük, κ^2 -re másodfokú egyenletet kapunk, amelynek mindkét megoldása pozitív (c < 1 mellett):

$$\kappa_{1,2}^{2} = \frac{7 + 11(1-c) \pm \sqrt{\left[7 + 11(1-c)\right]^{2} - 756(1-c)/5}}{42(1-c)}.$$
(44.3)

Összesen 4 sajátérték van, amelyek ezek négyzetgyökei. Adott κ -ra a próbafüggvények együtthatói:

$$\varphi_0(\kappa) = 1, \quad \varphi_1(\kappa) = (1 - c)\kappa, \quad \varphi_2(\kappa) = \frac{3(1 - c)\kappa^2 - 1}{2}, \quad \varphi_3(\kappa) = \frac{3}{7\kappa}\varphi_2(\kappa).$$
(44.4)

Először megvizsgáljuk a sajátértékeket. A (44.3)-ban a gyök előtti pozitív előjellel kapott gyök 1-nél nagyobb c > 0,48-ra, és végtelenhez tart a $c \rightarrow 1$ határesetben. Ennek négyzetgyökei (κ_{1+} és κ_{1-}) tehát egy lassú térbeli relaxációnak felelnek meg. A negatív előjelhez tartozó mennyiség 1-nél kisebb. Általában is igaz: ahogy nő a P_L közelítés rendje (vagyis *L*), továbbra is csak két olyan sajátérték van, amelyek abszolút értéke 1-nél nagyobb lehet $c \rightarrow$ 1-re, a többi a [-1, 1] intervallumba esik. Növekvő *L*-lel az utóbbiak egyre sűrűbben kitöltik a [-1, 1] intervallumot.⁴⁰ Mivel a P_L közelítést elsősorban gyengén abszorbeáló közegekben alkalmazzuk (amikor $c \approx 1$), érdemes megvizsgálni a sajátértékek (1 – *c*) szerinti sorfejtését. Ha (44.3)-at (1 – *c*) szerint sorba fejtjük, a következő eredményt kapjuk:

$$\frac{1}{\kappa_1^2} = 3(1-c) \left[1 - \frac{4}{5} (1-c) \right] + O(1-c)^3,$$
(44.5a)

$$\frac{1}{\kappa_2^2} = \frac{35}{9} \left[1 + \frac{4}{5} (1 - c) \right] + O(1 - c)^2.$$
(44.5b)

Ha az egzakt megoldás szerint is elvégezzük ugyanezt a sorfejtést, azt találjuk, hogy a megadott rendig a két sorfejtés megegyezik. Ismét egy általánosságban is érvényes tulajdonságot találtunk: a P_{2L+1} közelítésnél az egyezés rendje $(1 - c)^{L+1}$ (a [-1, 1] intervallumon kívül eső sajátértékek esetében).

Az extrapolációs távolságot úgy számítjuk ki, hogy a $z \rightarrow +\infty$ határesetben érvényes megoldásnak divergálnia kell a Milne-probléma definíciója szerint, tehát ez a megoldás a (44.5a) alatti szám negatív négyzetgyökével fejezhető ki:

$$\Phi(z,\mu) \to \sum_{\ell=0}^{3} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \varphi_{\ell}(\kappa_{1-}) e^{-z/\kappa_{1-}} .$$

A κ_{2-} sajátértéket nem szerepeltetjük. Az ennek megfelelő exponenciális ugyanis nagy *z-k* felől *z* = 0 felé tartva sokkal gyorsabban tart 0-hoz, mint a κ_{1-} -nak megfelelő tag, tehát nem tudja befolyásolni a határfelület közelében kialakuló fluxust. Véges *z*re figyelembe kell venni a *z* \rightarrow + ∞ határesetben eltűnő tagokat is:

$$\Phi(z,\mu) = \sum_{\ell=0}^{3} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \Big[\varphi_{\ell}(\kappa_{1-}) e^{-z/\kappa_{1-}} + a_{1+} \varphi_{\ell}(\kappa_{1+}) e^{-z/\kappa_{1+}} + a_{2+} \varphi_{\ell}(\kappa_{2+}) e^{-z/\kappa_{2+}} \Big].$$
(44.6)

A neutronirányokra integrált fluxus ebből egyszerűen adódik:

$$\Phi(z) = 2\pi \int_{-1}^{1} \Phi(z,\mu) \,\mathrm{d}\mu = \mathrm{e}^{-z/\kappa_{1-}} + a_{1+} \mathrm{e}^{-z/\kappa_{1+}} + a_{2+} \mathrm{e}^{-z/\kappa_{2+}} \,. \quad (44.7)$$

Itt figyelembe vettük, hogy $P_0(\mu)$ kivételével mindegyik Legendre-polinom integrálja eltűnik, továbbá hogy $\varphi_0(\kappa) \equiv 1$ (vö. (44.4)). Az utolsó tag a *tranziens* megoldás, amely a z = 0 határfelülettől távolodva gyorsan eltűnik (44.1. ábra). Az első kettő öszszege az *aszimptotikus* megoldás, és – definíció szerint – a *d* extrapolációs távolság azt a helyet adja meg, ahol ennek a negatív *z*-k felé való extrapoláltja eltűnik. Mivel

 $\kappa_{l-} = -\kappa_{l+},$

könnyű belátni, hogy

 $^{^{40}}$ Az egzakt megoldás szerint a teljes [-1, 1] intervallum sajátérték.



4.4.1. ábra. Az aszimptotikus fluxus extrapolációja a negatív *z*-k felé. A *d* extrapolációs távolságot az a pont adja, ahol az extrapolált görbe (szaggatott vonal) a *z*-tengelyt metszi. A számítás P_3 közelítésben történt (c = 0.98).

A (44.7)-ben szereplő a_{1+} és a_{2+} együtthatókat a Marshak-határfeltétel alapján határozzuk meg [vö. (42.5)]. Ehhez szükségünk van az alábbi, a Legendre-polinomok definíciója (4. függelék) alapján könnyen ellenőrizhető összefüggésekre:

$$\int_{0}^{1} \mu P_{0}(\mu) d\mu = \frac{1}{2}, \qquad \int_{0}^{1} \mu P_{1}(\mu) d\mu = \frac{1}{3}, \qquad \int_{0}^{1} \mu P_{2}(\mu) d\mu = \frac{1}{8}, \qquad \int_{0}^{1} \mu P_{3}(\mu) d\mu = 0,$$
$$\int_{0}^{1} \mu^{3} P_{0}(\mu) d\mu = \frac{1}{4}, \qquad \int_{0}^{1} \mu^{3} P_{1}(\mu) d\mu = \frac{1}{5}, \qquad \int_{0}^{1} \mu^{3} P_{2}(\mu) d\mu = \frac{1}{8}, \qquad \int_{0}^{1} \mu^{3} P_{3}(\mu) d\mu = \frac{2}{35}.$$

Ha tehát (42.5)-öt $\ell = 1$ és $\ell = 3$ mellett alkalmazzuk a (44.6)-ban adott függvényre, a következő egyenlőségekre jutunk:

$$Y_{1}(\kappa_{1-}) + a_{1+}Y_{1}(\kappa_{1+}) + a_{2+}Y_{1}(\kappa_{2+}) = 0, \qquad (44.9a)$$

$$Y_{3}(\kappa_{1-}) + a_{1+}Y_{3}(\kappa_{1+}) + a_{2+}Y_{3}(\kappa_{2+}) = 0, \qquad (44.9b)$$

ahol:

$$Y_{1}(\kappa) = \frac{\varphi_{0}(\kappa)}{2} + \varphi_{1}(\kappa) + \frac{5\varphi_{2}(\kappa)}{8},$$

$$Y_{3}(\kappa) = \frac{\varphi_{0}(\kappa)}{4} + \frac{3\varphi_{1}(\kappa)}{5} + \frac{5\varphi_{2}(\kappa)}{8} + \frac{2\varphi_{3}(\kappa)}{5}.$$

A (44.9) egyenlőségek alapján a keresett együtthatókat ki tudjuk számítani. Ezután (44.8) adja az extrapolációs távolságot. Az extrapoláció c = 0.98 esetében látszik a

4.4.1. ábrán. A 4.4.1. táblázatban (1 - c) különböző értékeire összehasonlítjuk ennek az értékeit az egzakt extrapolációs távolsággal [Brf]. A táblázatba felvettük a P₁ közelítésből adódó eredményeket is (lásd alább).

С	P ₁		P ₃			Egzakt	
	κ_{+}	d	κ_{l+}	κ_{2+}	d	κ_0	d
0,90	1,82574	0,69892	1,90273	0,48657	0,78226	1,90321	0,78923
0,92	2,04124	0,69201	2,10943	0,49070	0,76627	2,10970	0,77213
0,94	2,35702	0,68534	2,41547	0,49482	0,75032	2,41560	0,75574
0,96	2,88675	0,67891	2,93398	0,49893	0,73480	2,93402	0,74002
0,98	4,08248	0,67269	4,11551	0,50302	0,71973	4,11552	0,72494
0,99	5,77350	0,66965	5,79673	0,50506	0,71236	5,79673	0,71762
0,999	18,2574	0,66696	18,2647	0,50689	0,70582	18,2647	0,71117
1,0	8	0,66667	8	0,50709	0,70510	8	0,71045

4.4.1. táblázat. Extrapolációs távolság és sajátértékek P₁ és P₃ közelítésben, valamint az egzakt megoldás szerint

A 4.4.1. táblázatból több dolog látszik:

- Az itt vizsgált kis abszorpciójú közegekben (c > 0.9) a P₃ közelítés meglehetősen pontos. Mind az aszimptotikus sajátérték, mind az extrapolációs távolság 1%-on belül egyezik az egzakt értékekkel.
- A jó egyezésen belül megfigyelhető, hogy a P₃ közelítés szisztematikusan kisebb extrapolációs távolságokra vezet.
- Érdemes még észrevenni, hogy az extrapolációs távolság erősen függ az abszorpció mértékétől: az abszorpció növekedésével nő. Ennek ellenére a diffúzióelméletben általában az abszorpciómentes határesethez (c = 1) tartozó értéket (0,71045) szoktuk használni. Optikai méreteit tekintve kis méretű rendszerek leírásában azonban okozhat hibát ez az elhanyagolás.





A határfelületen a vákuum felé kifolyó neutronok szögeloszlását úgy kapjuk meg, hogy (44.6)-ban z = 0-t helyettesítünk:

$$\Phi(0,\mu) = \sum_{\ell=0}^{3} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \Big[\varphi_{\ell}(\kappa_{1-}) + a_{1+}\varphi_{\ell}(\kappa_{1+}) + a_{2+}\varphi_{\ell}(\kappa_{2+}) \Big], \qquad \mu < 0.$$

A 4.4.2. ábrán ezt hasonlítjuk össze az egzakt szögeloszlással [Brf]. Az egyezés kielégítő a $\mu < 0$ tartományban. $\mu > 0$ -ra viszont látható, hogy a (42.3) határfeltétel csak rossz közelítéssel elégül ki.

A P_3 közelítés jelentős javulást jelent a P_1 közelítéshez képest. Befejezésül nézzük meg ennek a mértékét. (44.1) mintájára felírhatjuk a P_1 egyenleteket:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}_{1}(z)}{\mathrm{d}z} + (1-c)\boldsymbol{\Phi}_{0}(z) = S_{0}(z),$$
$$\frac{1}{3}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Phi}_{0}(z)}{\mathrm{d}z} + \boldsymbol{\Phi}_{1}(z) = 0.$$

Ha ezekre is alkalmazzuk a (44.2) próbafüggvényeket ($\ell = 0$ és $\ell = 1$), egyszerűen beláthatjuk, hogy P₁ közelítésben csak egyetlen κ^2 adódik:

$$\frac{1}{\kappa^2} = 3(1-c) \, .$$

Ez láthatóan a (44.5) sorfejtés első tagja. φ_0 -ra és φ_1 -re érvényesek maradnak a (44.4) egyenletek. Tekintve, hogy nincs tranziens megoldás, (44.7) helyett egyszerűbb képlet adja meg a fluxust:

$$\Phi(z) = 2\pi \int_{-1}^{1} \Phi(z,\mu) \, \mathrm{d}\mu = \mathrm{e}^{-z/\kappa_{-}} + a_{+} \mathrm{e}^{-z/\kappa_{+}} \, .$$

Az itt szereplő a_+ együtthatót a (44.9) egyenletek analógiájára határozhatjuk meg:⁴¹

$$a_+ = -\frac{3\kappa_+ - 2}{3\kappa_+ + 2},$$

és (44.8) mintájára számítjuk ki az extrapolációs távolságot:

$$d = \frac{\kappa_+}{2} \ln \frac{3\kappa_+ + 2}{3\kappa_+ - 2}$$

A 4.4.1. táblázatban a P_1 közelítésre vonatkozóan szereplő adatokat ezekkel a képletekkel számítottuk ki.

Látható a táblázatból, hogy a P₁ közelítés már lényegesen pontatlanabbul adja a sajátértéket, mint a P₃ közelítés, de ennél fontosabb eltérés az extrapolációs távolság kis értéke. Az abszorpciómentes határesetben a diffúzióelméleti d = 2/3 adódik, ami jelentős eltérés. Ezért szoktuk ezt a diffúzióelméletben az egzakt 0,71045-re javítani. A P₁ közelítésnek van még egy további fogyatékossága: nem jelenik meg benne a tranziens megoldás. Itt ugyan csak egy végtelen félteret vizsgáltunk, de nem nehéz belátni, hogy magasabb közelítésekben a tranziens megoldások minden olyan határfelület közelében megjelennek, amely különböző anyagi minőségű tartományokat választ el egymástól. Mivel ezek a P₁ közelítésben hiányoznak, bizonyos számítási hibára kell felkészülnünk, amikor sok ilyen tartomány együttes leírására használjuk. Ugyanez a megállapítás természetesen vonatkozik a diffúzióelméletre is.

⁴¹ A számítás részleteit az Olvasóra bízzuk.

4.5. Véges differenciák a P_L közelítésben

A 4.3. fejezetben kapott P_L egyenleteket általában a véges differenciák módszerével oldjuk meg. Ennek megfelelően a vizsgált rendszert felosztjuk rácspontokra, de – a diffúzióelmélettől eltérően – a különböző anyagi minőségű tartományokat elválasztó pont mindig két szomszédos osztópont közötti távolság felezőpontja (45.1. ábra). Mint látni fogjuk, ennek az az oka, hogy így lehet a legkönnyebben biztosítani a neutronáram folytonosságát. A rácsosztás ugyan lehet tetszőleges, de meg fogjuk mutatni, hogy az egyes homogén tartományokon belül egyenletes rácsosztás vezet a legjobb pontossághoz.



4.5.1. Véges differenciák egy dimenzióban

A három egydimenziós geometriában az $\ell = 0$ -ra kapott egyenletek azonos alakra hozhatók:

$$-\frac{1}{x^{\alpha}}\frac{\partial \left(x^{\alpha}J(x,E)\right)}{\partial x} - B_{z}J_{z}(x,E) - \Sigma_{t}(x,E)\Phi(x,E) + Q_{0}(x,E) = 0, \qquad (45.1)$$

ahol $\alpha = 0, 1, 2$ rendre a sík-, henger- és gömbgeometriát jelenti. Az előbbi esetében x a (43.6) egyenletekben szereplő z-t, a másik két esetben pedig a (43.7) és (43.8) egyenletekben szereplő r-et jelenti. Az is fennáll, hogy a térfogatelem $x^{\alpha}dx$ -szel arányos. A továbbiakban az x és E argumentumokat többnyire elhagyjuk. Azt, hogy egy függvény melyik osztóponthoz tartozik, az osztópont indexével fogjuk jelölni. Az E változó helyére pedig a következő részben a g csoportindexet írjuk, de feltüntetése egyelőre feleslegesen elbonyolítaná a jelöléseket.

A 4.5.1. ábra szerinti *k*-adik intervallum hosszát Δx_k -val, jobb oldali határát x_k -val jelöljük. A *k*-adik intervallum középpontja $x_{k+1/2}$. A fluxust, az axiális áramot és a Q_0 izotrop lassulási forrást egész indexű, a *J* áramot és a Q_1 anizotrop lassulási pedig a feles indexű osztópontokban számítjuk ki. Az osztópontok indexeit használjuk a ki-számítandó mennyiségek esetében is:

$$\begin{split} &\varPhi(x_k, E) = \varPhi_k , \qquad J_z(x_k, E) = J_k^z , \qquad J(x_{k+1/2}, E) = J_{k+1/2} , \\ &Q_{0k} = Q_0(x_k, E) , \\ &Q_{1,k+1/2}^{\rm b} = Q_1^{\rm b}(x_{k+1/2}, E) = \int_0^\infty \varSigma_{1,k}^{\rm s}(E' \to E) J(x_{k+1/2}, E') dE' . \end{split}$$

 Q_1 esetében ügyelni kell arra, hogy az $x_{k+1/2}$ osztópont eshet két homogén zóna határára is. Ilyenkor két anizotrop lassulási forrás van: az egyik az osztóponttól balra eső, a másik az osztóponttól jobbra eső zóna Σ_{s1} magfüggvényéhez tartozik. Ezért kell egy felső index is: "b", illetve "j". Előző képletünkben az x_k osztóponthoz tartozó magfüggvényt használtuk, ezért tettük ki "b" felső indexet. A 4.5.1. ábrán látszik, hogy a vizsgált rendszer bal oldali határa $x_{1/2}$. Ez az *x*-tengely kezdete: $x_{1/2} = 0$. A jobb oldali határ: $x_{n-1/2} = R$. Ebből következik, hogy az $x_0 = -\Delta x_1$ és $x_n = R + \Delta x_n/2$ osztópontok a rendszeren kívül vannak, tehát a nekik megfelelő Φ_0 és Φ_n fluxusok – egyelőre – csak mesterséges mennyiségek, fizikai jelentésük nincs. Hasonlóan mesterséges mennyiségek az ezekhez tartozó transzverzális áramok és izotrop lassulási források. A határfeltételek tárgyalásakor (45.4. szakasz) fizikai értelmet fognak kapni.

A végesdifferencia-egyenletek levezetése érdekében a (45.1) egyenletet beszorozzuk x^{α} -val, majd integrálunk az ($x_{k-1/2}$, $x_{k+1/2}$) intervallumban. Mivel az egyes homogén zónák határa mindig feles osztópont, ez az intervallum homogén. Az integrál a következőt adja:

$$-\left(x_{k+1/2}^{\alpha}J_{k+1/2} - x_{k-1/2}^{\alpha}J_{k-1/2}\right) + \left(-B_{z}J_{k}^{z} - \Sigma_{k}^{t}\Phi_{k} + Q_{0k}\right)x_{k}^{\alpha}\frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2} = 0,$$

(k = 1, 2, ..., n-1). (45.2a)

Az $\ell > 0$ -hoz tartozó P_L egyenleteket egyszerűen (tehát x^{α} -val való beszorzás nélkül) integráljuk az egyes rácsintervallumokra. $\ell = 1$ esetében az integrál az (x_{k-1}, x_k) intervallumra vonatkozik, amelyben már változhatnak a hatáskeresztmetszetek, így ezt az integrált a következő módon közelítjük (síkgeometriában):

$$-\frac{\Phi_{k}-\Phi_{k-1}}{3} - \frac{2(\Phi_{2,k}-\Phi_{2,k-1})}{3} +$$

$$+\left(-\frac{\Sigma_{k-1}^{t}+\Sigma_{k}^{t}}{2}J_{k-1/2} + \frac{Q_{1,k-1/2}^{b}+Q_{1,k-1/2}^{j}}{2}\right)\Delta x_{k} = 0, (k = 1, 2, ..., n).$$
(45.2b)

k = 1-re és k = n-re itt még szerepelnek mesterséges mennyiségeket, de az egyenletek korrektek – formálisan legalábbis. Ha itt elhagyjuk a $\Phi_{2,k-1}$ és $\Phi_{2,k}$ tagokat, és további egyenleteket nem írunk fel, akkor a P₁ egyenleteket kapjuk:

$$-\frac{\Phi_{k}-\Phi_{k-1}}{3} + \left(-\frac{\Sigma_{k-1}^{t}+\Sigma_{k}^{t}}{2}J_{k-1/2} + \frac{Q_{1,k-1/2}^{b}+Q_{1,k-1/2}^{J}}{2}\right)\Delta x_{k} = 0.$$
(45.2c)
$$(k = 1, 2, ..., n).$$

Ez már nem csak síkgeometriában, hanem mindhárom egydimenziós geometriában is érvényes. A transzverzális áramra vonatkozó (43.13) egyenletet úgy írjuk át véges differenciákra, hogy az egyes belső osztópontokra alkalmazzuk (k = 1, 2, ..., n-1):

$$\frac{B_z}{3}\Phi_k - \Sigma_k^{t}J_k^{z} + Q_{1k}^{z} = 0, \qquad (45.2d)$$

ahol

$$Q_{1k}^{z} = Q_{1k}^{z}(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{k}^{s1}(E' \to E) J_{k}^{z}(E') dE' = 0.$$
(45.2e)

Mielőtt továbbmennénk, megszámoljuk az ismeretleneket és a felírt egyenleteket. A fluxusok és tranverzális áramok száma (n-1). Minden feles osztóponthoz tartozik áram, ezek száma n. Ha hozzávesszük a két mesterséges fluxust is, összesen 3nismeretlent kapunk. A (45.2a) és (45.2d) szerinti egyenletek együttes száma (2n-2), amelyhez járul n darab ((45.2c) alakú egyenlet. Ez összesen: (3n-2). Hiányzik tehát két egyenlet, amelyeket a határfeltételek fogják szolgáltatni (45.4. szakasz). A P₁-nél magasabb közelítésben a fentiekben elhagyott tagokat megtartjuk, és további egyenleteket írunk fel, majd integráljuk azokat. Tekintve, hogy alakjuk már függ a geometriától, csak a síkgeometriára vonatkozóan írjuk fel őket. A fentiek analógiájára meg kell különböztetnünk a páros és páratlan ℓ -ket. A páros indexű Φ_{ℓ} függvényeket egész, a páratlan indexűeket pedig feles koordinátájú osztópontokban számítjuk ki. A páros ℓ -ekhez tartozó egyenleteket eszerint az ($x_{k-1/2}$, $x_{k+1/2}$) intervallumban integráljuk:

$$-\frac{\ell}{2\ell+1} \left(\boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,k+1/2} - \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1,k-1/2} \right) - \frac{\ell+1}{2\ell+1} \left(\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,k+1/2} - \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1,k-1/2} \right) + \left(-\boldsymbol{\Sigma}_{k}^{\mathsf{t}} \boldsymbol{\Phi}_{\ell k} + \boldsymbol{Q}_{\ell k} \right) \frac{\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_{k-1}}{2} = 0, \qquad (k = 1, 2, ..., n).$$
(45.3a)

A páratlan ℓ -ekhez tartozó egyenleteket az (x_{k-1}, x_k) intervallumban integráljuk:

$$-\frac{\ell}{2\ell+1} \left(\Phi_{\ell-1,k} - \Phi_{\ell-1,k-1} \right) - \frac{\ell+1}{2\ell+1} \left(\Phi_{\ell+1,k} - \Phi_{\ell+1,k-1} \right) + \\ + \left(-\frac{\Sigma_{k-1}^{t} + \Sigma_{k}^{t}}{2} \Phi_{\ell,k-1/2} + \frac{Q_{\ell,k-1/2}^{b} + Q_{\ell,k-1/2}^{j}}{2} \right) \Delta x_{k} = 0, \qquad (45.3b)$$

$$(k = 1, 2, ..., n).$$

Az ilyen módon előállított véges differenciák előnye, hogy az integrálokban mindig folytonos függvények szerepelnek. Ez vezet ugyanis a lehető legnagyobb pontossághoz. A páros ℓ -ekhez tartozó egyenletekben a teljes integrálási tartományban egyrészt állandók a hatáskeresztmetszetek, másrészt végig differenciálható az integrálandó függvény. Az ($x_{k-1/2}$, $x_{k+1/2}$) intervallumban tehát alkalmazhatjuk a Taylor-sorfejtést:

$$\Phi_{\ell}(x) = \Phi_{\ell k} + (x - x_k)\Phi_{\ell k}' + \frac{(x - x_k)^2}{2}\Phi_{\ell k}'' + \dots,$$

amelynek az integrálja:

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \Phi_{\ell}(x) dx = \Phi_{\ell k} \left(x_{k+1/2} - x_{k-1/2} \right) + \Phi_{\ell k}' \frac{\left(x_{k+1/2} - x_{k} \right)^{2} - \left(x_{k-1/2} - x_{k} \right)^{2}}{2} + \Phi_{\ell k}'' \frac{\left(x_{k+1/2} - x_{k} \right)^{3} - \left(x_{k-1/2} - x_{k} \right)^{3}}{6} + \dots$$

A törtekben szereplő különbségek az rácsintervallumok hosszának a felei:

$$x_{k+1/2} - x_k = \frac{\Delta x_{k+1}}{2}$$
 és $x_{k-1/2} - x_k = -\frac{\Delta x_k}{2}$,

amit az előbbi integrálba helyettesítve az

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \Phi_{\ell}(x) dx = \Phi_{\ell k} \frac{\Delta x_{k+1} + \Delta x_{k}}{2} + \Phi_{\ell k}' \frac{(\Delta x_{k+1})^{2} - (\Delta x_{k})^{2}}{8} + \Phi_{\ell k}'' \frac{(\Delta x_{k+1})^{3} + (\Delta x_{k})^{3}}{48} + \dots$$

eredmény adódik. Legyen először a rácsosztás egyenletes: $\Delta x_{k+1} = \Delta x_k = \Delta x$ minden *k*-ra. Ekkor:

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \boldsymbol{\Phi}_{\ell}(x) \mathrm{d}x = \boldsymbol{\Phi}_{\ell k} \Delta x + \boldsymbol{\Phi}_{\ell k}'' \frac{\left(\Delta x\right)^3}{24} + \dots$$

A (45.2a) és (45.2b) végesdifferencia-egyenletekben az első taggal közelítjük az integrált, tehát a hiba a legutóbbi képlet második tagjával becsülhető. Így a közelítés *relatív* hibája másodrendű, vagyis $(\Delta x)^2$ -tel arányos:

$$\frac{\varPhi_{\ell k}''}{\varPhi_{\ell k}} \frac{(\Delta x)^2}{24}$$

Amikor azonban a rácsosztás nem egyenletes, vagyis van olyan *k*, hogy $\Delta x_{k+1} \neq \Delta x_k$, a megfelelő osztópontra vonatkozóan a közelítés relatív hibája elsőrendű:

$$\frac{\boldsymbol{\varPhi}'_{\ell k}}{\boldsymbol{\varPhi}_{\ell k}} \frac{\left(\Delta x_{k+1}\right)^2 - \left(\Delta x_k\right)^2}{4\left(\Delta x_{k+1} + \Delta x_k\right)} = \frac{\boldsymbol{\varPhi}'_{\ell k}}{\boldsymbol{\varPhi}_{\ell k}} \frac{\Delta x_{k+1} - \Delta x_k}{4}$$

Ezért célszerű annyira egyenletes rácsosztást alkalmazni, amennyire csak lehetséges.

Nézzük meg ugyanezt a páratlan ℓ -ekhez tartozó egyenletek esetében, amikor az (x_{k-1}, x_k) intervallumban integrálunk. Mivel $x_{k-1/2}$ -ben lehet határpont, a hatáskeresztmetszeteknek itt lehet szakadásuk, de maga a $\Phi_{\ell}(x)$ függvény folytonos és deriválható. Rá vonatkozóan tehát alkalmazhatjuk a Taylor-sorfejtést:

$$\Phi_{\ell}(x) = \Phi_{\ell,k-1/2} + (x - x_{k-1/2})\Phi_{\ell,k-1/2}' + \frac{(x - x_{k-1/2})^2}{2}\Phi_{\ell,k-1/2}'' + \dots$$

A hatáskeresztmetszetek lehetséges ugrása miatt az integrált célszerű felbontani a két félintervallumra vonatkozó integrálra:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \Phi_{\ell}(x) dx = \int_{x_{k-1}}^{x_{k-1/2}} \Phi_{\ell}(x) dx + \int_{x_{k-1/2}}^{x_k} \Phi_{\ell}(x) dx,$$

amelyek a sorfejtés alapján a következő módon közelíthetők:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k-1/2}} \Phi_{\ell}(x) dx = \Phi_{\ell,k-1/2} \frac{\Delta x_{k}}{2} - \Phi_{\ell,k-1/2}' \frac{(\Delta x_{k})^{2}}{8} + \Phi_{\ell,k-1/2}'' \frac{(\Delta x_{k})^{3}}{48} + \dots$$

és

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_k} \Phi_\ell(x) dx = \Phi_{\ell,k-1/2} \frac{\Delta x_k}{2} + \Phi_{\ell,k-1/2}' \frac{(\Delta x_k)^2}{8} + \Phi_{\ell,k-1/2}'' \frac{(\Delta x_k)^3}{48} + \dots$$

Ha a teljes intervallumban a hatáskeresztmetszetek nem változnak, akkor e két integrált a hatáskeresztmetszetekkel szorozva az összegben a négyzetes tag kiesik, és a közelítés relatív pontossága $(\Delta x_k)^2$ -tel arányos, vagyis másodrendű. Amikor azonban a hatáskeresztmetszetek ugranak az intervallum közepén, ez a tag nem esik ki:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \Sigma(x) \Phi_{\ell}(x) dx = \Phi_{\ell,k-1/2} \frac{\Sigma_{k-1} + \Sigma_k}{2} \Delta x_k + \Phi_{\ell,k-1/2}' \frac{\Sigma_k - \Sigma_{k-1}}{8} (\Delta x_k)^2 + \dots$$

Ebből következik, hogy a közelítés relatív hibája akkor is Δx -szel arányos, ha a rácsosztás egyenletes. A relatív hiba a következő:

$$\frac{\Phi'_{\ell,k-1/2}}{\Phi_{\ell,k-1/2}}\frac{\Sigma_k-\Sigma_{k-1}}{\Sigma_{k-1}+\Sigma_k}\frac{\Delta x_k}{4},$$

amely egyrészt a hatáskeresztmetszet (relatív) ugrásától, másrészt a $\Phi_{\ell}(x)$ függvény változásának a sebességétől (logaritmikus deriváltjától) függ. A rácsosztás megválasztásakor mindezt célszerű figyelembe venni.

A (45.2) végesdifferencia-egyenletekhez még meg kall adnunk a határfeltételeket. A P₁ közelítésre vonatkozóan a 4.5.4. részben foglalkozunk velük részletesen. P₁-nél magasabb rendű P_L közelítés esetében a Marshak- vagy a Mark-féle határfeltételeket kell alkalmazni. A Marshak-féle határfeltételek alkalmazására a 4.4. fejezetben már láttunk példát.

4.5.2. Áttérés a sokcsoport közelítésre

Az eddigiekben csak formálisan voltunk tekintettel az E energiaváltozóra. Numerikus számításokban E szerepét a g csoportindex veszi át. A (42.1) egyenletet minden nehézség nélkül integrálhatjuk a g-edik energiacsoportra, és az egyenletben eredetileg szereplő integrálokat átírhatjuk az energiacsoportok szerinti összegzésre. Így például a rugalmas szórásokat leíró tag a következő alakba megy át:

$$\int_{E_{g-1}}^{E_g} \mathrm{d}E \int_0^\infty \Sigma_{s\ell} (r, E' \to E) \mathcal{P}_{\ell m}(E') \mathrm{d}E' = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{\ell, g' \to g}^s \mathcal{P}_{\ell m g'} .$$
(45.4)

Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan írhatók át a P_L egyenletek energiacsoportokra. Az aszimptotikus reaktorelméletben a rugalmas szórásokra különböző közelítéseket vezettünk be (Fermi-közelítés, Greuling-Goertzel modell stb.). Mivel ezek is átírhatók a (45.4) szerinti alakra⁴², elegendő a rugalmas szórásokat a (45.4) képlettel leírni. A bonyodalmak elkerülése érdekében csak egydimenziós geometriákkal és a P_1 közelítéssel foglalkozunk. Az általánosabb esetekre való áttérés minden nehézség nélkül lehetséges.

Ha az $\ell = 0$ egyenleteket integráljuk a *g*-edik energiacsoportra, (45.1) alapján a következő adódik, ha figyelembe vesszük a (43.15)-ben szereplő transzverzális áramot is:

$$-\frac{1}{x^{\alpha}}\frac{\partial \left(x^{\alpha}J_{g}(x)\right)}{\partial x}-B_{z}J_{g}^{z}(x)-\Sigma_{g}^{t}(x,E)\Phi_{g}(x)+Q_{0g}(x)=0, \qquad (45.5a)$$

ahol a neutronforrást a következő módon fejezzük ki:

$$Q_{0g}(x) = \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{0,g'\to g}^{s} \Phi_{g'} + \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{g'\to g}^{in} \Phi_{g'} + \frac{f_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^{G} \nu \Sigma_{g'}^{f} \Phi_{g'} .$$
(45.5b)

⁴² A 2.3.6. részben tárgyaljuk, hogyan lehet az egyes lassulási modelleket erre az általános, mátrixos formára átírni.

$$(g = 1, 2, ..., G)$$

Az egyszerűség kedvéért nem írtuk ki, de a jobb oldalon is minden mennyiség függ *x*-től. Az $\ell = 1$ egyenleteket (43.3b) alapján kapjuk:

$$-\frac{1}{3}\frac{\partial \boldsymbol{\varPhi}_{g}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\varSigma}_{g}^{t}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{J}_{g}(\boldsymbol{x}) + \sum_{g'=1}^{G}\boldsymbol{\varSigma}_{1,g'\to g}^{s}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{J}_{g'}(\boldsymbol{x}) = 0.$$
(45.5c)

A transzverzális áramra vonatkozó (43.15) egyenlet sokcsoport változata:

$$\frac{B_z}{3} \Phi_g(x) - \Sigma_g^{t}(x) J_g^{z}(x) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{1,g'\to g}^{s}(x) J_{g'}^{z}(x) = 0.$$
(45.5d)

A rezonanciák kezeléséhez szükség van a q_{ℓ} lassulási sűrűségekre is, amelyek kielégítik az

$$\int_{0}^{\infty} \Sigma_{s\ell}(x, E' \to E) \Phi_{\ell 0}(x, E') dE' = \Sigma_{s\ell}(x, E) \Phi_{\ell 0}(x, E) - \frac{\partial q_{\ell}(x, E)}{\partial E}$$

egyenletet (vö. (22.4)). Ennek sokcsoport alakja:

$$\sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{\ell,g'\to g}^{s}(x) \Phi_{\ell g'}(x) = \Sigma_{\ell g}^{s} \Phi_{\ell g}(x) - q_{\ell g}(x) + q_{\ell,g-1}(x), \qquad (45.6)$$

aminek a segítségével a rezonanciaabszorpciót kiszámíthatjuk a (23.29) képletek alapján. (45.6) megegyezik a (23.51) képlettel.

4.5.3. A végesdifferencia-egyenletek megoldása

Az előző rész egyenleteinek térbeli véges differenciákra való átírása (45.2) és (45.3) szerint történik. A kapott egyenleteket forrásiterációval oldjuk meg. Ennek megfelelően bevezetjük a következő jelöléseket:

$$S_{gk} = f_g \sum_{g'=1}^{G} \nu \Sigma_{g'k}^{f} \Phi_{g'k} , \qquad (45.13)$$

$$L_{0,gk} = \sum_{g' \neq g} \Sigma_{0,k,g' \to g}^{s} \Phi_{g'k} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{k,g' \to g}^{in} \Phi_{g'k} , \qquad (45.14)$$

$$L_{1,g,k+1/2} = \sum_{g' \neq g} \frac{\Sigma_{1,k,g' \to g}^{s} + \Sigma_{1,k+1,g' \to g}^{s}}{2} J_{g',k+1/2}, \qquad (45.15)$$

$$L_{gk}^{z} = \sum_{g' \neq g} \Sigma_{1,k,g' \to g}^{s} J_{g'k}^{z} .$$
(45.16)

A forrásiteráció azt jelenti, hogy ezeket a forrásokat minden *g*-re adottnak véve megoldjuk a végesdifferencia-egyenleteket, majd újraszámoljuk a forrásokat. Amikor a P₁ egyenleteket a lassulási egyenletre alkalmazzuk, ez csak a hasadási forrásra jelent iterációt, ha az egyenletek megoldását a g = 1 csoporttól kezdjük. A termalizáció tárgyalásakor azonban az iteráció valamennyi forrástagra vonatkozik.

Először a transzverzális áramra vonatkozó (45.2d) egyenletet alkalmazzuk, amelynek sokcsoport alakja:

$$\frac{B_z}{3}\Phi_{gk} - \Sigma_{gk}^{t}J_{gk}^{z} + \sum_{g'=1}^{G}\Sigma_{1,k,g'\to g}^{s}J_{g'k}^{z} = \frac{B_z}{3}\Phi_{gk} - \left(\Sigma_{gk}^{t} - \Sigma_{1,k,g\to g}^{s}\right)J_{gk}^{z} + L_{gk}^{z} = 0$$

amiből a *g*-edik csoport transzverzális árama kifejezhető a fluxussal és a többi csoporthoz tartozó transzverzális árammal:

$$J_{gk}^{z} = \frac{B_{z}}{3} \frac{\Phi_{gk}}{\Sigma_{gk}^{t} - \Sigma_{1,k,g \to g}^{s}} + \frac{L_{gk}^{z}}{\Sigma_{gk}^{t} - \Sigma_{1,k,g \to g}^{s}} .$$
(45.17)

A transzverzális árammal kiegészített (45.2a) egyenlet így írható (k = 1, 2, ..., n-1):

$$a_k J_{g,k+1/2} + b_k J_{g,k-1/2} + c_{gk} \Phi_{gk} = s_{0,gk}, \qquad (45.18a)$$

ahol

$$b_k = -x_{k-1/2}^{\alpha}, \qquad a_k = x_{k+1/2}^{\alpha} = -b_{k+1},$$
 (45.18b)

$$c_{gk} = \left(\Sigma_{gk}^{t} + \frac{B_{z}^{2}/3}{\Sigma_{gk}^{t} - \Sigma_{1,k,g \to g}^{s}} - \Sigma_{0,k,g \to g}^{s} - \Sigma_{k,g \to g}^{in} \right) x_{k}^{\alpha} \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2}, \quad (45.18c)$$

$$s_{0,gk} = \left(S_{gk} + L_{0,gk} - \frac{B_z L_{gk}^z}{\Sigma_{gk}^t - \Sigma_{1,k,g \to g}^s}\right) x_k^{\alpha} \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2}.$$
 (45.18d)

(45.2c) alakja ezekkel a jelölésekkel (k = 1, 2, ..., n):

$$\frac{1}{3}\Phi_{gk} - \frac{1}{3}\Phi_{g,k-1} + d_{gk}J_{g,k-1/2} = s_{1,gk}, \qquad (45.19a)$$

ahol

$$d_{gk} = \frac{\Sigma_{g,k-1}^{t} - \Sigma_{1,k-1,g\to g}^{s} + \Sigma_{g,k}^{t} - \Sigma_{1,k,g\to g}^{s}}{2} \Delta x_{k}, \qquad (45.19b)$$

$$s_{1,gk} = L_{1,g,k-1/2} \Delta x_k$$
 (45.19c)

Ennek az egyenletrendszernek a megoldása visszavezethető egy (34.5) alakú mátrix invertálására. Az áramot kifejezzük (45.19a)-ból:

$$J_{g,k-1/2} = \frac{s_{1,gk}}{d_{gk}} + \frac{\Phi_{g,k-1} - \Phi_{gk}}{3d_{gk}}.$$

Ezt felírjuk k helyett a (k+1) indexű egyenletre is:

$$J_{g,k+1/2} = \frac{s_{1,g,k+1}}{d_{g,k+1}} + \frac{\Phi_{gk} - \Phi_{g,k+1}}{3d_{g,k+1}}.$$
(45.20a)

A kapott kifejezéseket (45.18a)-ba helyettesítjük. Némi átrendezés után a következő egyenletrendszer adódik, ha figyelembe vesszük (45.18b)-t is (k = 2, 3, ..., n-1):

$$\frac{b_{k}}{3d_{gk}} \Phi_{g,k-1} + \frac{b_{k+1}}{3d_{g,k+1}} \Phi_{g,k+1} + \left(c_{gk} - \frac{b_{k}}{3d_{gk}} - \frac{b_{k+1}}{3d_{g,k+1}}\right) \Phi_{gk} = s_{0,gk} + \frac{b_{k+1}}{d_{g,k+1}} s_{1,g,k+1} - \frac{b_{k}}{d_{gk}} s_{1,gk}.$$
(45.20b)

A k = 1-hez és k = n-hez tartozó egyenletek a határfeltételek alapján írhatjuk fel (lásd a 4.5.4. szakaszban). Ezt az egyenletrendszert ugyanúgy lehet közvetlen mátrixinverzióval megoldani, mint ahogy a 3.4. fejezetben ismertettük. A kapott megoldásból (45.20a) szerint számítjuk ki az áram értékeit. A transzverzális áramot pedig (45.17) adja meg.

4.5.4. A határfeltételek figyelembevétele

Az alábbiakban a P₁ közelítéshez tartozó határfeltételeket fogalmazzuk meg. Mindhárom geometriában: $x_{1/2} = 0$. Henger és gömb esetében ez egyben a szimmetriatengely, illetve a középpont. Síkgeometriában két párhuzamos sík által határolt réteget tekintünk. Ha ez a réteg szimmetrikus, $x_{1/2} = 0$ a szimmetriasík helye, aszimetrikus réteg esetében pedig a réteg bal széle. A szokásos határfeltételek a következők.

1. Síkgeometriában egy aszimmetrikus réteg bal szélén (x = 0) a Marshak-féle határfeltétel szerint megköveteljük: $J(0) = -\Phi(0)/2$, ha a réteg itt a vákummal határos.

A Mark-féle határfeltétel szerint: $J(0) = -\Phi(0)/\sqrt{3}$.

2. Ha a vizsgált rendszer jobb széle (x = R) a vákuummal határos felület, a Marshakféle határfeltétel szerint mindhárom geometriában előírjuk: $J(R) = \Phi(R)/2$. A

Mark-féle határfeltétel szerint: $J(R) = \Phi(R)/\sqrt{3}$.

- 3. Henger- és gömbgeometriában az áram eltűnik az x = 0 helyen. Síkgeometriában az áram szintén eltűnik az x = 0 helyen, ha a réteg szimmetrikus.
- 4. Ha a vizsgált rendszer jobb széle (x = R) az elemi cella határa, mindhárom geometriában megköveteljük: J(R) = 0. Ez a *fehér határfeltétel* következménye, amely szerint a cella határán kilépő neutronok a cella határán izotrop szögeloszlással visszaverődnek.
- 5. Az albédó-határfeltétel szerint valamilyen felületen ($x = x_s$) megköveteljük: a bemenő áram (J) kifejezhető a kilépő árammal (J^+):

$$J_{g}^{-}(x_{s}) = a_{g \to g} J_{g}^{+}(x_{s}) + \sum_{g' \neq g} a_{g' \to g} J_{g'}^{+}(x_{s}),$$

ahol

$$J_g^{\pm}(x_s) = \frac{\Phi_g(x_s)}{4} \pm \frac{J_g(x_s)}{2}.$$

A határfeltételek a k = 1-hez és k = n-hez tartozó (45.2c) alakú egyenletekkel vannak kapcsolatban. Mivel itt szerepelnek a Φ_0 és Φ_n mesterséges fluxusok, szükséges ezeket pontosan értelmezni. A k = 1 esetben úgy adódott (45.2c), hogy az (x_0, x_1) intervallumban integráltunk, jóllehet a vizsgált rendszer bal oldali határa $x_{1/2}$. Ezt úgy korrigálhatjuk, hogy az integrált csak az ($x_{1/2}, x_1$) intervallumra terjesztjük ki. Az eredmény:

$$-\frac{\Phi_1-\Phi_{1/2}}{3} + \left(-\Sigma_1^{t}J_{1/2} + Q_{1,1/2}^{j}\right)\frac{\Delta x_1}{2} = 0.$$

Ez ugyanaz, mint (IV5.2c), ha a rendszeren kívül levő rész hatáskeresztmetszeteit és lassulási forrásait nullának vesszük, továbbá $\Phi_0 = \Phi_{1/2} = \Phi(0)$. A k = n esetben hasonlóan okoskodva azt kapjuk, hogy $\Phi_n = \Phi_{n-1/2} = \Phi(R)$. A korábban mesterségesnek minősített fluxusokról ilymódon kiderült, hogy nem is merterségesek, mert a határon felvett fluxusokat jelentik. A mondottak szerint értelmezendők a többcsoport alakhoz tartozó (45.18) és (45.19) egyenletek is.

A felsorolt határfeltételek esetében az egyenletek a következőképpen alakulnak:

1. A vákuummal határos bal oldali felületen a határ az $x = x_{1/2}$ felület, amelyen (Marshak szerint) megköveteljük: $2J_{g,1/2} = -\Phi_{g,1/2} = -\Phi_{g,0}$. Ezzel:

$$J_{g,1/2} = -\frac{\Phi_{g0}}{2}.$$

A (45.18a) alakú egyenleteket csak k = 1, 2, ..., n-1-re írhatjuk fel. A most kapott egyenlet a tartozik a k = 0-hoz. Az együtthatók alkalmas megválasztásával a (45.18a) szerinti alakra hozhatjuk:

$$a_0 = 0$$
, $b_0 = 2$, $s_{0,g0} = 0$.

Ezzel (45.20b) alakú egyenletet kaphatunk:

$$-\left(\frac{1}{3d_{g1}} + \frac{1}{2}\right)\Phi_{g0} + \frac{1}{3d_{g1}}\Phi_{g1} = \frac{s_{1,g1}}{d_{g1}}.$$
(45.21)

Mark-féle határfeltétel esetében ez a következőképpen módosul:

$$-\left(\frac{1}{3d_{g1}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\Phi_{g0} + \frac{1}{3d_{g1}}\Phi_{g1} = \frac{s_{1,g1}}{d_{g1}}.$$
(45.21)

2. A vákuummal határos jobb oldali felületen a határ az $x = x_{n-1/2}$ felület, amelyen (Marshak szerint) megköveteljük: $2J_{g,n-1/2} = \Phi_{g,n-1/2} = \Phi_{g,n}$. Az eljárás analóg az előbbi esettel. A határfeltétel alapján:

$$J_{g,n-1/2}=\frac{\varPhi_{gn}}{2}.$$

Ebből szintén kaphatunk (45.20b) alakú egyenletet k = n-re:

$$-\frac{1}{3d_{gn}}\Phi_{g,n-1} + \left(\frac{1}{3d_{gn}} + \frac{1}{2}\right)\Phi_{gn} = \frac{s_{1,gn}}{d_{gn}}.$$
 (45.22)

Mark-féle határfeltétel esetében ez a következőképpen módosul:

$$-\frac{1}{3d_{gn}}\Phi_{g,n-1} + \left(\frac{1}{3d_{gn}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\Phi_{gn} = \frac{s_{1,gn}}{d_{gn}}.$$

3. A szimmetria-határfeltétel az x = 0 felületen azt jelenti, hogy itt mindegyik csoportban $J_g(0) = 0$. Ekkor k = 0-hoz az $x_{1/2} = 0$ koordináta tartozik. A határfeltétel tehát azt jelenti, hogy mindegyik csoportban:

$$J_{g,1/2} = 0$$
.

Ebből következik (vö. (45.15) és (45.19c)):

$$s_{1,g1} = 0$$

(45.19a) akkor k = 0-ra rögtön a kívánt alakú:

$$\Phi_{g0} - \Phi_{g1} = 0. \tag{45.23}$$

4. A szimmetria-határfeltétel az x = R felületen azt jelenti, hogy itt mindegyik csoportban $J_g(R) = 0$. Ekkor k = n-hez az $x_{n-1/2} = R$ koordináta tartozik. A határfeltétel tehát azt jelenti, hogy mindegyik csoportban:

$$J_{g,n-1/2} = 0$$
.

Ebből következik (vö. (45.15) és (45.19c)):

$$s_{1,gn} = 0$$
.

(45.19a) akkor k = n-re rögtön a kívánt alakú:

$$\Phi_{gn} - \Phi_{g,n-1} = 0. \tag{45.24}$$

5. Az albédó-határfeltétel a következő alakra hozható:

$$J_{g}(x_{s}) = \frac{1 - a_{g \to g}}{2(1 + a_{g \to g})} \Phi_{g}(x_{s}) - \frac{2}{1 + a_{g \to g}} \sum_{g' \neq g} a_{g' \to g} J_{g'}^{+}(x_{s}).$$

Az itt szereplő második tagot célszerű úgy kezelni, ahogy a forrásiterációt szokás: a *g*-edik csoportban a rendszerből kifolyó áramot úgy számítjuk ki, hogy a többi csoporthoz tartozó áramot és a fluxust ismertnek tételezzük fel. Vezessük be ezért a következő jelölést:

$$J_{g}^{ki}(x_{s}) = \frac{2}{1 + a_{g \to g}} \sum_{g' \neq g} a_{g' \to g} J_{g'}^{+}(x_{s}) = \frac{1}{1 + a_{g \to g}} \sum_{g' \neq g} a_{g' \to g} \left(\Phi_{g'}(x_{s}) + \frac{J_{g'}(x_{s})}{2} \right).$$

Ha bevezetjük még a

$$\gamma_g = \frac{1 - a_{g \to g}}{2\left(1 + a_{g \to g}\right)}$$

jelölést is, az albédó-határfeltétel a következő alakba megy át:

$$J_g(x_s) = \gamma_g \Phi_g(x_s) - J_g^{\rm ki}$$

A vákuummal határos felületnek az $a_{g \rightarrow g} = 0$ felel meg, amikor $\gamma_g = 1/2$. Ebben az esetben a határfeltétel átmegy a fenti 2. esetbe. Az albédó határfeltételt a rendszer jobb oldali határán tárgyaljuk. A bal oldali határon a tárgyalás analóg. A véges albédójú közeg határán tehát a következőképpen becsülhetjük a határon érvényes áramot:

$$J_{g,n-1/2} = \gamma_g \Phi_{gn} - J_{g,n-1/2}^{\text{ki}},$$

ahol:

$$J_{g,n-1/2}^{\text{ki}} = \frac{1}{1 + a_{g \to g}} \sum_{g' \neq g} a_{g' \to g} \left(\varPhi_{g',n} + \frac{J_{g',n-1/2}}{2} \right).$$

Ezekkel a jelölésekkel (45.22) helyett a

$$-\frac{1}{3d_{gn}}\Phi_{g,n-1} + \left(\frac{1}{3d_{gn}} + \gamma_g\right)\Phi_{gn} = \frac{s_{1,gn}}{d_{gn}} + J_{g,n-1/2}^{ki}.$$
 (45.25)

egyenletet kapjuk. (45.22) bal oldalát ebből a $\gamma_n = 1/2$ helyettesítéssel kapjuk. A két egyenlet közötti eltérés mindössze annyi, (45.22) jobb oldalán nem jelenik meg a (45.25)-ben szereplő kimenő áram. Így az albédó-határfeltétel a vákuum-határfeltétel általánosításának tekinthető.

5. S_N MÓDSZER

Az S_N módszer vagy a véges ordináták módszere a legelterjedtebb transzportelméleti módszer. A első változatát Wick javasolta [Wck], és Chandrasekhar dolgozta ki [ChS]. Ők a P_L közelítésből indultak ki, és meg lehet mutatni [Brf], hogy módszerük azzal teljesen egyenértékű. Később ezt Carlson [Cls] módosította. A ma használatos programok az általa kidolgozott eljárás különböző változatain alapulnak. Az S_N módszer a P_L módszernél szemléletesebb: nem a szögfüggő fluxusnak a gömbfüggvények szerinti sorfejtési együtthatóit szolgáltatja eredményül, amelyek közül csak a fluxusnak és az áramnak lehet szemléletes fizikai jelentést tulajdonítani, hanem minden térbeli osztópontban és energiacsoportban közvetlenül megadja a szögfüggő fluxust bizonyos diszkrét irányokban.

Ebben a fejezetben a következő jelöléseket fogjuk használni. A g-edik csoportra vonatkozóan a transzportegyenletet az

$$\mathbf{\Omega}_{\text{grad}}\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = Q_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) - \boldsymbol{\Sigma}_{g}(\mathbf{r})\boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$$
(5.1)

alakban írjuk, ahol $\Sigma_g(\mathbf{r})$ a teljes hatáskeresztmetszet a g-edik csoportban, továbbá:

$$Q_{g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \sum_{g'=1}^{G} \sum_{\ell} \frac{2\ell+1}{4\pi} \mathcal{L}_{\ell,g'\to g}^{s} \int_{4\pi} P_{\ell}(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}') \mathcal{\Phi}_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^{G} \mathcal{L}_{g'\to g}^{in} \int_{4\pi} \mathcal{\Phi}_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + \frac{f_{g}}{4\pi} \sum_{g'=1}^{G} v \mathcal{L}_{g'}^{f} \int_{4\pi} \mathcal{\Phi}_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'$$
(5.2)

a forrás a *g*-edik csoportban [vö. (45.5b)]. A szórási magfüggvény sorfejtése konkrét számításokban szükségképpen véges. Egyelőre érdektelen, hány tagot veszünk figyelembe. Az " ℓ " változóra vonatkozó összegzésben ezért nem adjuk meg a sor tagjainak a számát.⁴³ Tekintve, hogy – a többi számítási módszerhez hasonlóan – az S_N módszer esetében is forrásiterációt alkalmazunk, az (5.1) egyenletnek egy kiszemelt energiacsoportban való megoldásakor a Q_g forrást adottnak vesszük, és az (5.1) egyenletet mindegyik *g*-re külön oldjuk meg. Erre való tekintettel a *g* csoportindexet az alábbiakban csak akkor tesszük ki, amikor *van* jelentősége a különböző csoportfluxusok egymástól való megkülönböztetésének. Σ_g -hez nem írtunk másik indexet: ha a forrást (5.2) szerint írjuk fel, ez a *teljes* hatáskeresztmetszet. Előfordulhat, hogy a szórásokra vonatkozó tagokban az összegzésből kihagyjuk a *g*' = *g* tagot: ekkor Σ_g a *removal* és az *abszorpciós* hatáskeresztmetszet összege.

⁴³ Ha megadnánk, az utolsó tag indexét nyilván "*L*"-lel jelölnénk, ami kerülendő, hiszen összetéveszthető a P_L közelítésnél használt jelöléssel, ahol *L* egy másik sorban, a *szögfüggő fluxus* sorfejtésében figyelembe vett tagok számát jelenti.

A teljes 4π térszögtartományt felosztjuk *n* számú szegmensre: k = 1, 2, ..., n.⁴⁴ A *k*-adik szegmenst jellemző irányvektor Ω_k , az egységgömbnek a szegmenshez tartozó felülete $4\pi w_k$. A w_k tényezőt a *szegmens súlyá*nak fogjuk nevezni. A szögfüggő fluxusnak a szegmenshez tartozó átlagát a következő képlet adja meg:

$$4\pi w_k \overline{\Phi}_{gk}(\mathbf{r}) = \int_k \Phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} \approx \Phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_k) \int_k d\mathbf{\Omega}, \qquad (5.3)$$

ahol az integrál jele alá írt "k" betű a k-adik szegmensre vonatkozó integrálást jelenti. A 4π -vel való szorzás azért jelent meg, mert az S_N módszerben a w_k súlyokat általában 1-re szoktuk normálni:

$$\sum_{k=1}^{n} w_k = 1.$$
(5.4)

Az Ω_k vektorok és a w_k súlyok megválasztását az 5.2. fejezetben tárgyaljuk. Az S_N egyenleteket úgy kapjuk meg, hogy az (5.1) egyenletet a *k*-adik szegmensre integráljuk. Annak érdekében, hogy az integrálok közelítő felírása minél egyszerűbb legyen, megállapodunk a következőben: ha Φ -hez vagy Q-hoz hozzáírjuk a "*k*" indexet, akkor ez azt jelenti, hogy az illető mennyiségnek az $\Omega = \Omega_k$ helyen felvett értékét 4π -vel már beszoroztuk:⁴⁵

$$\boldsymbol{\Phi}_{gk}(\mathbf{r}) = 4\pi \overline{\boldsymbol{\Phi}}_{gk}(\mathbf{r}) \approx 4\pi \boldsymbol{\Phi}_{g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{k})$$
(5.5a)

és

$$Q_{gk}(\mathbf{r}) = 4\pi \overline{Q}_{gk}(\mathbf{r}) \approx 4\pi Q_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_k).$$
(5.5b)

A felülhúzás a *k*-adik szegmensre való átlagolást jelöli. Egy tetszőleges $h(\Omega)$ függvénynek a teljes térszögre való integrálját a w_k súlyok segítségével számíthatjuk ki (vö. (5.3) és (5.5)):

$$\int_{4\pi} h(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \sum_{k=1}^{n} \int_{k} h(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} \cong 4\pi \sum_{k=1}^{n} w_{k} h(\mathbf{\Omega}_{k}) = \sum_{k=1}^{n} w_{k} h_{k} .$$
(5.6)

Ebből és (5.2)-ből következik:

$$Q_{gk}(\mathbf{r}) \cong \sum_{g'=1}^{G} \sum_{\ell} (2\ell+1) \Sigma_{\ell,g' \to g}^{s} \sum_{k'=1}^{n} w_{k'} P_{\ell}(\mathbf{\Omega}_{k}\mathbf{\Omega}_{k'}) \Phi_{g'k'}(\mathbf{r}) +$$

+
$$\sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{g' \to g}^{in} \sum_{k'=1}^{n} w_{k'} \Phi_{g'k'}(\mathbf{r}) + f_{g} \sum_{g'=1}^{G} \nu \Sigma_{g'}^{f} \sum_{k'=1}^{n} w_{k'} \Phi_{g'k'}(\mathbf{r}).$$
(5.7)

⁴⁴ Innen származik a módszer neve: "S_N"-ben a "S" a szegmensekre utal. Eredetileg egy dimenziós rendszereket vizsgáltak (sík-, henger- és gömbgeometriában). Ekkor *N* a szegmensek számát jelentette. Amikor több dimenziós rendszert tekintünk, *N* az Ω vektor egyik összetevője szerint felvett osztópontok száma. Ezért használjuk itt a szegmensek *teljes* számára az "*n*" jelölést.

 $^{^{45}}$ Az S_N módszert tárgyaló művek többsége alkalmazza ezt a jelölési konvenciót.
5.1. Az S_N módszer egyes geometriákban

5.1.1. Négyszögletes geometria

Először a négyszögletes geometriával foglalkozunk, amelyben a kifolyási tag a következő:

$$\Omega \operatorname{grad} \Phi(\mathbf{r}, \Omega) = \Omega_{\mathrm{x}} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \Omega)}{\partial x} + \Omega_{\mathrm{y}} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \Omega)}{\partial y} + \Omega_{\mathrm{z}} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \Omega)}{\partial z}.$$

Ennek a k-adik szegmensre való integrálása nem okoz gondot. Ha ugyanis (5.1)-et integráljuk, a

$$w_{k} \Omega_{k}^{x} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})}{\partial x} + w_{k} \Omega_{k}^{y} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})}{\partial y} + w_{k} \Omega_{k}^{z} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})}{\partial z} = w_{k} Q_{k}(\mathbf{r}) - w_{k} \Sigma(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})$$
(51.1)

egyenletet kapjuk. Az Ω irányvektor komponenseinek a diszkretizálása nem tetszőleges, mert minden szegmensre teljesülnie kell az

$$\left(\Omega_k^{\mathrm{x}}\right)^2 + \left(\Omega_k^{\mathrm{y}}\right)^2 + \left(\Omega_k^{\mathrm{z}}\right)^2 = 1$$
(51.2)

feltételnek. Abban az esetben, amikor két térbeli dimenzióban tárgyaljuk a vizsgált rendszert, az Ω irányvektornak csak két komponense marad, és csak két térbeli derivált szerepel. Az Ω szerinti diszkretizálás ekkor a megmaradó két komponensre egymástól annyiban független, hogy nem vonatkozik rájuk egy (51.2) szerinti megszorítás. Mint az 5.2. fejezetben látni fogjuk, ennek következményei vannak az S_N egyenletek számára vonatkozóan. A térbeli diszkretizálással az 5.3. fejezetben foglalkozunk.

5.1.2. Gömbgeometria

A kifolyási tagnak a gömbgeometriára vonatkozó konzervatív alakját (F3.1)ben írtuk fel. Ha bevezetjük a

 $\cos\theta = \mu$

jelölést, (5.1) így írható:

$$\frac{\mu}{r^2} \frac{\partial \left[r^2 \Phi(r,\mu)\right]}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \left[\left(1-\mu^2\right) \Phi(r,\mu)\right]}{\partial \mu} = Q(r,\mu) - \Sigma(r) \Phi(r,\mu). \quad (51.3)$$

Az r sugarak teljes tartományát felosztjuk intervallumokra: (r_i, r_{i+1}) . Bevezetjük a

$$\Phi_i(\mu) = \Phi(r_i, \mu) \quad \text{és} \quad Q_i(\mu) = Q(r_i, \mu)$$

jelöléseket. (51.3)-at beszorozzuk $4\pi r^2$ -tel és integráljuk az (r_i, r_{i+1}) intervallumban:

$$\mu \Big(A_{i+1} \Phi_{i+1} \Big(\mu \Big) - A_i \Phi_i \Big(\mu \Big) \Big) + \int_{r_i}^{r_{i+1}} 4\pi r \frac{\partial \Big[\Big(1 - \mu^2 \Big) \Phi \Big(r, \mu \Big) \Big]}{\partial \mu} dr =$$

$$= \int_{r_i}^{r_{i+1}} 4\pi r^2 \Big[Q(r,\mu) - \Sigma(r) \Phi(r,\mu) \Big] dr .$$
 (51.4)

 A_i az *i*-edik felület területe:

$$A_i = 4\pi r_i^2 \, .$$

A bal oldal második tagjának *a teljes térszögre* való integrálja eltűnik. Az S_N módszer szerint mindegyik szegmensre külön-külön kell az integrált kiszámítanunk, és ebben a bal oldal mindkét tagja ad járulékot.

Gömbgeometriában a szegmensek a μ változó szerinti diszkretizálást jelentenek. A *k*-adik szegmenshez tartozó felület d $\Omega_k = 2\pi d\mu_k$, amiből a szegmens súlya:

$$w_k = \frac{\mathrm{d}\Omega_k}{4\pi} = \frac{\mathrm{d}\mu_k}{2} \,.$$

A szegmensre való integrálás egyrészt 2π -vel való szorzást, másrészt a ($\mu_{k-1/2}, \mu_{k+1/2}$) intervallumban való integrálást jelent. Egy tetszőleges $h(\mu)$ függvényre vonatkozóan ez a következőképpen közelítjük:

$$2\pi \int_{\mu_{k-1/2}}^{\mu_{k+1/2}} h(\mu) d\mu \cong w_k h_k = 4\pi w_k h(\mu_k).$$
(51.5)

Az (51.4) első tagjának az integrálja tehát:

$$2\pi \int_{\mu_{k-1/2}}^{\mu_{k+1/2}} \mu(A_{i+1}\boldsymbol{\Phi}_{i+1}(\mu) - A_i\boldsymbol{\Phi}_i(\mu)) d\mu \cong w_k \mu_k (A_{i+1}\boldsymbol{\Phi}_{i+1,k} - A_i\boldsymbol{\Phi}_{ik}).$$
(51.6a)

A bal oldal második tagjának az integrálja:

$$2\pi \int_{\mu_{k-1/2}}^{\mu_{k+1/2}} \int_{r_{i}}^{r_{i+1}} 4\pi r \frac{\partial \left[\left(1 - \mu^{2} \right) \Phi(r, \mu) \right]}{\partial \mu} dr d\mu = 2\pi \left[\int_{r_{i}}^{r_{i+1}} 4\pi r \left(1 - \mu^{2} \right) \Phi(r, \mu) dr \right]_{\mu=\mu_{k-1/2}}^{\mu_{k+1/2}} = a_{k+1/2} \Phi_{i+1/2, k+1/2} - a_{k-1/2} \Phi_{i+1/2, k-1/2},$$
(51.6b)

ahol

$$a_{k\pm 1/2} = \frac{1-\mu_{k\pm 1/2}^2}{2} \frac{\int\limits_{r_i}^{r_{i+1}} 4\pi r \Phi_{k\pm 1/2}(r) dr}{\Phi_{i+1/2,k\pm 1/2}},$$
(51.6c)

ahol:

$$\Phi_{i+1/2,k\pm 1/2} = \frac{\int_{r_i}^{r_{i+1}} 4\pi r^2 \Phi_{k\pm 1/2}(r) dr}{V_i}, \qquad V_i = \frac{4\pi (r_{i+1}^3 - r_i^3)}{3}.$$

Ay (*i*+1/2) indexű mennyiségek (fluxusok és források) az *i*-edik gömbhéjra vett átlagok. Az $a_{k\pm 1/2}$ együtthatók meghatározására még visszatérünk. Végül a jobb oldal integrálja:

$$2\pi \int_{\mu_{k-1/2}}^{\mu_{k+1/2}} \int_{r_i}^{r_{i+1}} 4\pi r^2 \Big[Q(r,\mu) - \Sigma(r) \Phi(r,\mu) \Big] dr d\mu \cong w_k V_i \Big(Q_{i+1/2,k} - \Sigma_{i+1/2} \Phi_{i+1/2,k} \Big).$$
(51.6d)

Végeredményben tehát az (51.3) egyenlet S_N változata az (51.6) egyenletek alapján adódik:

$$\mu_{k} \Big(A_{i+1} \boldsymbol{\Phi}_{i+1,k} - A_{i} \boldsymbol{\Phi}_{ik} \Big) + \frac{a_{k+1/2} \boldsymbol{\Phi}_{i+1/2,k+1/2} - a_{k-1/2} \boldsymbol{\Phi}_{i+1/2,k-1/2}}{w_{k}} = V_{i} \Big(Q_{i+1/2,k} - \boldsymbol{\Sigma}_{i+1/2} \boldsymbol{\Phi}_{i+1/2,k} \Big).$$
(51.7)

Az $a_{k\pm 1/2}$ együtthatókat nem az (51.6c) definíció alapján célszerű kiszámítani. Jobb a fentiekben tett észrevételből kiindulni, amely szerint a μ szerint a teljes (–1, 1) tartományra való integrálásakor az (51.6b) tagok zérust adnak. Összegezzük tehát ezeket *k*-ra:

$$\sum_{k=1}^{n} \left(a_{k+1/2} \Phi_{i+1/2,k+1/2} - a_{k-1/2} \Phi_{i+1/2,k-1/2} \right) =$$

= $-a_{1/2} \Phi_{i+1/2,1/2} + a_{n+1/2} \Phi_{i+1/2,n+1/2} = 0.$

Mivel ennek bármilyen fluxusértékekre el kell tűnnie, ez csak úgy lehetséges, ha:

$$a_{1/2} = a_{n+1/2} = 0. (51.8a)$$

Tekintsünk egy nagy, homogén gömböt, amelynek a közepén jó közelítéssel izotrop és *r*-től független fluxus alakul ki. Ebből következik, hogy az (51.3) egyenlet baloldalának mindkét tagja eltűnik. (51.6a) és (51.6b) szerint ez azt jelenti, hogy:

$$a_{k+1/2} = a_{k-1/2} - w_k \mu_k (A_{i+1} - A_i).$$
(51.8b)

Az (51.8a) kezdeti értékből kiindulva ebből az együtthatók felépíthetők:

$$a_{3/2} = -w_1 \mu_1 (A_{i+1} - A_i), \qquad a_{5/2} = a_{3/2} - w_2 \mu_2 (A_{i+1} - A_i)$$

és így tovább. Nyilvánvaló, hogy ezek az együtthatók függnek *i*-től. Ha az (51.8b) egyenletet k = 1, 2, ..., n-re összegezzük, (51.8a) akkor teljesül, ha

$$\sum_{k=1}^n w_k \mu_k = 0,$$

ami az integrálási súlyokra vonatkozóan minimális követelmény.

5.1.3. Hengergeometria

A hengergeometriához tartozó kifolyási tag konzervatív alakját (F3.2)-ben felírtuk. Az

$$\Omega_{\rm r} = \sin\theta\cos\varphi, \qquad \Omega_{\varphi} = \sin\theta\sin\varphi, \qquad \Omega_{\rm z} = \cos\theta$$

jelölésekkel (5.1) a következő alakra hozható:

$$\Omega_{\rm r} \frac{\partial (r\Phi)}{\partial r} - \frac{\partial (\Omega_{\varphi}\Phi)}{\partial \varphi} + \Omega_{\rm z} r \frac{\partial \Phi}{\partial z} = rQ - r\Sigma\Phi, \qquad (51.9)$$

ahol $\Phi = \Phi(r,z,\Omega)$ és $Q = Q(r,z,\Omega)$. Integráljuk az egyes tagokat a *k*-adik szegmensre:

$$\int_{k} \Omega_{\rm r} \frac{\partial(r\Phi)}{\partial r} \mathrm{d}\mathbf{\Omega} \cong w_{k} \Omega_{k}^{\rm r} \frac{\partial(r\Phi_{k})}{\partial r}.$$
(51.10a)

Hasonlóan egyszerű a bal oldal harmadik tagjának az integrálja:

$$\int_{k} \Omega_{z} r \frac{\partial \Phi}{\partial z} d\mathbf{\Omega} \cong w_{k} \Omega_{k}^{z} r \frac{\partial \Phi_{k}}{\partial z}.$$
(51.10b)

A bal oldal második tagját (51.6b) mintájára közelítjük:

$$\int_{k} \frac{\partial (\Omega_{\varphi} \Phi)}{\partial \varphi} \mathrm{d} \mathbf{\Omega} \cong a_{k+1/2} \Phi_{k+1/2}(r, z) - a_{k-1/2} \Phi_{k-1/2}(r, z).$$
(51.10c)

Az itt szereplő együtthatók meghatározására még visszatérünk. Végül integráljuk (51.9) jobb oldalát:

$$\int_{k} (rQ - r\Sigma\Phi) d\mathbf{\Omega} \cong w_{k} (rQ_{k} - r\Sigma\Phi_{k}).$$
(51.10d)

Meg kell még határozunk az (51.10c) képlet együtthatóit. Ha rögzítjük Ω_z értékét, (51.9) második tagjának φ szerinti integrálja eltűnik, és – a gömbgeometria analógiájára – ez lehetővé teszi az $a_{k+1/2}$ együtthatók meghatározását. Az 5.2. fejezetben látni fogjuk, hogy háromdimenziós geometriában (amilyen a hengergeometria is) a szegmensek k indexe valójában két indexet takar: először kiválasztjuk Ω_z egyik diszkrét értékét, majd ezt megtartva egy másik index (j) végigfut az így kapott réteghez tartozó szegmenseken. Ezt jelenti a φ szerint való integrálás. Jelöljük n_z -vel a kiválasztott rétegben levő szegmensek számát. Fennáll tehát:

$$0 = \sum_{j=1}^{n_z} \left(a_{j+1/2} \Phi_{j+1/2} - a_{j-1/2} \Phi_{j-1/2} \right) = a_{n_z+1/2} \Phi_{n_z+1/2} - a_{1/2} \Phi_{1/2},$$

ami csak úgy teljesülhet minden fluxusra, hogy a jobb oldalon álló együtthatók minden rétegre eltűnnek:

$$a_{n_x+1/2} = a_{1/2} = 0. (51.11a)$$

A többi együtthatót úgy kapjuk, hogy veszünk egy állandó és izotrop fluxust, amelyre a kifolyási tag azonosan eltűnik. Ezt az (51.10a) - (51.10c) egyenletekbe helyettesítve kapjuk:

$$a_{i+1/2} = a_{i-1/2} - w_i \Omega_i^{\mathrm{r}}$$
 (51.11b)

A keresett együtthatókat ebből egyszerű rekurzióval előállíthatjuk.

5.2. A szegmensek megválasztása

A szegmensek megválasztására az S_N módszer Wick-ChandraSekar-féle változatában [Brf] láttunk példát, amely szerint a források kiszámításához szükséges integrálokat Gauss-kvadratúrával közelítjük. A 2. függelékben megmutatjuk, hogy ha n szegmenssel dolgozunk, ez az integrálás egzakt mindaddig, amíg az integrálandó függvény legfeljebb (2n-1)-edfokú polinom. Ugyanezek a szegmensek használhatók gömbgeometriában is. Az általános esetben azonban a szegmensek és hozzájuk rendelt súlyok megválasztását különböző feltételek korlátozzák. Először ezeket vesszük sorra.

5.2.1. Szegmensek az általános esetben

Az általános esetben mindenekelőtt teljesülniük kell az (5.4) és (51.2) összefüggéseknek. További feltételek is érvényesek. Izotrop szögfüggő fluxus esetében a neutronáram mindegyik komponense eltűnik. Mivel

$$\mathbf{J} = \int_{4\pi} \mathbf{\Omega} \, \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} \cong \sum_{k} w_{k} \mathbf{\Omega}_{k} \, \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})$$

 $\Phi_k(\mathbf{r}) \equiv C$ (állandó) esetében az áram csak úgy lehet zérus, ha teljesül:

$$\sum_{k} w_k \Omega_k^{\mathrm{x}} = 0, \qquad \sum_{k} w_k \Omega_k^{\mathrm{y}} = 0, \qquad \sum_{k} w_k \Omega_k^{\mathrm{z}} = 0.$$
(52.1)

Ezt általánosítva megkövetelhetjük, hogy az Ω vektor komponenseinek minden páratlan kitevőjű momentuma eltűnjön. Izotrop fluxus esetében ugyanis minden páratlan ℓ re eltűnnek a gömbfüggvények szerinti sorfejtés $\Phi_{\ell m}$ függvényei. Ezt legegyszerűbben úgy biztosíthatjuk, hogy a szegmensekhez tartozó Ω_k vektorok komponensei 0-hoz képest szimmetrikusan helyezkednek el, továbbá a megfelelő súlyok megegyeznek. További feltétel az ún. *diffúziós feltétel* (vagy másodikmomentum-feltétel), amely szerint megköveteljük, hogy a szögfüggő fluxusnak a (41.1) szerinti sorfejtése legalább a P₁ közelítés rendjéig érvényes legyen:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}) + \frac{3}{4\pi} \boldsymbol{\Omega} \mathbf{J}(\mathbf{r}) + \dots$$

Egyszerűen beláthatjuk, hogy ez akkor teljesül biztosan, ha fennáll:

$$\sum_{k} w_{k} \left(\Omega_{k}^{\mathrm{x}} \right)^{2} = \frac{1}{3}, \qquad \sum_{k} w_{k} \left(\Omega_{k}^{\mathrm{y}} \right)^{2} = \frac{1}{3}, \qquad \sum_{k} w_{k} \left(\Omega_{k}^{\mathrm{z}} \right)^{2} = \frac{1}{3}.$$
(52.2)

Nézzük például a J_x komponenst, amelyre fenn kell állnia, hogy

$$J_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}) = \sum_{k} w_{k} \mathcal{Q}_{k}^{\mathbf{x}} \boldsymbol{\Phi}_{k}(\mathbf{r})$$

A jobb oldalon – (52.1) alapján – az első tag integráljának a közelítése eltűnik, a második tagé pedig

$$J_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}) = 3\sum_{k} w_{k} \Omega_{k}^{\mathbf{x}} \cdot \Omega_{k}^{\mathbf{x}} J_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}) = 3J_{\mathbf{x}}(\mathbf{r})\sum_{k} w_{k} (\Omega_{k}^{\mathbf{x}})^{2},$$

amiből következik (52.2). Az $\Omega_k^x \cdot \Omega_k^y$ és $\Omega_k^x \cdot \Omega_k^z$ szorzatok összege a szegmensek szimmetriái miatt eltűnnek. Ezeket általánosítva megkövetelhetjük páros ℓ -ekre:

$$\sum_{k} w_k \left(\Omega_k^{\mathbf{x}} \right)^{\ell} = \frac{1}{\ell+1}, \qquad \sum_{k} w_k \left(\Omega_k^{\mathbf{y}} \right)^{\ell} = \frac{1}{\ell+1}, \qquad \sum_{k} w_k \left(\Omega_k^{\mathbf{z}} \right)^{\ell} = \frac{1}{\ell+1}.$$

(52.3)

A felsoroltakon kívül további feltételeket is célszerű megfogalmazni. Ezekhez tekintsük az 5.2.1. ábrát. Logikus megkövetelni, hogy az S_N számítás eredménye ne függjön attól, hogyan helyezzük el az Ω_x , Ω_y és Ω_z komponensek tengelyeit a koordinátarendszer x-, y- és z-tengelyeihez képest. Ha például a z tengely felfelé mutat, a számítási eredmény nem változhat meg akkor, ha lefelé irányítjuk. Ebből következik, hogy a szegmensek elhelyezkedésének mindegyik koordinátasíkra vonatkozóan szimmetrikusnak kell lenniük. Továbbá az eredmények akkor sem változhatnak meg, ha – például – felcseréljük az x- és y-komponenseket. Emiatt a szegmenseknek nem szabad megváltozniuk, ha a koordinátarendszert bármelyik irányban 90°-kal elfordítjuk.



5.2.1. ábra. Teljesen szimmetrikus S₆ szegmensek

A szegmensek elrendezése tehát olyan, hogy az Ω_x , Ω_y és Ω_z komponensek azonos értékeket vesznek fel. Továbbá, ha egy μ_k érték előfordul közöttük, akkor $-\mu_k$ is köztük van, végül mindkettő w_k súlya azonos. Amikor S_N közelítésről beszélünk, ez azt jelenti, hogy az egyik tengely mentén *N* szegmenst veszünk fel. Az egységgömb nyolc azonos oktánsra bontható, amelyek közül az egyiket ábrázoltuk az 5.2.1. ábrán. Az Ω_z komponens lehetséges értékei szerint a szegmenseket rétegekbe rendezhetjük. Az ábrán látható esetben 3 réteg van: az elsőn 3, a másodikon 2, a harmadikon pedig 1 szegmens található. Általában egy oktáns *N*/2 réteget tartalmaz, a *j*-ediken található szegmensek száma (*N*/2–*j*+1), tehát az oktánsban levő szegmensek száma:

$$\sum_{j=1}^{N/2} \left(\frac{N}{2} - j + 1 \right) = \frac{N(N+2)}{8}.$$

A szegmensek teljes száma 8-szor ennyi, tehát N(N+2). Az 5.2.1. *ábrá*ról leolvasható továbbá, hogy a *j*-edik rétegen a szegmensek másik két indexének összege állandó:

$$j' + j'' = \frac{N}{2} - j + 2.$$
(52.4)

Írjuk fel ennek alapján két szomszédos szegmensre az (51.2) feltételt:

$$1 = \left(\Omega_{j'}^{\mathbf{x}}\right)^2 + \left(\Omega_{j''}^{\mathbf{y}}\right)^2 + \left(\Omega_{j}^{\mathbf{z}}\right)^2 = \left(\Omega_{j'+1}^{\mathbf{x}}\right)^2 + \left(\Omega_{j''-1}^{\mathbf{y}}\right)^2 + \left(\Omega_{j}^{\mathbf{z}}\right)^2,$$

vagyis:

$$\left(\Omega_{j''}^{\mathbf{y}}\right)^2 - \left(\Omega_{j''-1}^{\mathbf{y}}\right)^2 = \left(\Omega_{j'+1}^{\mathbf{x}}\right)^2 - \left(\Omega_{j'}^{\mathbf{x}}\right)^2 = \Delta.$$

Ebből következik, hogy teljesen szimmetrikus szegmensek esetében

$$\left(\Omega_{j'}^{\mathbf{x}}\right)^{2} = \left(\Omega_{1}^{\mathbf{x}}\right)^{2} + \left(j'-1\right)\Delta \quad \text{és} \qquad \left(\Omega_{j''}^{\mathbf{y}}\right)^{2} = \left(\Omega_{1}^{\mathbf{y}}\right)^{2} + \left(j''-1\right)\Delta. \tag{52.5}$$

A korábban mondottak értelmében azt is meg kell követelnünk, hogy

$$\left(\boldsymbol{\varOmega}_{1}^{\mathrm{y}}\right)^{2} = \left(\boldsymbol{\varOmega}_{1}^{\mathrm{x}}\right)^{2}$$

legyen. Δ értékét úgy kapjuk meg, hogy az (51.2) feltételt felírjuk a j = 1 réteg utolsó szegmensére (j' = N/2):

$$\left(\Omega_1^{\mathbf{x}}\right)^2 + \left(\frac{N}{2} - 1\right)\Delta + \left(\Omega_1^{\mathbf{y}}\right)^2 + \left(\Omega_1^{\mathbf{z}}\right)^2 = 3\left(\Omega_1^{\mathbf{x}}\right)^2 + \left(\frac{N}{2} - 1\right)\Delta = 1,$$

amiből:

$$\Delta = \frac{2\left(1 - 3\left(\Omega_1^{\rm x}\right)^2\right)}{N - 2}.$$
(52.6)

Látjuk, hogy a teljes szimmetria jelentős megszorítást jelent, hiszen az egyetlen szabadon megválasztható paraméter Ω_1^x .

Hátravan még a w_k súlyok meghatározása, ami szintén a szimmetriák figyelembevételével történik. Ha az 5.2.1. *ábrá*n látható oktánsra oldalról ránézünk, egy szabályos háromszöget látunk. N értékétől függően meg kell keresnünk az ekvivalens helyzetű szegmenseket, amelyekhez azonos súlyt kell rendelnünk. A súlyok értékét a páros momentumokra felírt (52.3) feltételek alapján határozzuk meg. Néhány példa:

- S₂ közelítésben az oktáns egyetlen szegmenst tartalmaz. (51.2)-ből következik, hogy ekkor $\Omega_1^x = 1/\sqrt{3} = 0.577350$. (5.4) szerint ekkor $w_k \equiv 1/8$.
- S₄ közelítésben az oktáns három szegmenst tartalmaz, amelyek pozíciója azonos, vagyis minden szegmensnek ismét közös súlya van: w_k ≡ 1/24, hiszen a szegmensek száma most 24. (52.5) és (52.6) szerint: (Ω₂^x)² = 1 − 2(Ω₁^x)². Mivel ebből öszszesen 8 szegmens van, (Ω₁^x)² -ből pedig 16, ezek ℓ = 2-re automatikusan kielégítik az (52.3) feltételt. Ha azt is megköveteljük, hogy ez a feltétel ℓ = 4-re is kielégüljön, akkor (Ω₁^x)² -re egy másodfokú egyenletet kapunk, amelynek a megoldása:

$$\Omega_1^{\rm x} = 0.350021$$
 és $\Omega_2^{\rm x} = 0.868890$.

• S₆ közelítésben az oktáns hat szegmenst tartalmaz, mint az 5.2.1. ábrán látható. Ezek helyzete már eltérő, amit a következő háromszöggel szemléltetünk:

$$\begin{array}{c}1\\2&2\\1&2&1\end{array}$$

Ez azt jelenti, hogy a súlyok között két érték fordul elő: a sarokszegmensek súlya W_1 , a 2-vel jelölt szegmenseké pedig W_2 . Mivel a szegmensek teljes száma 48, (5.4) azt jelenti, hogy

$$24W_1 + 24W_2 = 1$$
, vagyis $W_1 + W_2 = \frac{1}{24}$. (52.7a)

(52.5) és (52.6) alapján:

$$\left(\Omega_2^{\mathrm{x}}\right)^2 = \frac{1 - \left(\Omega_1^{\mathrm{x}}\right)^2}{2}, \qquad \left(\Omega_3^{\mathrm{x}}\right)^2 = 1 - 2\left(\Omega_1^{\mathrm{x}}\right)^2.$$

Az ℓ = 2-höz tartozó momentumfeltétel:

$$8(2W_1 + W_2)(\Omega_1^x)^2 + 8 \cdot 2 \cdot W_2 \frac{1 - (\Omega_1^x)^2}{2} + 8W_1(1 - 2(\Omega_1^x)^2) = \frac{1}{3}.$$
 (52.7b)

Az ℓ = 4-hez tartozó momentumfeltétel:

$$8(2W_1 + W_2)(\Omega_1^x)^4 + 8 \cdot 2 \cdot W_2 \left(\frac{1 - (\Omega_1^x)^2}{2}\right)^2 + 8W_1 \left(1 - 2(\Omega_1^x)^2\right)^2 = \frac{1}{5}.$$
 (52.7c)

Könnyű belátni, hogy (52.7b) automatikusan teljesül, tehát fel kell írni az $\ell = 6$ -hoz tartozó momentumfeltételt is:

$$8(2W_1 + W_2)(\Omega_1^x)^6 + 8 \cdot 2 \cdot W_2 \left(\frac{1 - (\Omega_1^x)^2}{2}\right)^3 + 8W_1 \left(1 - 2(\Omega_1^x)^2\right)^3 = \frac{1}{7}.$$
 (52.7d)

A (52.7a), (52.7c) és (52.7d) egyenletekből a három ismeretlen meghatározható: W_1, W_2 és $(\Omega_1^x)^2$.

A magasabb S_N közelítéseket nem vizsgáljuk a fenti részletességgel, de megmutatjuk a súlyfaktorok különböző értékeinek háromszögét:

2	2	3	4
3 3	3 3	4 4	5 5
3 1 3	4 1 4	5 1 5	626
2 3 3 2	3 1 1 3	5 2 2 5	7 3 3 7
	2 3 4 3 2	4 1 2 1 4	63136
		3 4 5 5 4 3	5 2 3 3 2 5
			4 5 6 7 6 5 4
S_8	\mathbf{S}_{10}	S_{12}	S_{14}

Látható, hogy az S₈ séma közepén van az S₂ séma, S₁₀ közepén az S₄, S₁₂ közepén az S₆, S₁₄ közepén az S₈ és így tovább. Általában: az S_N séma közepén található az S_{N-6} séma. Ennek az észrevételnek az alapján egyszerűen felépíthetjük bármelyik sémát. Az új pozíciók száma is egyszerűen leolvasható a fenti sémákból: [(N+2)/4], ahol [x] az x szám egész részét jelenti. Ha N osztható 4-gyel, akkor a legnagyobb sorszámú pozíció 6-szor fordul elő a háromszögben, ha nem osztható 4-gyel akkor csak 3-szor. Ha n_N -nel jelöljük a különböző pozíciók számát, akkor ez a következő rekurzióval állítható elő:

$$n_N = n_{N-6} + \left[\frac{N+2}{4}\right], \qquad N \ge 8; \ n_2 = n_4 = 1, \qquad n_6 = 2.$$
 (52.8)

Az S_N közelítésben $\ell \le n_N$ -re lehet az (52.3) feltételeket pontosan kielégíteni.

5.2.2. Szegmensek két dimenzióban

Két dimenziós geometriákban csak négy oktánst kell tekinteni, mivel a rendszer szimmetrikus valamelyik változója szerint. Nézzük először az X–Y geometriát, amelynek az esetében a vizsgált rendszer szimmetrikus a z tengely mentén. Ez azt jelenti, hogy az 5.2.1. ábra szerint elég az Ω_z összetevő pozitív (vagy negatív) értékeit tekinteni. Ha csak az $\Omega_z > 0$ -hoz tartozó szegmenseket tartjuk meg, akkor ez négy kvadránst, vagyis egy egységsugarú félgömböt jelent. Ω másik két komponensének a diszkretizálása követheti az előző fejezetben tárgyalt teljesen szimmetrikus szegmenseket.

A kétdimenziós *R–Z geometriá*ban a vizsgált rendszer szimmetrikus az Ω_{ϕ} komponens szerint. Eszerint elég az $\Omega_{\phi} > 0$ -hoz tartozó szegmenseket megtartani, ami ismét négy kvadránst, vagyis egy egységsugarú félgömböt jelent. A megmaradó komponensek szerint itt is legegyszerűbb a teljesen szimmetrikus szegmenseket használni.

Speciális alkalmazásokban azonban célszerű lehet a teljesen szimmetrikus szegmensektől eltérni. A következő fejezetben ilyen sémát mutatunk a hengergeometria számára.

5.2.3. Egydimenziós geometriák

Egydimenziós sík- és gömbgeometriákban a Gauss–Legendre-kvadratúrát szoktuk alkalmazni. Róluk tehát a jelen fejezetben többet mondani nem szükséges. A hengergeometria azonban speciális sémát igényel, mert itt nem kerülhető meg az Ω vektor mindhárom komponense szerinti integrálás. Egydimenziós hengergeometriában a vizsgált rendszer szimmetrikus mind az Ω_z és Ω_{φ} komponensekre vonatkozóan, ezért elég két oktánst tekinteni, nevezetesen azokat, amelyek $\Omega_{\varphi} > 0$ -hoz és $\Omega_z > 0$ -hoz tartoznak. A vizsgálandó tartomány tehát az egységgömb negyede.

Ebben a geometriában a θ és φ szerinti integrálokra kell alkalmas közelítést találni. A transzportegyenletben szereplő, Ω szerinti integrálok

$$I = \int_{0}^{1} d(\cos\theta) \int_{0}^{\pi} f(\mathbf{\Omega}) d\phi$$
(52.9)

alakú integrálra vezethetők vissza. A 2. függelékben megmutatjuk, hogy ebben a φ -re vonatkozó integrálást Gauss–Csebisev-kvadratúrával célszerű közelíteni. A másik

komponens, vagyis az $\Omega_z = \cos\theta$ szerinti integrált a Gauss-Legendre-kvadratúrával a legjobb közelíteni.

A fentiekben megfogalmazott séma nem szimmetrikus séma. Sem az Ω_z , sem a φ szerinti kvadratúra alappontjai nem felelnek meg a teljesen szimmetrikus séma alappontjainak. Amikor S_N módszerről beszélünk, ez azt jelenti, hogy az Ω_z szerinti integrálásban N/2 alappontot választunk, de nem követeljük meg, hogy Ω_z minden értékére a φ szerinti integrálásban is ennyi alappontot használjunk (bár ez is lehetséges). A gyakorlatban az terjedt el, hogy az Ω_z szerinti szintekben felfelé haladva 1gyel csökken az oktánsban levő alappontok száma.

5.2.4. Speciális sémák

Vannak esetek, amelyekben a fenti sémák egyike sem felel meg. Ezekben különlegesen szerkesztett szegmenseket használunk. Néhány példa:

- Előfordulhat, hogy a szögfüggő fluxus aniztorópiája más a különböző energiacsoportokban. Ha ezt előre tudjuk, célszerű az egyes energiacsoportokban N értékét eltérően megválasztani. Az így kapott sémákat *energia szerint torzított sémák*nak nevezzük.
- Vannak régiók, amelyek környezetében a szögfüggő fluxus erősen anizotrop, miközben más tartományokban az anizotrópia mértéke sokkal kisebb. Ilyen régiók a szabályozórudak és környezetük. Ezekben célszerű N értékét nagyobbra választani, mint azokban, amelyekben érvényes a diffúziós közelítés. Az így kapott sémákat hely szerint torzított sémáknak nevezzük.
- Vannak esetek, amelyekben előre tudjuk, hogy bizonyos Ω-kra a szögfüggő fluxus sokkal nagyobb, mint a többiekre. Erre jellegzetes példa egy pontforrás hatására kialakuló fluxus számítása. Ha a forrás a g = 1 csoportban termeli a neutronokat, akkor ebben a csoportban a szögfüggő fluxus jelentős az Ω_r ≈ 1 neutronirányokra jelentős, de elhanyagolható a többi neutronirányra. Másik példa az ún. mély behatolás problémája, amelyben a fluxus csak a védelmi falra merőleges irányokban jelentős. Ilyen esetekben az alappontokat sűrítjük az Ω_r ≈ 1 neutronirányok tartományában, és kevés alappontot választunk az ezen kívüli irányokra. Az így kapott sémákat *irány szerint torzított sémák*nak nevezzük.

5.3. Térbeli diszkretizálás

Miután megbeszéltük a diszkrét neutronirányok megválasztását, rátérünk a térbeli változók szerinti deriváltak végesdifferencia-közelítésére. Példaképpen az R–Z hengergeometriát választjuk. A többi geometria esetében az eljárás analóg. A választást az indokolja, hogy illusztrálni tudjuk vele a transzportoperátor konzervatív alakjának a fontosságát (vö. 1. függelék, F1.3. fejezet).



5.3.1. ábra. Térbeli diszkretizálás R-Z geometriában

5.3.1. Példa a diszkretizálásra: R–Z geometria

Tekintsük az 5.3.1. *ábrá*t, amely az (r_i, z_j) osztópont környezetét mutatja. Az ábrán a feles indexű osztópontok a radiális vagy axiális intervallumok felével való elmozdulásoknak megfelelő pontok. Ezek az intervallumok tehát:

$$\Delta r_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}$$
 és $\Delta z_i = z_{i+1/2} - z_{i-1/2}$. (53.1)

Feltesszük, hogy a vizsgált rendszer homogén az ábrán mutatott téglalapon belül. A diszkretizálandó egyenletet (51.9)-ben írtuk fel. A d Φ /ds kifolyási tag egyes összetevői az (51.10a) – (51.10c) egyenletekben, a többi tag pedig (51.10d)-ben van felírva. Mindegyik térbeli diszkretizálása úgy történik, hogy beszorozzuk 2 π -vel, és integráljuk az ábrán látható téglalapra. A (51.10a) alatti kifejezésre a következőt kapjuk:

$$\int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} 2\pi w_k \Omega_k^{\mathrm{r}} \frac{\partial \left(r \boldsymbol{\Phi}_k(r, z) \right)}{\partial r} \mathrm{d}r \mathrm{d}z = w_k \Omega_k^{\mathrm{r}} \left(A_{i+1/2, j} \boldsymbol{\Phi}_{i+1/2, j, k} - A_{i-1/2, j} \boldsymbol{\Phi}_{i-1/2, j, k} \right),$$

ahol

$$\boldsymbol{\Phi}_{i\pm 1/2,j,k} = \frac{1}{\Delta z_j} \int_{\Delta z_j} \boldsymbol{\Phi}_k (r_{i\pm 1/2}, z) \mathrm{d}z$$

a z-re átlagolt szögfüggő fluxus, továbbá a hengerfelületek:

$$A_{i\pm 1/2,j} = 2\pi r_{i\pm 1/2} \Delta z_j.$$

(51.10c) integrálja:

$$\begin{split} &\int_{\Delta z_{j}} \int_{\Delta r_{i}} 2\pi \Big(a_{k+1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{k+1/2} \big(r, z \big) - a_{k-1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{k-1/2} \big(r, z \big) \Big) \mathrm{d}r \mathrm{d}z = \\ &= 2\pi \Delta r_{i} \Delta z_{j} \Big(a_{k+1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{ij,k+1/2} - a_{k-1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{ij,k-1/2} \Big) = \\ &= \Big(A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j} \Big) \Big(a_{k+1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{ij,k+1/2} - a_{k-1/2} \boldsymbol{\varPhi}_{ij,k-1/2} \Big). \end{split}$$

A cellára átlagolt fluxust a következő képlettel definiáljuk:

$$\boldsymbol{\varPhi}_{ij,k} = \frac{1}{V_{ij}} \int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} \boldsymbol{\varPhi}_k(r,z) 2\pi r dr dz ,$$

ahol V_{ij} az 5.3.1. ábrán mutatott cella térfogata:

$$V_{ij} = \int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} 2\pi r dr dz = \pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right) \Delta z_j.$$

(51.10b) integrálja:

$$w_k \Omega_k^z \int_{\Delta r_i} 2\pi r \int_{\Delta z_j} \frac{\partial \Phi_k(r, z)}{\partial z} dr dz =$$

= $w_k \Omega_k^z \pi \Big(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \Big) \Big(\Phi_{i, j+1/2, k} - \Phi_{i, j-1/2, k} \Big),$

ahol

$$\Phi_{i,j\pm 1/2,k} = \frac{\int \Phi_k(r, z_{j\pm 1/2}) 2\pi r dr}{\pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2\right)}$$

az *r*-re átlagolt szögfüggő fluxus. A hatáskeresztmetszeteket tartalmazó tagok (vö. (51.10d) integrálja:

$$\int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} w_k \mathcal{L}_t \boldsymbol{\Phi}_k(r, z) 2\pi r \mathrm{d} r \mathrm{d} z = w_k \mathcal{L}_{ij}^t \boldsymbol{\Phi}_{ij,k} V_{ij},$$

továbbá a forrást tartalmazó tagoké:

$$\int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} w_k Q_k(r, z) 2\pi r dr dz = w_k Q_{ij,k} V_{ij},$$

ahol

$$Q_{ij,k} = \frac{1}{V_{ij}} \int_{\Delta z_j} \int_{\Delta r_i} Q_k(r,z) 2\pi r dr dz.$$

5.3.2. Térbeli diszkretizálás az általános esetben

A fenti példa mintájára a többi geometriákban is elvégezhetjük a térbeli diszkretizálást. Mindegyik eset közös alakra hozható, amelyben az egyes együtthatók értéke geometriáról geometriára változik. Ehhez az Ω vektor komponenseit csak számokkal jelöljük, és az egyes geometriákra vonatkozóan specializáljuk. A dimenziók számát az 1D, 2D és 3D jelekkel különböztetjük meg egymástól. A diszkrét szögirányok indexe továbbra is a *k* betű lesz, az egyes térbeli koordinátákra pedig az *i*, *j* és *m* indexeket használjuk.⁴⁶ Az általános alak a következő:

$$w_k \Omega_k^{(1)} \Big(A_{i+1/2} \Phi_{i+1/2,j,m,k} - A_{i-1/2} \Phi_{i-1/2,j,m,k} \Big) \Delta H_{jm} +$$

⁴⁶ A szórási magfüggvény sorfejtésében továbbra is az ℓ indexet használjuk (vö. (5.2) és (5.7)). Mivel itt nem jelenik meg a P_L közelítés *m* indexe, ezt lehetett a harmadik térbeli osztópontok indexelésére használni. Így remélhetően nem fog félreértést okozni.

$$+ (A_{i+1/2} - A_{i-1/2}) (a_{k+1/2} \Phi_{i,j,m,k+1/2} - a_{k-1/2} \Phi_{i,j,m,k-1/2}) \Delta H_{jm} + + w_k \Omega_k^{(2)} (\Phi_{i,j+1/2,m,k} - \Phi_{i,j-1/2,m,k}) \Delta B_{im} + + w_k \Omega_k^{(3)} (\Phi_{i,j,m+1/2,k} - \Phi_{i,j,m-1/2,k}) \Delta C_{ij} + + w_k \Sigma_{ijm}^{t} \Phi_{ijm,k} V_{ijm} = w_k Q_{ijm,k} V_{ijm}.$$
(53.2)

Az itt szereplő együtthatók értékeit az 5.3.1. táblázatban összegezzük. Az utolsó oszlopban megadjuk az Ω vektor komponenseinek az indexeit, vagyis az "(1)", "(2)" és "(3)" felső indexek értelmét.

Geometria	$A_{i+1/2}$	ΔH_{jm}	ΔB_{im}	ΔC_{ij}	V_{ijm}	1, 2, 3
1D sík	1	1	0	0	Δx_i	Х
1D gömb	$2\pi r_{i+1/2}$	1	0	0	(1)	r
1D henger	$4\pi r_{i+1/2}^2$	1	0	0	(3)	r
2D X-Y	1	Δy_j	Δx_i	0	$\Delta x_i \Delta y_j$	х, у
2D Rθ	$2\pi r_{i+1/2}$	$\Delta \Theta_m$	0	Δr_j	(2)	r, φ
2D R-Z	$2\pi r_{i+1/2}$	Δz_j	(1)	0	(4)	r, φ, z
3D X-Y-Z	1	$\Delta y_j \Delta z_m$	$\Delta x_i \Delta z_m$	$\Delta x_i \Delta y_j$	$\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_m$	x, y, z
$3DR-\theta-Z$	$2\pi r_{i+1/2}$	$\Delta \theta_m \Delta z_j$	(2)	$\Delta r_i \Delta z_j$	(5)	r, φ, z

5.3.1. táblázat. A térbeli diszkretizálás együtthatói

(1)
$$\pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right)$$

(2)
$$\pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right) \Delta \theta_m$$

(3)
$$4\pi \left(r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3\right)/3$$

(4)
$$\pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right) \Delta z_j$$

(5)
$$\pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right) \Delta \theta_m \Delta z_j$$

A térbeli diszkretizálásnak további módjait is kidolgozták, de ezek részleteibe nem megyünk bele. Akármilyen módszert is választunk, mindegyiknek teljesítenie kell az alábbi követelményeket:

- 1. Szigorúan konzervatívnak kell lennie, ami az jelenti, hogy mindegyik tagját a k indexre összegezve (ami az Ω szerinti integrálásnak felel meg), a neutronmérleg szempontjából világos jelentésű eredménynek kell adódnia. (Ennek részleteit az 1. függelék F1.3. fejezetében elemezzük.) Enélkül nem szervezhető meg a külső iteráció, továbbá nem alkalmazhatók az iteráció gyorsítására szolgáló eljárások (lásd az 5.4. fejezetben).
- 2. A diszkretizált egyenletnek az egzakt egyenletekhez képest elegendően pontosnak kell lennie a szabad úthosszak nagyságrendjébe eső Δx , Δy stb. intervallumok esetében.
- 3. A módszer legyen nem-negatív: pozitív neutronforrás és a határfelületeken megadott pozitív értékek esetében a diszkretizált egyenletek megoldása nem vezethet negatív fluxusokra.

4. A módszernek a Δx , Δy stb. intervallumok felvételétől függetlenül át kell mennie a diffúzióegyenlet végesdifferencia-alakjába, amikor a diffúziós közelítés érvényes.

Ez az utóbbi követelmény természetes, de numerikus okai is vannak. Létezik ugyanis egy diffúzióelméleten alapuló konvergenciagyorsító eljárás, amely nem működne, ha a 4. követelmény nem teljesülne. A 3. követelmény az S_N módszer legnehezebben teljesíthető követelménye. Arról van szó, hogy az 1. alatti megmaradási követelmény és a 4. alatti diffúziós határérték-követelmény nem minden esetben egyeztethető össze a nem-negatív megoldás követelményével. Ez különösen a biológiai védelmek méretezésekor felmerülő mély behatolási probléma megoldásakor okoz gondot. Ilyenkor általában le szoktunk mondani arról, hogy mind a négy követelményt egyszerre kielégíthessük.

5.3.3. A feles indexű fluxusok közelítése

A (53.2) egyenletrendszert csak az egész indexű rácspontokra írtuk fel, viszont szerepelnek benne feles indexű fluxusok is. A kérdést vizsgáljuk meg az 5.3.1. részben tárgyalt R–Z geometriában. Tekintsük először a neutronirányok szerinti feles indexeket. Ezekre vonatkozóan az egyszerű számtani közepet alkalmazzuk:

$$\Phi_{ij,k} = \frac{\Phi_{ij,k+1/2} + \Phi_{ij,k-1/2}}{2}$$

Ha ezt (53.2)-be helyettesítjük, a feles indexekhez tartozó fluxusokra kapunk egyenletrendszert.

Az R–Z geometria esetében (53.2)-ben 5 fluxusérték szerepel, amelyek közül a 4 feles indexűről egyelőre nem mondtunk semmit. Ha a tekintett sebességirány az 5.3.1. ábrán látható Ω irány, akkor az (*i*–1/2, *j*) és az (*i*, *j*–1/2) indexű fluxusok a határfeltételekből ismertek. Az (*i*+1/2, *j*) és az (*i*, *j*+1/2) indexű fluxusokat pedig a következő képletek kapcsolják össze az egész indexű fluxusokkal:

$$\Phi_{ij,k} = \frac{\left(1 + a_{ij,k}\right) \Phi_{i+1/2,j,k} + \left(1 - a_{ij,k}\right) \Phi_{i-1/2,j,k}}{2}$$

és

$$\Phi_{ij,k} = \frac{\left(1+b_{ij,k}\right)\Phi_{i,j+1/2,\ell} + \left(1-b_{ij,k}\right)\Phi_{i,j-1/2,k}}{2},$$

ahol

$$-1 \le a_{ii,k} \le 1 \qquad \text{és} \qquad -1 \le b_{ii,k} \le 1.$$

Ezeknek az együtthatóknak a megválasztására különböző sémák léteznek. A legegyszerűbb séma szerint mindkettőt 0-nak választjuk. Egy másik módszer szerint:

$$a_{ij,k} = \frac{\Omega_k^{\mathrm{z}}}{\left|\Omega_k^{\mathrm{z}}\right|}$$
 és $b_{ij,k} = \frac{\Omega_k^{\mathrm{r}}}{\left|\Omega_k^{\mathrm{r}}\right|}.$

5.4. Az iteráció

A (53.2) egyenletet iterációval oldjuk meg. Az iterációs képletet felesleges felírni, viszont érdemes összefoglalni, milyen független változók szerinti diszkretizálásról van szó:

- Először, az (53.2) egyenlet a *g*-edik csoportra van felírva (*g* = 1, 2, ..., *G*), de ezt a képletekben nem jelöltük, nehogy tovább bonyolódjanak a mennyiségek indexei.
- Másodszor, az egyenlet minden energiacsoportban minden Ω_k diszkrét neutronirányra felírandó (k = 1, 2, ...).
- Harmadszor, az egyenlet minden energiacsoport és minden Ω_k diszkrét neutronirány esetében az összes térbeli osztópontokra felírandó. Ez alól kivételek a határpontok, mert ott a határfeltételek alapján ismert a szögfüggő fluxus.

Az energiacsoportok tekintetében az iterációt két részre bontjuk – ugyanúgy, mint a diffúziós közelítésnél. Adott hasadási forrás mellett energiacsoportonként megoldjuk az (53.2) egyenletet. Ezt a műveletet nevezzük az S_N módszer esetében is *belső iterációnak*. A hasadási forrás ismételt újraszámolása a *külső iteráció*.

5.4.1. A belső iteráció

A belső iteráció ugyanúgy Gauss-Seidel iteráció, mint a diffúzióegyenlet esetében. Nem egyértelmű azonban, milyen sorrendben fut végig az iteráció az egyes független változók értékein. Nos, az S_N módszer esetében az egyes neutronirányokat rögzítjük, és az iteráció végighalad az összes térbeli osztópontokon. Miután ez befejeződött, áttérünk a következő neutronirányra. A tapasztalat szerint az ilyen módon szervezett Gauss-Seidel iteráció konvergál a leggyorsabban. A konvergencia meggyorsítására nem szoktuk alkalmazni a diffúzióegyenlet esetében bevált szukcesszív túlrelaxálás módszerét. Ennek az az oka, hogy az (53.2) egyenletrendszer más szerkezetű, mint a diffúzióegyenlethez tartozó végesdifferencia-egyenletek, és emiatt ez a módszer nem hatékony. Két módszer terjedt el: a Csebisev-iteráció és a durva hálós kiegyenlítés módszere. Az előbbit a forrásiteráció tárgyalásakor ismertetjük. Az utóbbi lényege a következő.

Tételezzük fel, hogy néhány egyszerű iterációs lépést végrehajtottunk. A legutolsó lépés eredményét felhasználva átlagoljuk a csoportállandókat – a diszkretizációs felosztáshoz képest – nagy tartományokra. Ez utóbbiak rendszerét nevezzük *durva* hálónak, szemben az eredeti felosztás szerinti *finom* hálóval. A durva hálóra vonatkozóan megoldjuk az így adódó és szintén (53.2) alakú egyenleteket. Erre alkalmazhatunk külön iterációt, de elképzelhető a durva hálós egyenletek közvetlen mátrixinverzióval való megoldása is. Így mindegyik tartományra kapunk egy szorzótényezőt, amellyel beszorozzuk mindazokat a finom hálós fluxusokat, amelyeknek megfelelő rácspontok az adott tartományba esnek. Ezzel egymáshoz képest mintegy kiegyenlítjük az egymástól nagy távolságra levő rácspontokhoz tartozó finom hálós fluxusokat. Megjegyezzük, hogy ezt a módszert a diffúzióegyenlet esetében is alkalmazni lehet.



5.4.1. ábra. Durva hálós kiegyenlítés X-Y geometriában

Az elmondottakat – a változatosság kedvéért – X–Y geometriában mutatjuk be. Tekintsük az 5.4.1. *ábrát*, amely úgy keletkezett, hogy a 3.2.2. *ábrát* kiegészítettük egy durva hálóval. Az y tengely mentén 3, az x tengely mentén pedig 4 tartományt jelöltünk ki. A (53.2) egyenletet először összegezzük a diszkrét neutronirányokra (vagyis a k indexre). Az első és második tag összegében megjelennek az áramok:

$$J_{i+1/2,j}^{x} = J_{i+1/2,j}^{x+} + J_{i+1/2,j}^{x-},$$

$$J_{i+1/2,j}^{x+} = \sum_{k:\Omega_{k}^{(1)}>0} w_{k} \Omega_{k}^{(1)} \Phi_{i+1/2,j,k}, \qquad J_{i+1/2,j}^{x-} = \sum_{k:\Omega_{k}^{(1)}<0} w_{k} \Omega_{k}^{(1)} \Phi_{i+1/2,j,k}$$

és

$$\begin{split} J_{i,j+1/2}^{y} &= J_{i,j+1/2}^{y+} + J_{i,j+1/2}^{y-} , \\ J_{i,j+1/2}^{y+} &= \sum_{k: \mathcal{Q}_{k}^{(2)} > 0} & w_{k} \mathcal{Q}_{k}^{(2)} \mathcal{\Phi}_{i,j+1/2,k} , \qquad J_{i,j+1/2}^{y-} = \sum_{k: \mathcal{Q}_{k}^{(2)} < 0} & w_{k} \mathcal{Q}_{k}^{(2)} \mathcal{\Phi}_{i,j+1/2,k} . \end{split}$$

A szögfüggő fluxusra vonatkozó analóg összeg a fluxust adja a tekintett finom hálós rácspontban:

$$\sum_{k} w_{k} \boldsymbol{\Phi}_{ij,k} = \boldsymbol{\Phi}_{ij} \, .$$

Hasonlóan:

$$\sum_{k} w_k Q_{ij,k} = Q_{ij} \, .$$

Végeredményben (53.2)-ből a következő egyenlet adódik, ha figyelembe vesszük az *5.3.1. táblázat*ot is:

$$\left(J_{i+1/2,j}^{x} - J_{i-1/2,j}^{x}\right) \Delta y_{j} + \left(J_{i,j+1/2}^{y} - J_{i,j-1/2}^{y}\right) \Delta x_{i} + \Sigma_{ij}^{t} \boldsymbol{\Phi}_{ij} \Delta x_{i} \Delta y_{j} = Q_{ij} \Delta x_{i} \Delta y_{j}.$$

Ezt az egyenletet összegezzük az (I, M) tartományra. Bevezetjük a következő jelöléseket:

$$\Delta X_{I} = \sum_{i \in I} \Delta x_{i} , \qquad \Delta Y_{M} = \sum_{j \in M} \Delta y_{j} , \qquad \varPhi_{IM} = \frac{\sum_{i \in I} \sum_{j \in M} \varPhi_{ij} \Delta x_{i} \Delta y_{j}}{\Delta X_{I} \Delta Y_{M}},$$
$$\mathcal{Q}_{IM} = \frac{\sum_{i \in I} \sum_{j \in M} Q_{ij} \Delta x_{i} \Delta y_{j}}{\Delta X_{I} \Delta Y_{M}}, \qquad \qquad \mathcal{\Sigma}_{IM}^{t} = \frac{\sum_{i \in I} \sum_{j \in M} \mathcal{\Sigma}_{ij}^{t} \varPhi_{ij} \Delta x_{i} \Delta y_{j}}{\varPhi_{IM} \Delta X_{I} \Delta Y_{M}}.$$

Összegzéskor az áramok kiesnek a belső pontokban, és csak a tartomány széléhez tartozók maradnak meg:

$$\sum_{i \in I} \left(J_{i+1/2,j}^{\mathbf{x}} - J_{i-1/2,j}^{\mathbf{x}} \right) \Delta y_j = \left(J_{I+1/2,j}^{\mathbf{x}} - J_{I-1/2,j}^{\mathbf{x}} \right) \Delta y_j,$$

ahol az (I+1/2) és (I-1/2) indexek az I-edik tartomány jobb, illetve bal széléhez tartozó áramot jelentik. Ezt még összegeznünk kell j-re is:

$$\sum_{i \in I} \sum_{j \in M} \left(J_{i+1/2,j}^{x} - J_{i-1/2,j}^{x} \right) \Delta y_{j} = \left(J_{I+1/2,M}^{x} - J_{I-1/2,M}^{x} \right) \Delta Y_{M}.$$

Hasonlóan:

$$\sum_{i \in I} \sum_{j \in M} \left(J_{i,j+1/2}^{y} - J_{i,j-1/2}^{y} \right) \Delta x_{i} = \left(J_{I,M+1/2}^{y} - J_{I,M-1/2}^{y} \right) \Delta X_{I}.$$

Végeredményben a finom hálós egyenletnek az (I, M) tartományra való összegzése a

$$\begin{pmatrix} J_{I+1/2,M}^{\mathbf{x}} - J_{I-1/2,M}^{\mathbf{x}} \end{pmatrix} \Delta Y_M + \begin{pmatrix} J_{I,M+1/2}^{\mathbf{y}} - J_{I,M-1/2}^{\mathbf{y}} \end{pmatrix} \Delta X_I + \Sigma_{IM}^{\mathbf{t}} \boldsymbol{\Phi}_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M = \\ = Q_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M$$

egyenletrendszerre vezet (I = 1, 2, 3, 4) és (M = 1, 2, 3). Ez így nem használható durva hálós kiegyenlítésre, mert a durva hálós áramokat is fel kell bontani ki- és befolyó komponensekre. Az (I, M) tartományból kifolyó áramkomponensek a következők:

balra:
$$J_{I-1/2,M}^{x-}$$
, jobbra: $J_{I+1/2,M}^{x+}$, felfelé: $J_{I,M+1/2}^{y+}$, lefelé: $J_{I,M-1/2}^{y-}$.

Ezekhez és a Φ_{IM} fluxushoz társítjuk az f_{IM} kiegyenlítési tényezőt. A szomszédos durva hálós cellákhoz tartozó kifolyó áramkomponensekhez a szomszédos cellákét társítjuk. Így a következő egyenlet adódik a kiegyenlítési tényezőkre:

$$\begin{pmatrix} f_{IM} \left(J_{I+1/2,M}^{x+} - J_{I-1/2,M}^{x-} \right) + f_{I+1,M} J_{I+1/2,M}^{x-} - f_{I-1,M} J_{I-1/2,M}^{x+} \right) \Delta Y_M + \\ + \left(f_{IM} \left(J_{I,M+1/2}^{y+} - J_{I,M-1/2}^{y-} \right) + f_{I,M+1} J_{I,M+1/2}^{y-} - f_{I,M-1} J_{I,M-1/2}^{y+} \right) \Delta X_I + \\ + \Sigma_{IM}^{t} f_{IM} \Phi_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M = Q_{IM} \Delta X_I \Delta Y_M \,.$$

Ez ugyanolyan alakú egyenlet a kiegyenlítési tényezőkre, mint egy szokásos 5-pont végesdifferencia-egyenlet. Miután ezt megoldottuk, a kiegyenlített szögfüggő fluxusok kiegyenlített iteráltjait a következő képlet adja:

$$\Phi'_{ij,k} = \Phi_{ij,k} f_{IM}, \qquad \text{ahol} \quad i \in I \quad \text{és} \qquad j \in M$$

A vesszőtlen szögfüggő fluxus a kiegyenlítés nélkül kapott iteráltat jelenti.

Ezzel a módszerrel jelentős gyorsítást lehet elérni minden olyan esetben, amelyben az egymástól távoli tartományok között csak laza csatolás van. Erre példa azoknak a rendszereknek az esete, amelyekben nagy nem-hasadó tartományok (például reflektorok) vannak. Ilyenekben a finom hálón haladó iteráció esetében nagyon sok iterációs lépés kell ahhoz, hogy a reaktor egyik széléhez tartozó fluxusok javulása érződjön a reaktor másik végéhez tartozó fluxusokban (és *vice versa*). Ilyenkor különösen hatékony a durva hálós kiegyenlítés, mert az éppen az ilyen távoli tartományok közötti fluxusarányokat igazítja ki. A módszer hatékonysága kisebb akkor, amikor a vizsgált rendszer legtöbb tartományában van hasadás. Ilyenkor ugyanis a forrásiteráció önmagában jelentős kiegyenlítést jelent. Ez a helyzet például a gyors reaktorokban, ahol a reflektor alárendelt szerepet játszik, vagy pontosabban: az természetes urán, tehát maga is hasadó tartomány. Termikus reaktorokban azonban a durva hálós kiegyenlítés nagyon hatékony konvergenciagyorsító módszer.

5.4.2. A külső iteráció

Mint mondtuk, a külső iteráció a Q_g forrás újraszámolását jelenti. Meggyorsítására több módszer is ismeretes. Mindenekelőtt célravezető a durva hálós kiegyenlítést alkalmazni. Tekintve, hogy ennek lényegét az előző részben ismertettük, ezt nem tárgyaljuk a jelen fejezetben, bár nem triviális az előző részben ismertetett módszernek a forrásiterációra való átvitele. Részletesen ismertetjük viszont a Csebisev-féle konvergenciagyorsító eljárást. Ehhez átvesszük a 3.3. alfejezet jelöléseit.

Jelöljük ismét Φ -vel a fluxusokból képzett vektort, amelyet a **P** operátor alakít át hasadási forrássá:

 $\mathbf{F} = \mathbf{P}\mathbf{\Phi} \,. \tag{54.1a}$

Ha a belső iterációban megoldandó egyenletrendszer mátrixát **D**-vel jelöljük, akkor a belső iteráció a

$$\mathbf{D}\mathbf{\Phi} = \mathbf{F} \tag{54.1b}$$

egyenlet Φ -re való megoldását jelenti – adott F mellett. Az (ℓ –1)-edik iteráltból az

$$\mathbf{F}_{\ell-1} = \mathbf{P} \mathbf{\Phi}_{\ell-1}$$

képlettel kapjuk a hasadási forrás iteráltját, amiből (54.1b) adja a fluxus *l*-edik iteráltját:

$$\mathbf{\Phi}_{\ell} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{F}_{\ell-1},$$

majd:

$$\mathbf{F}_{\ell} = \mathbf{Q}\mathbf{F}_{\ell-1}, \qquad \mathbf{Q} = \mathbf{P}\mathbf{D}^{-1} \tag{54.2}$$

adja a hasadási forrás ℓ -edik iteráltját. Ez a korábbi fejezetekben többször emlegetett forrásiteráció alapképlete. A 3.3. alfejezetben mondottak most is szóról szóra megismételhetők, vagyis ez az iteráció konvergens, és a

 $k\mathbf{\Psi} = \mathbf{Q}\mathbf{\Psi} \tag{54.3}$

sajátérték-probléma legnagyobb sajátértékéhez tartozó sajátfüggvénnyel arányos függvényhez konvergál. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a konvergencia jelentősen meggyorsítható. Tudjuk, hogy a sajátértékek között van egy legnagyobb, amely valós és egyszeres. Jelöljük ezt k_1 -gyel, a hozzátartozó sajátvektort pedig ψ_1 -gyel. Ez a sajátérték a keresett k_{eff} . A többi sajátértéket és a megfelelő sajátfüggvényeket az *i* indexszel különböztetjük meg egymástól. Tételezzük fel, hogy már néhány iterációs lépés megtörtént, aminek eredményeképpen jó becsléssel rendelkezünk k_1 számára. Legyen ennek az iterációnak a sorszáma ℓ_0 . Ezt követően az új iteráltat mindig az ℓ_0 utániak lineáris kombinációjaként állítjuk elő:

$$\mathbf{F}'_{\ell} = \sum_{j=0}^{n} a_{nj} \mathbf{F}_{\ell-j} ,$$

ahol a vesszőtlen vektorok az (54.2) képlettel kapott iteráltak, tehát

$$\mathbf{F}_{\ell}' = \sum_{j=0}^{n} a_{nj} \left(\frac{\mathbf{Q}}{k_1} \right)^j \mathbf{F}_{\ell-n} \, .$$

Látszik, hogy $\ell_0 = \ell - n$. Itt figyelembe vettük, hogy a 3.3. alfejezetben írtak szerint az (54.2) képlettel kapott iteráltakat minden lépésben elosztjuk k_1 becsült értékével. Mivel feltevésünk szerint ez a becslés elegendően pontos. A lineáris kombináció együtthatóval definiáljuk a

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^n a_{nj} x^j , \qquad (54.4)$$

amelynek a segítségével a módosított iterált az

$$\mathbf{F}_{\ell}' = P_n \left(\frac{\mathbf{Q}}{k_1}\right) \mathbf{F}_{\ell_0} \tag{54.5}$$

alakban írható fel.

Látszik (54.5)-ből, hogy ℓ növekedésével a polinomok *n* fokszáma is nő. Célunk olyan $P_n(x)$ polinomok megkeresése, amelyek a lehető leggyorsabb konvergenciát biztosítják. Megtalálásuk érdekében fejtsük a kiinduló vektort a sajátfüggvények szerinti sorba:

$$\mathbf{F}_{\ell_0} = \sum_i c_i \mathbf{\Psi}_i \,,$$

amivel az (54.5) iteráció a következő alakban írható fel:

$$\mathbf{F}_{\ell}' = \sum_{i} c_{i} P_{n} \left(\frac{\mathbf{Q}}{k_{1}} \right) \mathbf{\Psi}_{i} = \sum_{i} c_{i} P_{n} \left(\frac{k_{i}}{k_{1}} \right) \mathbf{\Psi}_{i} = c_{1} P_{n} \left(1 \right) \mathbf{\Psi}_{1} + \sum_{i>1} c_{i} P_{n} \left(\frac{k_{i}}{k_{1}} \right) \mathbf{\Psi}_{i} .$$
(54.6)

Legyen a második legnagyobb abszolút értékű sajátérték k2. A

$$\rho = \frac{|k_2|}{k_1} < 1 \tag{54.7}$$

számot *domináns arány*nak nevezzük. Az eddigiekből következik, hogy a $P_n(x)$ polinomoktól a következőket kell elvárnunk:

• $P_n(1) = 1$, hiszen ez biztosítja, hogy a keresett ψ_1 sajátfüggvény amplitúdója ne növekedjen iterációról iterációra.

• $|P_n(x)|$ legyen a lehető legkisebb a ρ -nál kisebb abszolút értékű x-ekre.

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a konvergencia leghatékonyabb gyorsítását a Csebisev-polinomok segítségével érhetjük el, ha ρ -ra megfelelő becsléssel rendelkezünk (lásd alább). A $P_n(x)$ polinomokkal szemben támasztott fenti követelményeket akkor elégíthetjük ki, ha a következőket alakban keressük őket:

$$P_{n}(x) = \frac{S_{n}\left(\frac{2x}{\rho} - 1\right)}{S_{n}\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)},$$
(54.8)

ahol $S_n(\mu)$ *n*-edfokú polinom. Amikor *x* a $[0, \rho]$ intervallumban változik, $S_n(\mu)$ argumentuma a [-1, 1] intervallumban. Vele szemben az alábbi követelményeket támasztjuk:

- 1. Az iterációs képlet alkalmazása legyen minél egyszerűbb, vagyis az $S_n(\mu)$ polinomok elégítsenek ki egy három tagú rekurziós képletet.
- 2. A [-1, 1] intervalumon belül $|S_n(\mu)| \le 1$.
- 3. A [-1, 1] intervallumon kívül ne legyen zérushelyük. Ekkor ugyanis fennáll, hogy

$$\lim_{n\to\infty}S_n\left(\frac{2}{\rho}-1\right)=\pm\infty\,,$$

amiből következik, hogy

 $\lim_{n \to \infty} P_n(x) = 0, \qquad \text{amikor} \qquad |x| \le \rho.$

Ezeket a feltételeket teljesíthetjük, ha $S_n(x)$ -et a $T_n(x)$ Csebisev-polinomokkal tesszük egyenlővé. Az egyszerűség követelményéből következik, hogy csak

$$S_n(x) = axS_{n-1}(x) + bS_{n-2}(x)$$

alakú rekurziós képlet jöhet szóba. Ez ugyanis azt jelenti, hogy minden iterációs lépésben csak az utolsó iteráltra alkalmazunk belső iterációt, és ennek eredményét és az utolsó előtti iteráltat alkalmas együtthatókkal egymással kombináljuk (lásd alább). Legyen x_0 az $S_{n-1}(x)$ polinom egyik zérushelye. Ekkor a rekurzióból következik, hogy

$$S_n(x_0) = bS_{n-2}(x_0).$$

Mivel mindkét polinom abszolút értéke legfeljebb 1 lehet, legutóbbi egyenletünk kielégítése legegyszerűbben úgy biztosítható minden *n*-re, ha $b = \pm 1$. Plauzibilis feltenni, hogy $n \rightarrow \infty$ esetén a zérushelyek sűrűsödnek a [-1, 1] intervallumban. Könnyen belátható, hogy ennek ellentmond a b = 1 választás, következésképpen b = -1.⁴⁷ Belátjuk ezután, hogy a másik együtthatót illetően a legkedvezőbb az a = 2 választás. Írjuk a rekurziós képletet az

$$S_n(x) + S_{n-2}(x) = axS_{n-1}(x)$$

⁴⁷ Tegyük fel, hogy $S_{n-2}(x)$ -nek x_0 -at közrefogó két gyöke $x_1 < x_0 < x_2$. E két érték között $S_{n-2}(x)$ nem vált előjelet. Legyen például pozitív. b = 1 esetén $S_n(x_0)$ is pozitív lenne, ami azt jelenti, hogy $S_n(x)$ -nek ugyanannyi gyöke van, mint $S_{n-2}(x)$ -nek, ami ellentmondás.

alakba. Nyilvánvaló, hogy a bal oldalon levő polinomok párossága azonos, viszont a jobb oldalon levőé ellentétes. Legyen $S_{n-1}(x)$ páratlan. A zérushelyek sűrűsödésének feltételezéséből következik, hogy x = 1-nél mindhárom polinom előjele azonos. Mivel mindhárom polinom abszolút értéke legfeljebb 1 lehet, az

$$S_n(1) + S_{n-2}(1) = aS_{n-1}(1)$$

egyenlőség teljesülése úgy biztosítható a legegyszerűbben minden *n*-re, ha $a = \pm 2$. Az

$$S_n(-1) + S_{n-2}(-1) = -aS_{n-1}(-1)$$

egyenlőség csak úgy teljesülhet, ha a = 2. Beláttuk tehát, hogy az

$$S_n(x) = 2xS_{n-1}(x) - S_{n-2}(x)$$

rekurzió a legcélszerűbb választás. Ezt pedig éppen a Csebisev-polinomok elégítik ki.

Nézzük meg ezután, hogyan viselkednek az (54.8) alatti polinomok, ha $S_n(x)$ helyébe a

$$T_n(\cos\theta) = \cos n\theta$$

polinomokat helyettesítjük. $0 \le x \le \rho$ esetén (54.8) számlálójában a Csebisev-polinomok argumentuma a [-1, 1] intervallumba esik. Emiatt a számláló abszolút értéke nem lehet nagyobb 1-nél. A nevezőben az argumentum 1-nél nagyobb. Ha tehát

$$\cos\theta = \frac{2}{\rho} - 1 > 1,$$

akkor θ tiszta képzetes: $\theta = i\gamma(\gamma > 0)$, amivel

$$T_n\left(\frac{2}{\rho} - 1\right) = \frac{e^{n\gamma} + e^{-n\gamma}}{2}.$$
 (54.9a)

A ch $\gamma = 2/\rho - 1$ egyenlet megoldása ($\gamma > 0$):

$$e^{\gamma} = \frac{2}{\rho} - 1 + \sqrt{\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)^2 - 1}.$$
 (54.9b)

Mivel ez 1-nél nagyobb szám, elég nagy n-re

$$T_n\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\approx\frac{\mathrm{e}^{n\gamma}}{2},$$

amivel $0 \le x \le \rho$ esetén:

$$\left|P_n(x)\right| \le 2\mathrm{e}^{-n\gamma} \to 0.$$

Éppen ezt akartuk elérni: az iteráció hibája exponenciálisan tart 0-hoz.

Nézzük meg ezután, hogyan történik az iteráció. Ha (54.5)-ben n = 0-t helyettesítünk, azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{F}_{\ell_0}' = \mathbf{F}_{\ell_0} \,.$$

A többi iterációs lépésre felírjuk a Csebisev-polinomok rekurziós képletét:

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x),$$

amiből a következő rekurziós képlet adódik a $P_n(x)$ polinomokra:

$$P_{n}(x) = \frac{2\left(\frac{2x}{\rho}-1\right)T_{n-1}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)P_{n-1}(x) - T_{n-2}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)P_{n-2}(x)}{T_{n}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)}.$$

Ezt alkalmazzuk (54.5)-ben:

$$\mathbf{F}_{\ell}' = P_{n}\left(\frac{\mathbf{Q}}{k_{1}}\right)\mathbf{F}_{\ell_{0}} = \frac{2\left(\frac{2\mathbf{Q}}{\rho k_{1}}-1\right)T_{n-1}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)P_{n-1}\left(\frac{\mathbf{Q}}{k_{1}}\right)\mathbf{F}_{\ell_{0}} - T_{n-2}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)P_{n-2}\left(\frac{\mathbf{Q}}{k_{1}}\right)\mathbf{F}_{\ell_{0}}}{T_{n}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)} = \frac{2\left(\frac{2\mathbf{Q}}{\rho k_{1}}-1\right)T_{n-1}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\mathbf{F}_{\ell-1}' - T_{n-2}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\mathbf{F}_{\ell-2}'}{T_{n}\left(\frac{2}{\rho}-1\right)},$$
(54.10)

ahol kihasználtuk, hogy

$$\mathbf{F}_{\ell-1}' = P_{n-1}\left(\frac{\mathbf{Q}}{k_1}\right)\mathbf{F}_{\ell_0} \qquad \text{és} \qquad \mathbf{F}_{\ell-2}' = P_{n-2}\left(\frac{\mathbf{Q}}{k_1}\right)\mathbf{F}_{\ell_0}.$$

Ebből a következő egyszerű iterációs séma adódik. Először az $(\ell-1)$ -edik iteráltra vonatkozóan végrehajtunk egy belső iterációt, majd az eredményt elosztjuk k_1 becslésével, vagyis kiszámítjuk a

$$\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\mathbf{F}_{\ell}^{\prime\prime} = \left(\frac{2\mathbf{Q}}{\rho k_1}-1\right)\mathbf{F}_{\ell-1}^{\prime}$$
(54.11a)

függvényt, majd ezt követően alkalmazzuk az (54.10) képletet:

$$\mathbf{F}_{\ell}' = \alpha_{\ell} \mathbf{F}_{\ell}'' - \beta_{\ell} \mathbf{F}_{\ell-2}', \tag{54.11b}$$

ahol

$$\alpha_{\ell} = 2\left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{T_{n-1}\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)}{T_{n}\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)} \qquad \text{és} \qquad \beta_{\ell} = \frac{T_{n-2}\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)}{T_{n}\left(\frac{2}{\rho} - 1\right)}. \tag{54.11c}$$

Az utóbbi együtthatók meghatározásához használhatjuk a Csebisev-polinomok rekurziós képletét, ami jelentősen leegyszerűsíti az (54.11) iterációs képletek alkalmazását.

Nézzük meg számszerűen, mennyit javít a Csebisev-féle iteráció a konvergencia gyorsaságán. Az eredeti iteráció hibája ρ^n rendben tart 0-hoz. A Csebisev-iteráció

ρ	$e^{-\gamma}$
0,999	0,939
0,99	0,818
0,98	0,752
0,97	0,705
0,96	0,667
0,95	0,635
0,94	0,606
0,93	0,582
0,92	0,559
0,91	0,538
0,90	0,519

esetében ρ helyére e^{- γ} lép. Az alábbi táblázat mutatja, hogy ez minden esetben határozott javulást jelent:

Feltűnő, hogy nagy domináns arányok esetében a konvergencia sebessége jelentősen változik ρ -val.

Befejezésül megmutatjuk, hogyan lehet ρ -t becsülni. Logikus remélni, hogy ezt becsülhetjük a Csebisev-iterált fluxusok alapján. (54.6) alapján felírjuk az alábbi különbségeket:

$$\mathbf{R}_{\ell} = \mathbf{F}_{\ell}' - \mathbf{F}_{\ell-1}' = \sum_{i>1} c_i \left[P_n \left(\frac{k_i}{k_1} \right) - P_{n-1} \left(\frac{k_i}{k_1} \right) \right] \mathbf{\Psi}_i ,$$
$$\mathbf{R}_{\ell-1} = \mathbf{F}_{\ell-1}' - \mathbf{F}_{\ell-2}' = \sum_{i>1} c_i \left[P_{n-1} \left(\frac{k_i}{k_1} \right) - P_{n-2} \left(\frac{k_i}{k_1} \right) \right] \mathbf{\Psi}_i$$

Képezzük ezek L₂ normáját ($\|\mathbf{\Psi}_i\|_2 = 1$):

$$\begin{aligned} \left\|\mathbf{R}_{\ell}\right\|_{2}^{2} &= c_{2}^{2} \left[P_{n}\left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right) - P_{n-1}\left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right)\right]^{2} + \sum_{i>2} c_{i}^{2} \left[P_{n}\left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right) - P_{n-1}\left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right)\right]^{2}, \\ \left\|\mathbf{R}_{\ell-1}\right\|_{2}^{2} &= c_{2}^{2} \left[P_{n-1}\left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right) - P_{n-2}\left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right)\right]^{2} + \sum_{i>2} c_{i}^{2} \left[P_{n-1}\left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right) - P_{n-2}\left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right)\right]^{2}. \end{aligned}$$

Az (54.8) szerinti $P_n(x)$ polinomok esetében nem állíthatjuk, hogy az i = 2 indexű taghoz képest a többi gyorsabban tart 0-hoz. Emiatt ezek a normák – sajnos – nem használhatók ρ becslésére. Egyszerűbb a helyzet az eredeti iterációban, aminek képleteinkben a

$$P_n(x) = x^n$$

polinomok felelnek meg. Ekkor az előbbi képletek a követekző alakot veszik fel:

. .

$$\left\|\mathbf{R}_{\ell}\right\|_{2}^{2} = c_{2}^{2} \left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right)^{2n-2} \left(\frac{k_{2}^{2}}{k_{1}^{2}} - 1\right) + \sum_{i>2} c_{i}^{2} \left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right)^{2n-2} \left(\frac{k_{i}^{2}}{k_{1}^{2}} - 1\right),$$

. .

$$\left\|\mathbf{R}_{\ell-1}\right\|_{2}^{2} = c_{2}^{2} \left(\frac{k_{2}}{k_{1}}\right)^{2n-4} \left(\frac{k_{2}^{2}}{k_{1}^{2}} - 1\right) + \sum_{i>2} c_{i}^{2} \left(\frac{k_{i}}{k_{1}}\right)^{2n-4} \left(\frac{k_{i}^{2}}{k_{1}^{2}} - 1\right)$$

Így határozottan állíthatjuk, hogy az i > 2-re vonatkozó szumma és az i = 2 tag hányadosa 0-hoz tart. Ennek feltétele, hogy $|k_2| > |k_i|$ legyen i > 2 mellett. Ebben az esetben tehát fennáll:

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\left\|\mathbf{R}_{\ell}\right\|_{2}}{\left\|\mathbf{R}_{\ell-1}\right\|_{2}}=\rho.$$

Eszerint ρ -t az iterációnak még abban a szakaszában kell becsülni, amelyben még nem kezdődött el a Csebisev-iteráció. Ez egyébként logikus is, hiszen a Csebisev-iteráció megkezdéséhez már ismernünk kell ρ értékét. Kár, hogy a Csebisev-iteráltak alapján már nem lehet ρ -t javítani.

Befejezésül megjegyezzük, hogy ez az iterációs séma minden forrásiterációra alkalmazható, tehát éppúgy átvihető a diffúziós végesdifferencia-egyenletekre, mint a P_L közelítés egyenleteire.

6. ÜTKÖZÉSI VALÓSZÍNŰSÉGEK MÓDSZERE

Az *ütközési valószínűségek módszere* a transzportegyenlet integrális alakján alapuló közelítő módszer. Az egyenletet írjuk fel időtől független alakban:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_{-\infty}^{s} e^{-\overline{\Sigma_{t}(s' \to s)}} \cdot q_{1}(\mathbf{r}', E, \mathbf{\Omega}) ds', \qquad (6.1)$$

ahol

$$\overline{\mathcal{L}_{t}(s' \to s)} = \int_{s'}^{s} \mathcal{L}_{t}(\mathbf{r}_{0} + s''\mathbf{\Omega}, E) \, \mathrm{d}s''$$

az $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + s\mathbf{\tilde{\Omega}}$ és $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_0 + s'\mathbf{\tilde{\Omega}}$ pontok közötti optikai távolság. $\exp\left(-\overline{\Sigma_t(s' \to s)}\right)$ annak a valószínűsége, hogy a neutron ezt az utat ütközés nélkül megteszi. Az ütközési valószínűségek módszerét leginkább abban az esetben alkalmazzuk, amikor a neutronforrás izotrop, vagyis amikor

$$q_1(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\mathbf{r}, E' \to E) \mathcal{P}(\mathbf{r}, E') \, \mathrm{d}E' + \frac{F_0(\mathbf{r}, E)}{4\pi} = \frac{q(\mathbf{r}, E)}{4\pi}, \tag{6.2}$$

ahol $F_0(\mathbf{r}, E)$ a hasadások által létrehozott forrás (amely mindig izotrop), továbbá $\Phi(\mathbf{r}, E)$ a (szögre integrált) fluxus. A Σ_0 magfüggvény magában foglalja a rugalmas és rugalmatlan szórások járulékát. Ha (6.1)-et Ω -ra integráljuk, akkor egy $\Phi(\mathbf{r}, E)$ -ben zárt integrálegyenletet kapunk.⁴⁸ A jobb oldal Ω szerinti integrálja egyszerűsíthető. Ha ugyanis **r**-et rögzítjük, az s' és Ω szerinti integrál **r**' szerinti térintegrállá válik, hiszen az utóbbi térfogateleme így írható:

$$\mathrm{d}V' = \left(s - s'\right)^2 \mathrm{d}s' \mathrm{d}\mathbf{\Omega} = \left|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right|^2 \mathrm{d}s' \mathrm{d}\mathbf{\Omega}$$

amivel (6.1) $\boldsymbol{\Omega}$ szerinti integrálja:

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}, E) = \int q(\mathbf{r}', E) \frac{\mathrm{e}^{-\overline{\boldsymbol{\Sigma}_{t}(s' \to s)}}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2}} \,\mathrm{d}V' \,. \tag{6.3}$$

Ebben a fejezetben a következő jelölési konvenciókhoz tartjuk magunkat: ha egy távolságot latin betűvel jelölünk, akkor ez a valóságos geometriai távolságot fogja jelenteni; ha viszont a megfelelő görög betűt használjuk, akkor optikai távolságot. Ezzel a jelöléssel az (6.3) alatti integrálban szereplő magfüggvényt az

⁴⁸ Ez csak izotrop szórás esetében lehetséges. Amikor a szórás anizotrop, ezt általában az ún. *transzport korrekció*val vesszük figyelembe, amely abban áll, hogy Σ_t helyébe a Σ_t -ot írjuk.

$$n(\mathbf{r}' \to \mathbf{r}) = \frac{e^{-\rho}}{4\pi R^2} \tag{6.4}$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$R = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$$
 és $\rho = \overline{\Sigma_t(s' \to s)}$. (6.5)

A (6.4) képlettel definiált függvényt *transzport magfüggvény*nek fogjuk nevezni. Az alábbiakban először ennek fizikai jelentésével fogunk foglalkozni.

6.1. A transzport magfüggvény

A (6.4) képlettel definiált magfüggvénynek két fizikai jelentést is lehet tulajdonítani. Először megmutatjuk, hogy a magfüggvény annak a *valószínűsége*, hogy az \mathbf{r}' helyen levő egységnyi izotrop pontforrás által termelt neutron ütközés nélkül eljut az \mathbf{r} pontnál levő egységnyi felületelemhez. Mivel a forrás izotrop, a d $\mathbf{\Omega}$ térszögbe emittált neutronok száma d $\mathbf{\Omega}/4\pi$. Tegyük fel, hogy ezek a neutronok az \mathbf{r} pontnál levő infinitezimális dA felületelem irányába repülnek. Ha dA merőleges az $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$ vektorra, akkor a felületelem által kifeszített térszög d $\mathbf{\Omega}_A = dA/R^2$, vagyis a dA felé repülő neutronok száma: $dA/4\pi R^2$. Az $e^{-\rho}$ tényező annak a valószínűsége, hogy ütközés nélkül eljutnak dA-hoz. Mivel az \mathbf{r}' helyről egyetlen neutront indítottunk el, a keresett valószínűség – egységnyi dA-ra vonatkoztatva – (vö. (6.4)):

$$\frac{\mathrm{e}^{-\rho}}{4\pi R^2} = n(\mathbf{r}' \to \mathbf{r})$$

A magfüggvény másik fizikai jelentése: megadja az előbbi pontforrás által az **r** pontban létrehozott *ütközés nélküli fluxus*t. Előbbi gondolatmenetünk alapján annak a valószínűsége, hogy a forrás által termelt neutronok ütközés nélkül elérik a d*A* felületelemet: $n(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) dA$. Láttuk, hogy d*A* kifeszít egy $d\Omega_A = dA/R^2$ térszöget. Az $(\mathbf{r}+d\mathbf{r})$ pontnál elhelyezünk egy dA' felületelemet, amely ugyanezt a térszöget feszíti ki, vagyis:

$$\frac{\mathrm{d}A'}{\left(R+\mathrm{d}R\right)^2} = \frac{\mathrm{d}A}{R^2}$$

Így azoknak a neutronoknak a száma, amelyek a dV = dAdR térfogatelemben ütköznek, a következőképpen fejezhető ki az előbbi két valószínűség különbségével:

$$\Sigma_{t} \mathcal{D}(\mathbf{r}) dV = \frac{e^{-\rho}}{4\pi R^{2}} dA - \frac{e^{-(\rho+d\rho)}}{4\pi (R+dR)^{2}} dA' = \left(\frac{e^{-\rho}}{4\pi R^{2}} - \frac{e^{-(\rho+d\rho)}}{4\pi R^{2}}\right) dA$$

amiből

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi \Sigma_{t} R^{2}} \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}R} \mathrm{e}^{-\rho} \right).$$

Mivel (6.5) alapján:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}R} = \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}s} = \Sigma_{\mathrm{t}},$$

előbbi egyenletünk azt jelenti, hogy a keresett fluxus:



vonalforrás

6.1.1. ábra. Vonalforrás által létrehozott fluxus számítása

A most igazolt tétel alapján – legalábbis elvileg – tetszőleges geometriai elrendezésre vonatkozóan meg tudjuk mondani, hogy az egyik helyen kialakuló neutronforrás egy másik helyen milyen ütközés nélküli neutronfluxust hoz létre. E kijelentés fontos példájaként meghatározzuk egy egységnyi vonalforrás által a vonaltól t távolságra levő P pontban létrehozott fluxust (6.1.1. ábra). A (61.1) képlet megadja a fluxust egy egységnyi pontforrásra vonatkozóan. Ha ilyennek tekintjük az ábrán bejelölt dz vonaldarabot, akkor az alábbi integrál fogja megadni a keresett fluxust:

$$\Phi_{\rm P} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\rho}}{4\pi R^2} dz = \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-\tau/\cos\theta}}{2\pi t^2/\cos^2\theta} dz$$

Mivel

$$\mathrm{d}z = \frac{R\mathrm{d}\theta}{\cos\theta} = \frac{t\mathrm{d}\theta}{\cos^2\theta}$$

ez a következő alakra hozható:

$$\boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{P}} = \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-\tau/\cos\theta}}{2\pi t} \mathrm{d}\theta = \frac{\mathrm{Ki}_{1}(\tau)}{2\pi t} \ . \tag{61.2}$$

A $Ki_n(x)$ Bickley-függvényeket a 3. függelékben ismertetjük.

Befejezésül annak $n(\tau)$ valószínűségét határozzuk meg, hogy a vonalforrás által termelt neutronok ütközés nélkül megtesznek *t* vízszintes távolságot. (61.2) szerint $\Phi = \text{Ki}_1(\tau')/2\pi t'$ megadja a nem ütközött neutronok fluxusát a *t'* távolságban. Ugyanakkor $2\pi \Sigma t' dt'$ annak a valószínűsége, hogy a (*t'*, *t'*+d*t'*) távolságok között viszont ütközés következik be. Ha ezeket összegezzük $t' \ge t$ -re, akkor megkapjuk annak a valószínűségét, hogy az első ütközés t (vízszintes) távolság megtétele után következik be, vagyis éppen a keresett valószínűséget:

$$n(\tau) = \int_{t}^{\infty} \operatorname{Ki}_{1}(\tau') \Sigma dt' = \int_{\tau}^{\infty} \operatorname{Ki}_{1}(\tau') d\tau' = \operatorname{Ki}_{2}(\tau), \qquad (61.3)$$

ahol figyelembe vettük az (F3.3c) összefüggést.

Nem véletlen, hogy ez a módszer konzekvensen *ütközés nélküli fluxus*sal dolgozik. Ha ugyanis nem történik ütközés, nem változik meg a neutron energiája. Ez teszi lehetővé a neutronspektrum és a térbeli eloszlás számításának a szétcsatolását: a keresett $\Phi(\mathbf{r}, E)$ fluxusra egy közelítő értéket felvéve először (6.2) szerint kiszámítjuk a $q(\mathbf{r}, E)$ neutronforrást, majd ezt állandónak tartva (6.1) szerint újraszámoljuk a fluxust, amelyet felhasználva javítjuk a neutronforrást, és így tovább, amíg az újraszámolt mennyiségek konvergálnak. Ez a forrásiterációs séma lehetővé teszi, hogy a térbeli eloszlás újraszámolása az egycsoport transzportelmélet segítségével történjen – természetesen minden E energiára külön-külön.

6.2. Ütközési valószínűségek

A továbbiakban levezetjük az adott neutronforrás mellett a fluxus számítására szolgáló összefüggéseket. Mivel ez az egycsoport elmélet szerint történik, az E energiát a képletekből elhagyjuk. Osszuk fel a teret V_i tartományokra⁴⁹, amelyek belsejében a hatáskeresztmetszetek állandók. Vezessük be az átlagos fluxust és neutronforrást:

$$\boldsymbol{\Phi}_{i} = \frac{\int \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}) \mathrm{d}V}{V_{i}} \qquad \text{és} \qquad q_{i} = \frac{\int \boldsymbol{q}(\mathbf{r}) \mathrm{d}V}{V_{i}}.$$

(6.3)-ban az **r'** szerinti térintegrált bontsuk fel az ezekre a tartományokra való integrálok összegére. Ennek érdekében definiáljuk a *transzport mátrix*ot:

$$T_{ij} = \frac{\int\limits_{V_i} \mathrm{d}V_i \int\limits_{V_j} \frac{\mathrm{d}V_j}{V_j} n(\mathbf{r}_i \to \mathbf{r}_j) q(\mathbf{r}_i)}{q_i}.$$

Ha a V_i tartományok kicsik, reális feltenni, hogy mind a forrás, mind a fluxus egy-egy tartományon belül állandó. Ezzel a transzport mátrix egyszerűbb alakra hozható:

$$T_{ij} = \frac{1}{V_j} \int_{V_i} dV_i \int_{V_j} dV_j \, n \Big(\mathbf{r}_i \to \mathbf{r}_j \Big).$$
(62.1)

 T_{ij} fizikai jelentése a következő: a V_i tartományban egységnyi neutronforrás-sűrűség hatására a V_j tartományban (ütközés nélkül) kialakuló átlagos fluxus.⁵⁰ Az egycsoport transzportelméletből ismert az ún. *reciprocitási tétel*:

⁴⁹ V_i jelentése kettős: egyrészt jelenti magát a tartományt (V_i), másrészt ennek térfogatát (V_i). A kettő között a szedés módja tesz különbséget: álló betű a térrészt, dűlt betű a térrész térfogatát jelöli.

⁵⁰ Jóllehet fizikai jelentésük hasonló, a transzport magfüggvény és a transzport mátrix között különbségek vannak. Például más a dimenziójuk: az előbbi dimenziója – (51.1) szerint – cm⁻², viszont az utób-

$$n(\mathbf{r}_j \rightarrow \mathbf{r}_i) = n(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j).$$

Ebből következik, hogy

$$V_i T_{ji} = V_j T_{ij},$$

amivel a kiszámítandó mátrixelemek száma lényegesen csökken.

Végül integráljuk a (6.3) egyenletet V_j -re, majd ennek eredményét osszuk el V_j -vel:

$$\boldsymbol{\Phi}_{j} = \sum_{i} T_{ij} \boldsymbol{q}_{i} \ . \tag{62.2}$$

Ennek az egyenletnek az alapján lehet a fluxus új iteráltját kiszámítani. A módszer nevében szereplő ütközési valószínűségek egyszerű kapcsolatban állnak a transzport magfüggvénnyel. Ha a fenti gondolatmenetben nem az $n(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)$ ütközés nélküli fluxusból, hanem a

$$p(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j) = \mathcal{L}_t(\mathbf{r}_j)n(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j)$$

(első) ütközési sűrűségből indulunk ki, a

$$p_{ji} = \Sigma_j^{t} V_i \Sigma_i^{t} T_{ji} = p_{ij}$$
(62.3)

(első) ütközési valószínűségekre jutunk, amelyek segítségével (62.2) helyett a

$$V_j \Sigma_j^{\mathsf{t}} \boldsymbol{\Phi}_j = \sum_i p_{ij} \frac{q_i}{\Sigma_i^{\mathsf{t}}}$$
(62.4)

egyenletre jutunk. Megemlítjük, hogy a (62.4) egyenletet úgy is megkaphatjuk, hogy (62.2)-t $V_i \Sigma_i^t$ -vel beszorozzuk, majd alkalmazzuk (62.3)-at. Az egész módszer az ebben egyenletben szereplő p_{ij} mennyiségekről kapta a nevét. Használatuk azért célszerű, mert szimmetrikusak (vö. (62.3)). "Ütközési valószínűségként" azonban jobban értelmezhetők az

$$n_{ij} = \frac{p_{ij}}{\Sigma_i^{t}} = V_j \Sigma_j^{t} T_{ij}$$
(62.5)

mennyiségek: megadják annak a valószínűségét, hogy az *i*-edik tartományban egységnyi (homogén) neutronforrás-sűrűséggel keletkező neutronok első ütközése a *j*edik tartományban történik.

Érdemes az eddigiekben bevezetett mennyiségek dimenzióját megvizsgálni. n_{ij} mennyiségek dimenziója: cm³, ami megfelel annak, hogy a forrássűrűséggel szorozva dimenzió nélküli számot kell kapnunk belőlük. A p_{ij} mennyiségek dimenziója ezzel szemben cm², amit a nehezen értelmezhető q_i/Σ_i^t mennyiséggel szorozva kapunk első ütközési valószínűséget, mégis ez utóbbiakat nevezi az irodalom "ütközési valószínűségeknek". A későbbi fejezetekben általában az n_{ij} mennyiségeket fogjuk tudni közvetlenül kiszámítani. (62.5)-ből látható, hogy ezeket $V_j \Sigma_j^t$ -vel osztva kapjuk T_{ij} -t, vagyis az egységnyi forrásűrűségre vonatkoztatott fluxust.

bié [fluxus/forrássűrűség] = cm⁻²/cm⁻³ = cm. A különbség oka: a magfüggvény esetében egységnyi *pontforrás*ra vonatkoztatott fluxusról van szó, viszont a mátrix esetében a fluxust egységnyi *forrássű-rűség*re vonatkoztatjuk.

6.3. Ütközési valószínűségek számítása hengergeometriában

Az ütközési valószínűségek módszerének a kulcsa a transzport mátrix számítása, ugyanis ez szolgál a vizsgált rendszer geometriájának és anyagi összetételének a leírására. A módszert legelőször hengeres geometriára vonatkozóan dolgozták ki, amelyben a V_i tartományok végtelen hosszú hengeres gyűrűk, ugyanis ez a geometria felel meg a reaktorok elemi cellájának és fűtőelemkötegének. A számítástechnikai lehetőségek fejlődése magával hozta, hogy a módszert lényegesen bonyolultabb geometriákra vonatkozóan is alkalmazni lehessen. Egyes szakemberek ezt tekintik a jövő útjának, ugyanis – a Monte Carlo módszereket leszámítva – nem ismert más módszer, amellyel a legbonyolultabb geometriákat is ilyen egyszerűen lehetne figyelembe venni. Nem szabad azonban elfelejteni, hogy az ütközési valószínűségek módszerében lényeges megszorítás a szórás izotrópiája, ami nem mindig felel meg a tényleges helyzetnek.



6.3.1. ábra. Ütközési valószínűségek számítása hengergeometriában

6.3.1. Általános hengergeometria

Ebben a fejezetben az ütközési valószínűségeknek hengergeometriában való kiszámítását ismertetjük. A hengergeometriát általánosabban fogjuk fel, mint ezt a többi fejezetben tettük: feltesszük, hogy a vizsgált rendszer olyan részekből áll, amelyek a z irányban homogének és végtelenek, de az x-y síkban tetszőleges alakzatok fordulhatnak elő. Ilyenre mutat példát a 6.3.1. ábra, amelyen a V_i tartomány ellipszis alapú henger, a V_j tartomány pedig körhenger. Mivel a hengerek végtelen hosszúak, térfogatuk is végtelen. Az alábbi képletekben mégis használjuk a "térfogat" kifejezést, amelyen az egységnyi magasságú henger térfogatát értjük. Ez pedig számszerűleg megegyezik a henger alapterületével. Ezért megállapodunk a következőben: amikor egy henger "térfogatáról" beszélünk, ezen az *alapterületet* értjük. A V_i tartomány V_i térfogata így terület dimenziójú.

A két tartomány közötti ütközési valószínűség számításához integrálnunk kell az előbbi tartományra. A rajz síkjában a forrásneutronok irányát a φ szög adja meg. Mivel a forrás izotróp, a φ függvényében kapott alábbi eredményeket majd φ -re átlagolnunk kell. Rögzített φ és y mellett először t szerint, végül az y változó szerint integrálunk. A fenti megállapodásnak megfelelően t-vel jelöljük a geometriai távolságokat és τ -val ezek optikai megfelelőjét. Tekintve, hogy az egyes tartományok végtelen hosszúak, annak a valószínűsége, hogy az ábrán a t távolsággal jellemzett pontból induló neutron első ütközése a V_j tartományban történik (vö. (61.3)):

$$n(t|y,\varphi) = \operatorname{Ki}_{2}\left(\Sigma_{i}^{t}(t_{i}-t)+\tau_{ij}\right) - \operatorname{Ki}_{2}\left(\Sigma_{i}^{t}(t_{i}-t)+\tau_{ij}+\tau_{j}\right).$$

Mivel a forrássűrűség egyenletes, $dtdy/V_i$ annak a valószínűsége, hogy a neutron a dtdy felületelemben keletkezik. Mivel a forrás izotrop, $d\varphi/2\pi$ annak a valószínűsége, hogy a keletkező neutron a (φ , φ +d φ) intervallumba eső φ által meghatározott irányban repül. A (62.5)-ben definiált mennyiség egységnyi forrássűrűségre vonatkozik. Mivel most a forrássűrűség $1/V_i$, a keresett mennyiséget a következő integrál adja:

$$n_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{0}^{t_{i}} n(t|y,\varphi) dt dy$$

Az itt szereplő y_{min} és y_{max} mennyiségek értelmét leolvashatjuk a 6.3.1. ábráról. Nyilvánvaló, hogy függnek φ -től. A φ -re való átlagolásban azokra a φ -kre kell integrálni, amelyekre találunk olyan y-t, hogy a neutronpálya metssze a V_i tartományt. Először a t szerinti integrált számítjuk ki. A Bickley-függvények integráljára vonatkozó (F3.3c) képlet szerint:

$$\int_{0}^{t_{i}} n(t|y,\varphi) dt = \frac{\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij}) - \mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij} + \tau_{i}) - \mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij} + \tau_{j}) + \mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij} + \tau_{i} + \tau_{j})}{\Sigma_{i}^{t}}.$$

Végeredményben tehát az ütközési valószínűség:

$$n_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{0}^{t_{i}} n(t|y,\varphi) dt dy =$$

$$(63.1)$$

$$=\frac{1}{2\pi\Sigma_{i}^{t}}\int_{0}^{2\pi}d\varphi\int_{y_{\min}}^{y_{\max}}(\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij})-\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij}+\tau_{i})-\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij}+\tau_{j})+\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{ij}+\tau_{i}+\tau_{j}))dy.$$

A (62.3) képlettel definiált mennyiségeket a

$$p_{ij} = \Sigma_{i}^{t} n_{ij} =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{y_{min}}^{y_{max}} (Ki_{3}(\tau_{ij}) - Ki_{3}(\tau_{ij} + \tau_{i}) - Ki_{3}(\tau_{ij} + \tau_{j}) + Ki_{3}(\tau_{ij} + \tau_{i} + \tau_{j})) dy$$
(63.2)

képlettel kapjuk meg. Vizsgáljuk meg ismét a dimenziókat. A (63.1) szerinti valószínűség dimenziója cm², ami megfelel annak, hogy a forrássűrűséget most nem cm³-re, hanem felületegységre vonatkoztatjuk. Ebben az esetben a (63.2) alatti p_{ij} dimenziója cm.

Az i = j eset speciális megközelítést igényel. Ebben az esetben

$$n(t|y,\varphi) = 1 - \operatorname{Ki}_2(\Sigma_i^{t}(t_i - t)),$$

annak a valószínűsége, hogy a forrásneutron *nem lép ki* ütközés nélkül az *i*-edik tartományból (vö. (61.3)). Ennek *t* szerinti integrálja (F3.3c) szerint:

$$\int_{0}^{t_i} n(t|y,\varphi) dt = t_i - \int_{0}^{t_i} \operatorname{Ki}_2(\Sigma_i^{\mathsf{t}}(t_i - t)) dt = t_i - \frac{\operatorname{Ki}_3(0) - \operatorname{Ki}_3(\tau_i)}{\Sigma_i^{\mathsf{t}}}.$$

Könnyű belátni, hogy t_i -nek y szerinti integrálja minden φ -re az *i*-edik tartomány V_i térfogatát adja meg. Ezzel:

$$n_{ii} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \left(t_i - \frac{\mathrm{Ki}_3(0) - \mathrm{Ki}_3(\tau_i)}{\Sigma_i^{\mathrm{t}}} \right) dy =$$
$$= V_i - \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{\mathrm{Ki}_3(0) - \mathrm{Ki}_3(\tau_i)}{\Sigma_i^{\mathrm{t}}} dy.$$

Tehát:



6.3.2. ábra. Ütközési valószínűségek gyűrűs hengergeometriában

6.3.2. Gyűrűs hengergeometria

Gyűrűs hengergeometriában a V_i tartományok a 6.3.2. ábrán látható hengergyűrűk. A V_i tartomány külső sugara R_i . Az általános esetben szükséges φ szerinti átlagolás most elmarad, mert az ábrán látható alakzat az elforgatásokkal szemben szimmetrikus. Így csak az y szerinti integrálás marad meg, amelyet a Gauss–Jacobikvadratúrával közelítjük. y diszkrét értékeit úgy választjuk meg, hogy mindegyik tartományba két érték essen. Az ezeknek megfelelő neutronpályákat jelöltük az ábrán szaggatott vonallal. Mindegyik neutronpályán összegyűjtjük az egyes tartományokhoz adódó járulékokat. Mire tehát ezeken végigmegyünk, megkapjuk az összes ütközési valószínűségeket. Legyen például a tekintett vonal a *k*-adik tartományban. Az ábráról leolvasható, hogy ekkor minden olyan p_{ij} -hez kapunk járulékot, amelyre: $j \ge i \ge k$.

Az ábrán vastagon kihúzott vonal az *i*-edik tartományon belül halad, tehát ez a neutronpálya ad járulékot az ábra szerinti p_{ij} -hez. Az alábbiakban ezt fogjuk kiszámítani. A τ_{ij}^- és τ_{ij}^+ optikai távolságoknak nyilván a

$$t_{ij}^- = \sqrt{R_j^2 - y^2} - \sqrt{R_i^2 - y^2}$$
, illetve $t_{ij}^+ = \sqrt{R_j^2 - y^2} + \sqrt{R_i^2 - y^2}$

geometriai távolságok felelnek meg. A kiszemelt neutronpálya mentén két irányban lehet haladni. Szimmetriaokokból a jobbra és balra mutató irányokból származó járulékok egymással egyenlők, így elég csak a balra mutatót kiszámítani, majd a végeredményt 2-vel megszorozni. A V_i tartomány bal oldali szeletéből (63.1) integrandusa szerint számítható járulék:

$$\operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i,j-1}^{-}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,j-1}^{-}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{ij}^{-}) + \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,j}^{-}),$$

a V_i tartomány jobb oldali szeletéből származó járulék pedig:

$$\operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,j-1}^{+}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i,j-1}^{+}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,j}^{+}) + \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{ij}^{+}).$$

Ha bevezetjük az

$$S_{ij} = \int_{0}^{R_{i}} \left(\text{Ki}_{3}(\tau_{ij}^{+}) - \text{Ki}_{3}(\tau_{ij}^{-}) \right) dy$$
(63.4a)

jelölést, akkor a

$$p_{ij} = \delta_{ij} V_i \Sigma_i^{t} + 2 \left(S_{i-1,j-1} - S_{i-1,j} - S_{i,j-1} + S_{ij} \right)$$
(63.4b)

végeredményt kapjuk.

A δ_{ij} szorzót azért vezettük be, hogy képletünk az i = j esetben is érvényes lehessen. Be kell azonban látnunk, hogy ez tényleg így is van. Ismét elég a balra haladó neutronpályákat tekinteni, majd az eredményt 2-vel megszorozni. Az *i*-edik tartomány bal oldali szeletének önmagához adott járuléka:

$$\begin{split} & \Sigma_{i}^{t}\sqrt{R_{i}^{2}-y^{2}}-\Sigma_{i}^{t}\sqrt{R_{i-1}^{2}-y^{2}}-\left(\mathrm{Ki}_{3}(0)-\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{i,i-1}^{-})\right)=\\ &=\Sigma_{i}^{t}\frac{t_{ii}^{+}-t_{i-1,i-1}^{+}}{2}+\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{i,i-1}^{-})-\mathrm{Ki}_{3}(\tau_{i-1,i-1}^{-}), \end{split}$$

hiszen nyilván $\tau_{i-1,i-1}^- = \tau_{ii}^- = 0$. Ehhez hozzá kell még vennünk az *i*-edik tartomány jobb oldali szeletének önmagához adott járulékát, amely ugyanennyi, de a későbbiek kedvéért a következő alakban írjuk fel:

$$\Sigma_{i}^{t} \frac{t_{ii}^{+} - t_{i-1,i-1}^{+}}{2} + \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,i}^{-}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i,i}^{-}),$$

hiszen nyilván $\tau_{i-1,i}^- = \tau_{i,i-1}^-$. A két járulék együtt:

$$\Sigma_{i}^{t}\left(t_{ii}^{+}-t_{i-1,i-1}^{+}\right)+\mathrm{Ki}_{3}\left(\tau_{i,i-1}^{-}\right)-\mathrm{Ki}_{3}\left(\tau_{i-1,i-1}^{-}\right)+\mathrm{Ki}_{3}\left(\tau_{i-1,i}^{-}\right)-\mathrm{Ki}_{3}\left(\tau_{ii}^{-}\right).$$

Amikor az első tag kétszeresét a $(0, R_i)$ intervallumban integráljuk, $V_i \Sigma_i^t$ -t kapunk. Emiatt jelenik meg (63.4b)-ben a δ_{ij} szorzót tartalmazó tag. Hátravan még az *i*-edik tartomány jobb oldali szeletének a bal oldali szelethez adott járuléka. A fentiek mintájára beláthatjuk, hogy ez a következővel egyenlő:

$$\operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,i-1}^{+}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i,i-1}^{+}) - \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{i-1,i}^{+}) + \operatorname{Ki}_{3}(\tau_{ii}^{+}).$$

Ezt az előzővel kombinálva (63.4b)-ben szereplő végeredményt kapjuk.

A (63.4a) alatti integrál numerikus kiszámítása történhet közvetlen Gausskvadratúrával (vö. F2.1. fejezet). Carlvik azonban észrevette, hogy a négyzetgyökök miatt numerikus problémák lépnek fel: a Ki₃ függvény harmadik deriváltja divergens az $y \rightarrow R$ határesetben divergens, ami pontatlanná teszi a közvetlen numerikus integrálást. Emiatt az integrálandó függvény argumentumában szereplő négyzetgyököt helyettesítéssel a következő alakra hozta:

$$\sqrt{R^2 - y^2} = Rx\sqrt{2 - x^2}$$
, ahol $R - y = Rx^2$, $dy = -2Rxdx$

Ezzel a helyettesítéssel a legkülső gyűrűkre vonatkozó integrál

$$\int_{a}^{b} xf(x) \mathrm{d}x$$

alakba megy át, amelyet az F2.3. fejezetben tárgyalt Gauss–Jacobi-kvadratúrával lehet nagy pontossággal kiszámítani. Ezen az alapon Carlvik egy kitűnő és kiterjedten használt szubrutint alkotott.⁵¹

6.3.3. A THERMOS program

A 6.3. és 6.4. fejezetekben általában tárgyaljuk, hogyan kell az ütközési valószínűségeket felhasználni – többek között – az elemi cella számítására. A rendkívül sikeres és emiatt széles körben használt THERMOS program a hengeres elemi cellában kialakuló neutronspektrum kiszámítására szolgál, de más elven működik, mint az általános módszer. A különbség abban van, hogy a transzport magfüggvény kiszámításában eleve figyelembe veszi, hogy a környezet fehér: a cellát elhagyó neutronok a cella határáról véletlen irányban visszaszóródnak. Emiatt az ütközési valószínűségek számítása is egyszerűsödik. Tekintsük a 6.3.3. ábrát. Az elemi cellát felosztjuk gyűrűkre, és úgy tekintjük, mintha a neutronforrás a gyűrűk középvonalában jelenne meg. Az n_{ij} mátrixelemeket nem a 6.3.2. alfejezetben írtak szerint számítjuk ki, hanem az ábrán bejelölt β szögre vonatkozó átlagolással. Minden gyűrű középvonalából elindítunk egy β szög alatt hajló neutronpályát, amelyet a cella határán, az A pontban viszszatükrözünk. Amikor a tükrözött pálya a B pontban ismét eléri a cella határát, újból tükrözzük. Geometriai megfontolásokkal belátható, hogy az ismét tükrözött pálya ekvivalens azzal, hogy a neutront a B→A pályán indítjuk vissza. A THERMOS programban még ennél is egyszerűbb a számítási módszer: a teljes A→B pálya helyett elég annak felét tekinteni. Így az A pontban való tükrözés után a neutronpálva addig halad végig az $A \rightarrow K, K \rightarrow A, A \rightarrow K, K \rightarrow A$ stb. szakaszokon, amíg a transzport magfüggvény elhanyagolhatóvá nem válik. (K az AB szakasz felezőpontja.)

⁵¹ I. Carlvik, Collision Probabilities for Finite Cylinders, Nucl. Sci. Eng., 30, 150-151 (1967a).



6.3.3. ábra. Ütközési valószínűségek számítása a THERMOS programban

Ahogy a neutronpályán haladunk előre, a pálya és a gyűrűk metszéspontjaiban kiszámítjuk a rajz síkjában vett optikai távolságokat: τ_1 , τ_2 , τ_3 , τ_4 , ... Legyen j_k annak a gyűrűnek a sorszáma, amelynek a külső határához tartozik a τ_k optikai távolság. Természetesen ezek a mennyiségek függnek a β szögtől. Ha a neutronpálya az *i*-edik gyűrűből indul, a neutronforrás-sűrűség $1/V_i$, így akkor az ütközési valószínűséget a következő képlet adja:

$$n_{ij} = \frac{V_i}{\pi} \int_{0}^{\pi} \sum_{k:j=j_k} (\text{Ki}_2(\tau_{k-1}) - \text{Ki}_2(\tau_k)) d\beta, \qquad (63.5)$$

ahol a *k*-ra való összegzést addig kell folytatni, amíg az integrandushoz való hozzájárulás elhanyagolhatóvá nem válik. (62.5) szerint ebből egyszerűen kapjuk a transzport mátrixot:

$$T_{ij} = \frac{V_i}{\pi V_j \Sigma_j^{t}} \int_{0}^{\pi} \sum_{k:j=j_k} (\text{Ki}_2(\tau_{k-1}) - \text{Ki}_2(\tau_k)) d\beta, \qquad (63.6)$$

amivel (62.2) alapján írhatjuk fel a neutronfluxust meghatározó egyenletet.

Tudjuk, hogy a Wigner-Seitz cella határán nem *tükrözni* kell a neutronpályát, hanem a neutront *véletlen irányban vissza kell szórni*. A THERMOS program a következő fogással kerüli meg ezt a problémát: fenntartja a számolással egyszerűen követhető tükrözést, de a tényleges cellát körülveszi egy abszorpciómentes réteggel, amelynek optikai vastagsága 2,5. Ha egy neutron a cellából kilépve ezen sugárirányban áthalad, majd a réteg külső felületén visszaszóródik, a cella határához visszaérve megtett optikai úthossza 5. A transzport magfüggvény $e^{-5} = 0,00674$ -szeresére csök-

ken eközben, vagyis gyakorlatilag elhanyagolhatóvá válik. Miután a neutron e segédréteg külső határáról visszatér, elhanyagolhatóvá válik, milyen módon verődött viszsza. Erre való tekintettel ez a tisztán szóró segédréteg elfogadható pontossággal szimulálja a fehér határfeltételt. Természetesen a segédrétegen belül is elegendő számú gyűrűt kell felvenni.

A cella fekete környezetét hasonló módon szimulálja a program: a cellát körülveszi egy 2,5 optikai vastagságú segédréteggel, amelynek a szórási hatáskeresztmetszete zérus. Annak a valószínűsége, hogy egy ebbe belépő és a külső felületéről visszaszóródó neutron a cellába visszatérjen, a fentiek szerint kisebb, mint 0,00674, vagyis elhanyagolható.

6.3.4. A neutronforrás számítása

Az egyes tartományokban keletkező neutronok számát a (6.2) képletben szereplő $q(\mathbf{r}, E)$ függvény adja meg. Mivel mindig többcsoport közelítésben számolunk, az E változó helyett bevezetjük a g csoportindexet. Az *i*-edik tartomány kiszemelt pontjára bevezetjük a következő jelölést:

$$q(\mathbf{r}_i, E_g) = q_{gi}.$$

Ezt a mennyiséget a neutronfluxussal a

$$q_{gi} = \Sigma_{g \to g,i}^{s} \boldsymbol{\Phi}_{gi} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{g' \to g,i}^{s} \boldsymbol{\Phi}_{g'i} = \Sigma_{i}^{s} \boldsymbol{\Phi}_{gi} + Q_{gi}$$
(63.7)

képlet kapcsolja össze, ahol Q_{gi} egyesíti magában a többi csoportban való szóródások járulékát. Itt megjelent a

$$\Sigma_i^{\rm s} = \Sigma_{g \to g,i}^{\rm s}$$

szórási hatáskeresztmetszet, amely azoknak a szóródásoknak felel meg, amelyek nem visznek ki a tekintett energiacsoportból. Folytonos energiaváltozó esetében ez hiányzik, hiszen az *E* energia minden szóródás esetében megváltozik.

Végeredményben tehát a következő egyenletekre jutunk. A (62.2) egyenletnek megfelel a

$$\Phi_{gj} = \sum_{i} T_{gij} q_{gi} \tag{63.8}$$

egyenlet, amelyben feltüntettük, hogy a transzportmátrix T_{ij} elemei függnek *g*-től. Ha a q_{gj} forrás ismert, ebből megkapjuk a *g*-edik csoporthoz tartozó fluxusnak az egyes tartományokban felvett átlagértékét. Ebből (63.7) szerint ki tudjuk számolni mindegyik tartományra vonatkozóan a forrást. Ezen a módon egy iterációt definiálhatunk, amely általában meglehetősen gyorsan konvergál. Az ütközési valószínűségek módszere ennek csak az egyik lépésére vonatkozik: adott forrás mellett megkapjuk a fluxust (63.8) szerint. Az alábbiakban ezért a forrást mindig adottnak képzeljük el.

E fejezet hátralevő részében a következő kifejezéseket fogjuk használni. A neutron *eltűnik*, ha abszorbeálódik vagy szóródás révén más energiacsoportba kerül. Ennek felel meg a $\Sigma = \Sigma_a + \Sigma_R$ hatáskeresztmetszet. A neutron *eltérül*, ha úgy szóródik, hogy energiája nem kerül ki az energiacsoportból. Ezt jellemzi az imént definiált $\Sigma_i^s \left(=\Sigma_{g\to g,i}^s\right)$ hatáskeresztmetszet. E két hatáskeresztmetszet összege Σ_t .
6.4. Az ütközési valószínűségek alkalmazása

Az ütközési valószínűségek legközönségesebb alkalmazása az elemi cella számítása. A négy- vagy hatszögletes geometriájú cellákat általában azonos területű hengeres cellával helyettesítjük. Ez a *Wigner-Seitz cella*, amelynek a szerkezete megfelel a 6.3.2. részben tárgyalt gyűrűs hengerszimmetriának. Leírásában tehát használhatók az ott kiszámított ütközési valószínűségek.

Tekintsünk egy N tartományból álló cellát, és tegyük fel, hogy a q_i forrás mindegyikben egyenletes. A cella S felületén belép egy koszinusz-eloszlású J^{ext} külső neutronáram, továbbá a cella határán kívül található közeg albédója a. Keressük az egyes tartományokhoz tartozó $\Phi_i(a)$ fluxusokat, valamint a cella határán ki- és belépő neutronáramokat (J^+ , illetve J^-).

A fenti körülmények között kialakuló fluxust két részre bontjuk: $Y_i(a)$ a kívülről belépő áramnak, $X_i^k(a)$ pedig annak a Q_k neutronforrásnak az *i*-edik tartományban megfelelő fluxus, amely minden tartományban eltűnik, kivéve a *k*-adikat, ahol 1-gyel egyenlő. Természetesen mindkét mennyiség esetében figyelembe kell venni a cella határán fellépő többszörös kilépést és visszaszóródást. A teljes fluxust a

$$\Phi_i(a) = \sum_{k=1}^{N} Q_k X_i^k(a) + J^{\text{ext}} Y_i(a)$$
(64.1)

alakban kereshetjük.

Először az a = 0-val jellemzett "fekete" környezethez tartozó mennyiségekre írunk fel egyenletet. Később megmutatjuk, hogyan lehet ezekből az $a \neq 0$ -ra vonatkozó mennyiségeket kiszámítani. A 6.3.3. alfejezetben ismertetett THERMOS program úgy számolja a transzportmátrixot, hogy eleve figyelembe veszi a fehér határfelületet, vagyis az a = 1 albédót, továbbá nem tételez fel külső áramot, vagyis $J^{\text{ext}} = 0$. Ezzel nincs mit tennünk, hiszen a program erre a speciális esetre vonatkozóan a kész megoldást szolgáltatja. Az alábbiak ezért nem a THERMOS-szal kapható fluxusra vonatkoznak, hanem a 6.3.2. alfejezetben kiszámolt ütközési valószínűségek használatát mutatják be. Emlékeztetünk rá, hogy az ütközési valószínűségek függetlenek a cella környezetének az albédójától.

6.4.1. Cella fekete környezetben

A neutronforrásokhoz tartozó fluxusokat úgy számíthatjuk ki, hogy k = 1, 2, ..., N-re megoldjuk a (62.4) egyenletrendszert, amelyet most a

$$V_i \Sigma_i^{\mathsf{t}} X_i(0) = \sum_j n_{ji} q_i j$$
(64.2)

alakban írunk fel. Az ebben szereplő q_j neutronforrás (63.7) szerint két részből tevődik össze: a régióban történő, a g energiacsoportból nem kivezető neutronszórások (tehát az eltérülések), valamint a többi csoportban történő szórások járuléka a g csoportban. Ha ezt beírjuk a (64.2) egyenletbe, a

$$V_{i}\Sigma_{i}^{t}X_{i}(0) = \sum_{j} n_{ji} \left(\Sigma_{j}^{s}X_{j}(0) + Q_{j} \right)$$
(64.3)

egyenletet kapjuk. A g indexet az egyszerűség kedvéért elhagytuk. A felírandó egyenletrendszerben $X_i^k(0)$ játssza $X_i(0)$ szerepét, továbbá Q_j helyébe pedig δ_{kj} -t helyettesítünk:

$$\Sigma_{i}^{t}V_{i}X_{i}^{k}(0) - \sum_{j=1}^{N} n_{ji}\Sigma_{j}^{s}X_{j}^{k}(0) = n_{ki}, \qquad (k = 1, 2, ..., N).$$
(64.4)

Ez minden k-ra egy $N \times N$ -es egyenletrendszer, amelyet k mindegyik értékére különkülön meg kell oldani. Könnyebbség azonban, hogy a (64.4) egyenletrendszerek együtthatómátrixa minden k-ra azonos. Érdemes tehát ennek inverzét előre kiszámítani.

A (64.4) egyenlet fizikai jelentése a következő. A jobb oldalon szereplő n_{ki} definíció szerint annak a valószínűsége, hogy a *k*-adik tartományban keletkező neutron az *i*-edik tartományban ütközik először. A bal oldal első tagja az *i*-edik tartományban történő ütközések teljes számát adja. Ebből úgy kapjuk meg az először ütközött neutronok számát, ha levonjuk a legalább egyszer eltérült neutronokét.

A fluxus másik összetevőjének a meghatározására szolgáló egyenletrendszert analóg megfontolással kaphatjuk meg. A bal oldalt formálisan ugyanabban az alakban írjuk fel:

$$\Sigma_i^{\mathsf{t}} V_i Y_i(0) - \sum_{j=1}^N n_{ji} \Sigma_j^{\mathsf{s}} Y_j(0) = \gamma_i.$$
(64.5)

Az itt bevezetett γ_i mennyiség fizikai jelentése – az előzők analógiájára – a következő: a cella külső határán izotrop szögeloszlással belép egy neutron, és γ_i annak a valószínűsége, hogy első ütközése az *i*-edik tartományban történik. A következő alfejezetben foglalkozunk e mennyiség kiszámításával.

(64.4) és (64.5) együttesen (N+1) egyenletrendszert szolgáltat. Megoldásuk segítségével a (64.1) képlet alapján számíthatjuk ki a fekete környezetben található cellában kialakuló fluxust:

$$\Phi_{i}(0) = \sum_{k=1}^{N} Q_{k} X_{i}^{k}(0) + J^{\text{ext}} Y_{i}(0).$$
(64.6)

Ahhoz, hogy ebből megkapjuk az $a \neq 0$ albédójú környezethez tartozó fluxust, be kell vezetnünk a feketeség és a kiszökési valószínűség fogalmát.

6.4.2. Feketeség és kiszökési valószínűség

Az ütközési valószínűségek ismeretében meghatározhatunk két fontos menynyiséget: egy tartomány *feketeség*ét és a *kiszökési valószínűség*et, amelyek definíciója a következő:

- <u>Feketeség</u>: feltéve, hogy a tartomány felületén izotrop szögeloszlással belép egy neutron, γ megadja annak a valószínűségét, hogy első ütközése a tartományban történik; Γ ugyanezt a valószínűséget adja meg, ha többszöri eltérülést is megengedünk, vagyis Γ annak a valószínűsége, hogy a neutron a tartományban eltűnik a tekintett energiacsoportból.
- <u>Kiszökési valószínűség</u>: *p* annak a valószínűsége, hogy a tartományban egyenletes eloszlással keletkező neutron *ütközés nélkül* kiszökik a tartományból; *P* annak a valószínűsége, hogy a neutron kiszökik a tartományból. Az utóbbi esetében tehát

megengedjük, hogy a kiszökés előtt a neutron a tartományon belül néhányszor eltérüljön.

Először tekintsük a tartományt homogénnek. A feketeség definíciójában szereplő izotrop szögeloszlás azt jelenti, hogy a beeső neutron irányeloszlása arányos a felület normálisával bezárt szög koszinuszával. Ezt úgy tudjuk elérni, hogy a tekintett V tartományon kívül egy végtelen (szintén homogén) közeget képzelünk el, amelyben a hatáskeresztmetszetek ugyanazok, mint a tartományban, továbbá a neutronforrás térfogati sűrűsége ugyanúgy 1/V, mint a tartományon belül. Ez azt jelenti, hogy a fluxus minden pontban $\Phi = 1/(\Sigma V)$, ahol $\Sigma = \Sigma_a + \Sigma_R$. Mivel – definíció szerint – a tartományban keletkező neutronok közül *P* számú szökik ki, ugyanennyi neutronnak kell a tartomány felületén kívülről belépnie, és ott eltűnnie. A belépő áram $\Phi/4$, tehát

$$P = \frac{\Phi}{4}S\Gamma = \frac{S\Gamma}{4\Sigma V}, \quad \text{vagyis} \qquad \Gamma = \frac{4V}{S}\Sigma P = \bar{\ell}\Sigma P, \quad (64.7)$$

ahol *S* a tartomány felülete és $\overline{\ell}$ az átlagos húrhossz a tartományon belül. Ha ugyanezt a gondolatmenetet az első ütközési mennyiségekre is megismételjük, az analóg

$$\gamma = \frac{4V}{S} \Sigma p = \overline{\ell} \Sigma_{t} p \tag{64.8}$$

összefüggést kapjuk.

Kapott képleteink bonyolultabb helyzetekben is érvényesek, vagyis fel lehet tételezni, hogy a belépő neutronok szögeloszlása ugyanaz, mint az előző esetben. Ez a feltevés meglepően jól teljesül a gyakorlatban. A vizsgált tartományt fent koaxiális gyűrűkre osztottuk. Legyen P_i annak a valószínűsége, hogy az *i*-edik tartományban keletkező neutronok kiszöknek a tartomány S külső határfelületén. Ekkor annak Γ_i valószínűsége, hogy az S külső felületen koszinusz szögeloszlással belépő neutron az *i*-edik gyűrűben eltűnik, a következő kapcsolatban áll az előbbi valószínűségel:

$$\Gamma_i = \frac{4V_i}{S} \Sigma_i P_i. \tag{64.9}$$

Ezt a mennyiséget *parciális feketeség*nek nevezzük. Hasonló kapcsolat áll fenn az első ütközéshez tartozó analóg mennyiségek között is:

$$\gamma_i = \frac{4V_i}{S} \Sigma_i^{t} p_i \,. \tag{64.10}$$

Befejezésül kiszámítjuk a p_i kiszökési valószínűséget. Tegyük fel, hogy a fluxus a vizsgált rendszer minden gyűrűjében azonos ($\boldsymbol{\Phi}$). Ekkor az *i*-edik gyűrűben történő ütközések teljes száma $\Sigma_i^{t} V_i \boldsymbol{\Phi}$, aminek meg kell egyeznie az ott keletkező forrásneutronok számával. Velük a következő dolgok történhetnek:

- Ütközés nélkül kiszökhetnek a rendszer külső felületén. A p_i kiszökési valószínűség definíciója szerint ezek száma: Σ^t_iV_iΦp_i.
- Első ütközésük valamelyik gyűrűben lehet. Mivel az egységnyi térfogatban keletkező forrásneutronok száma Σ^t_iΦ, – definíció szerint – Σ^t_iΦn_{ij} számú neutron első ütközése fog a *j*-edik tartományban megtörténni [vö. (63.2)].

A mondottak szerint tehát írhatjuk:

$$\Sigma_i^{\mathsf{t}} V_i \boldsymbol{\Phi} = \Sigma_i^{\mathsf{t}} V_i \boldsymbol{\Phi} p_i + \boldsymbol{\Phi} \Sigma_i^{\mathsf{t}} \sum_{j=1}^N n_{ij} ,$$

amiből

$$V_i p_i = V_i - \sum_{j=1}^N n_{ij} .$$
(64.11)

Ez az egyenlet közvetlenül is levezethető lett volna. Ha ugyanis a térfogattal osztunk, a szumma *j*-edik tagja annak a valószínűsége, hogy az *i*-edik tartományban keletkező neutron a *j*-edikben ütközik először, tehát maga a szumma annak valószínűsége, hogy a neutron ütközik, tehát nem szökik ki. Ezt 1-ből levonva kapjuk a kiszökés valószínűségét. γ_i -t (64.10) és (64.11) alapján a következő képlettel számíthatjuk ki:

$$\gamma_i = \frac{4\Sigma_i^{t}}{S} \left(V_i - \sum_{j=1}^N n_{ij} \right).$$
(64.12)

Ezt kell (64.5) jobb oldalába helyettesítenünk.

6.4.3. Részben reflektált cella kívülről belépő árammal

Az alábbiakban kifejezzük az $a \neq 0$ -ra vonatkozó mennyiségeket az a = 0-val jellemzett "fekete" környezethez tartozó mennyiségekkel. Ehhez szükségünk van a többszörös kilépéshez és visszaszóródáshoz tartozó sokszorozási tényezőre. A 6.4.2. alfejezetben bevezettük a cella feketeségét (Γ), amelyet ki lehet fejezni az egyes tartományok parciális feketeségével:

$$\Gamma = \sum_{i=1}^{N} \Gamma_i = \sum_{i=1}^{N} \Sigma_i V_i Y_i(0), \qquad (64.13)$$

ugyanis egységnyi belépő áram hatására éppen ennyi neutron tűnik el a cellában, ha nem vesszük figyelembe a többszörös kilépéseket és visszaszóródásokat. (64.13)-ban azért adhattuk össze a Γ_i parciális feketeségeket, mert egymást kizáró események valószínűségeiről van szó. (1– Γ) azoknak a neutronoknak a száma, amelyek egy a cellába belépő neutron hatására a cellából kilépnek. Ebből $a(1-\Gamma)$ számú neutron szóródik vissza, és lép be újból a cellába. Közülük $a(1-\Gamma)^2$ számú lép ki ismét, amelyek közül $a^2(1-\Gamma)^2$ számú kerül vissza a cellába. Ezt tovább folytatva azt kapjuk, hogy minden, a cellába kívülről belépő neutron

$$1 + a(1 - \Gamma) + [a(1 - \Gamma)]^2 + ... = \frac{1}{1 - a(1 - \Gamma)}$$

értékkel járul hozzá az eredő belépő áramhoz (\mathcal{J}).

Amikor $a \neq 0$, a tartomány belsejében keletkező forrásneutronok többszörös ki-belépéssel hozzák létre a cella határán kilépő eredő neutronáramot. Miután a forrásneutronok először elérték a cella határát, *a*-szorosuk visszaszóródik. Az utóbbiak közül egyesek – néhányszori eltérülés után – másodszor is elérik a cella határát, majd *a*-szorosuk ismét visszaszóródik, és így tovább. *b*-vel jelöljük azoknak a forrásneutronoknak a számát, amelyek még a visszaszóródás előtt kijutnak a határra. Amikor a cella környezete fekete (*a* = 0), *b* megadja a cellából kifolyó neutronok számát. Két módon tudjuk *b*-t meghatározni. Ha az *i*-edik gyűrűben egységnyi a forrássűrűség, akkor ott V_i számú neutron keletkezik, amelyek hatására visszaszóródás nélkül – definíció szerint – $X_j^i(0)$ fluxus jön létre a *j*-edik tartományban. A *j*-edik tartományban ennek megfelelően eltűnő neutronok száma

$$\Sigma_j V_j X_j^i(0)$$
.

A maradék kilép a határon. Ezzel az *i*-edik régióban levő egységnyi neutronforrás hatására a cella határán először kilépő neutronok száma

$$b_i = V_i - \sum_{j=1}^N \Sigma_j V_j X_j^i(0).$$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy ez a mennyiség akkor adja meg a kiszökő neutronok számát, amikor az *i*-edik tartományban egységnyi a forrássűrűség. Ehelyett a képlet helyett – az összegzés elkerülése érdekében – olyan képletet keresünk, amelyben a 6.4.2. alfejezetben bevezetett P_i kiszökési valószínűség szerepel, amelyet b_i -vel a $b_i = V_i P_i$ összefüggés kapcsol össze. A (64.9) képlet szerint⁵²

$$b_i = V_i P_i = \frac{S\Gamma_i}{4\Sigma_i}.$$

 Γ_i definiciója szerint $\Gamma_i = \Sigma_i V_i Y_i(0)$, vagyis [vö. (64.2)]

$$b_i = \frac{SV_i Y_i(0)}{4}.$$
 (64.14a)

A cella határát így

$$b = \sum_{i=1}^{N} Q_i b_i = \frac{S}{4} \sum_{i=1}^{N} Q_i V_i Y_i(0)$$
(64.14b)

számú neutron éri el először.

A kiszámított mennyiségek segítségével a következőképpen kaphatjuk meg a cellában kialakuló fluxust. A kívülről belépő neutronáram hatására az *i*-edik tartományban létrejövő fluxus

$$Y_i(a) = \frac{Y_i(0)}{1 - a(1 - \Gamma)}.$$
(64.15a)

Az egyes régiókban levő források hatására kialakuló fluxust két rész összegeként állíthatjuk elő. Először vesszük azoknak a neutronoknak a hozzájárulását, amelyek sohasem érik el a cella határát. Számuk $X_i^k(0)$, ha a *k*-adik tartományban levő forrás egységnyi. Ezekhez járul a cella határát először elérő neutronok b_k száma, amelyek közül ab_k szóródik vissza a cellába. Az utóbbiak hatására kialakuló fluxust (64.15a)ban már felírtuk. Végeredményben

$$X_{i}^{k}(a) = X_{i}^{k}(0) + \frac{ab_{k}Y_{i}(0)}{1 - a(1 - \Gamma)}.$$
(64.15b)

⁵² Közbevetőleg érdemes megjegyezni, hogy ez a képlet teszi lehetővé a feketeség kiszámítását, ha erre szükség van. Természetesen ehhez előbb meg kell oldanunk a (54.4) és (54.5) egyenleteket.

A kilépő áramhoz szintén (J^{+}) két hozzájárulást kapunk. Az egyik a forrásneutronok közül azoknak a *b* száma, amelyek először érik el a cella határát, a másik pedig a kívülről belépő neutronok közül azoké, amelyek a cellán keresztül haladva először jutnak vissza a cella határához. Ez utóbbiak száma $(1 - I)J^{\text{ext}}$. Ha e két járulékhoz tartozó neutronok többszörös kilépését és visszaszóródását is számba vesszük, a következő kilépő neutronáramot kapjuk:

$$J^{+}(a) = \frac{b + (1 - \Gamma)J^{\text{ext}}}{1 - a(1 - \Gamma)}.$$
(64.16a)

Az eredő belépő áram ettől annyiban különbözik, hogy a *b* járulékot le kell csökkenteni az albédóval, továbbá ehhez hozzá kell venni a külső áramot:

$$J^{-}(a) = \frac{ab + J^{\text{ext}}}{1 - a(1 - \Gamma)}.$$
 (64.16b)

E két mennyiség különbsége a cella határán kialakuló nettó neutronáram:

$$J(a) = \frac{(1-a)b - \Gamma J^{\text{ext}}}{1 - a(1 - \Gamma)}.$$
 (64.16c)

Megjegyezzük, hogy az itt kapott áramok kielégítik a

$$J^{+}(a) = b + (1 - \Gamma)J^{-}(a),$$

$$J^{-}(a) = aJ^{+}(a) + J^{\text{ext}}$$

egyenletrendszert, ami nem más, mint a cellába ki-belépő áramok mérlege. Például az első egyenlet szerint a cella határán kilépő áram két részből tevődik ösze: egyrészt a cellában keletkező forrásneutronok közül a határt először elérő neutronok száma (*b*), másrészt a kívülről belépő áramnak a cellában el nem tűnő része. Hasonlóan értelmezhető a másik egyenlet is. A (64.16) képleteket tulajdonképpen ebből az egyenletrendszerből kiindulva is megkaphattuk volna.

A (64.16) formulák jól értelmezhető eredményeket adnak a két határesetben. Amikor a cella környezete teljesen reflektáló (azaz "fehér": a = 1), külső áram nélkül ($J^{\text{ext}} = 0$) a (64.16c) képlet szerint J(1) = 0. Ekkor

$$J^{+}(1) = J^{-}(1),$$

ami azt jelenti, hogy a ki- és a belépő neutronáramok megegyeznek. Pontosan ezt jelenti a fehér határfeltétel. Amikor a cella külső határán az áram zérus, (például) P₁ közelítésben ez azt jelenti, hogy a neutronfluxusnak ott maximuma van. Amikor van külső áram ($J^{\text{ext}} \neq 0$), a (64.16c) képlet szerint $J(1) = -J^{\text{ext}}$, ami azt jelenti, hogy a cella belsejében keletkező neutronok nem befolyásolják a cella határán kialakuló neutronáramot. A másik véglet a cella fekete környezete: a = 0, amikor

$$J^{-}(1) = J^{\text{ext}}$$

Mivel ekkor a környezet nem szór vissza semmit, a belépő áram megegyezik a kívülről jövő árammal.



7. A KIÉGÉS

7.1*a. ábra.* Az uránlánc. A láncban az ²⁴²Am izotóp környezetét a 7.1*b. ábrá*n mutatjuk be részletesen. A bekeretezett izotópok hasadási hatáskeresztmetszete a többiekéhez képest nagy



7.1b. ábra. Az uránláncban az ²⁴²Am izotóp környezete részletesen. A bekeretezett izotóp hasadási hatáskeresztmetszete a többiekéhez képest nagy



7.2. *ábra*. A tóriumlánc. A bekeretezett izotópok hasadási hatáskeresztmetszete a többiekéhez képest nagy



7.3. *ábra*. Hasadási termékek bomlási lánca: a) A = 135, b) A = 149

7.1. Az uránlánc

- N_i magsűrűség;
- $\sigma_i^{\rm a}$ abszorpciós hatáskeresztmetszet;
- λ_i radioaktív bomlási állandó;
- *j* annak az izotópnak a sorszáma, amelyből az *i*-edik izotóp (n,γ) reakció útján keletkezik;
- *k* annak az izotópnak a sorszáma, amelyből az *i*-edik izotóp radioaktív bomlás útján keletkezik.

$$\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}t} = -\left(\sigma_i^{\mathrm{a}}\phi + \lambda_i\right)N_i + \sigma_j^{\mathrm{c}}\phi N_j + \lambda_k N_k, \qquad (72.1)$$

²³⁵ U:	25	²³² Th:	02	²³⁹ Pu:	49
²³⁸ U:	28			²⁴⁰ Pu:	40

stb. Könnyű ellenőrizni, hogy a 7.1. és 7.2. *ábrák*on mutatott izotópláncokra ez a jelölésmód egyértelmű.

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}N_{41}}{\mathrm{d}t} &= \sigma_{40}^{\mathrm{c}} \phi N_{40} - \left(\sigma_{41}^{\mathrm{a}} \phi + \lambda_{41}\right) N_{41}, \\ \frac{\mathrm{d}N_{42}}{\mathrm{d}t} &= \sigma_{41}^{\mathrm{c}} \phi N_{41} + \lambda_{52}^{\mathrm{K}} N_{52} - \sigma_{42}^{\mathrm{a}} \phi N_{42}, \\ \frac{\mathrm{d}N_{43}}{\mathrm{d}t} &= \sigma_{42}^{\mathrm{c}} \phi N_{42} - \left(\sigma_{43}^{\mathrm{a}} \phi + \lambda_{43}\right) N_{43}, \end{aligned}$$

$$\frac{dN_{51}}{dt} = \lambda_{41}N_{41} - \sigma_{51}^{a}\phi N_{51},$$

$$\frac{dN_{52}}{dt} = 0.89\sigma_{51}^{c}\phi N_{51} - \left(\lambda_{52}^{K} + \lambda_{52}^{\beta}\right)N_{52},$$

$$\frac{dN_{52m}}{dt} = 0.11\sigma_{51}^{c}\phi N_{51} - \sigma_{52m}^{a}\phi N_{52m},$$

$$\frac{dN_{53}}{dt} = \lambda_{43}N_{43} + \sigma_{52m}^{c}\phi N_{52m} - \sigma_{53}^{a}\phi N_{53}.$$

Hurkok linearizálása:

1)
$${}^{241}\mathrm{Pu} \xrightarrow{(n,\gamma)}{242} \mathrm{Pu} \xrightarrow{(n,\gamma)}{243} \mathrm{Pu} \xrightarrow{\beta}{243} \mathrm{Am}$$

2)
$${}^{241}\mathrm{Pu} \xrightarrow{\beta}{}^{241}\mathrm{Am} \xrightarrow{(n,\gamma),89\%}{242}\mathrm{Am} \xrightarrow{\mathrm{K-bef.}}{}^{242}\mathrm{Pu} \xrightarrow{(n,\gamma)}{243}\mathrm{Pu} \xrightarrow{\beta}{}^{243}\mathrm{Am}$$

3)
$${}^{241}\mathrm{Pu} \xrightarrow{\beta}{}^{241}\mathrm{Am} \xrightarrow{(n,\gamma),11\%}{}^{242m}\mathrm{Am} \xrightarrow{(n,\gamma)}{}^{243}\mathrm{Am}$$

Egyenletek:

1. lineáris lánc:

$$\begin{aligned} \frac{dN_{41}}{dt} &= \sigma_{40}^{c} \phi N_{40} - \left(\sigma_{41}^{a} \phi + \lambda_{41}\right) N_{41}, \\ \frac{dN_{42}'}{dt} &= \sigma_{41}^{c} \phi N_{41} - \sigma_{42}^{a} \phi N_{42}', \\ \frac{dN_{43}'}{dt} &= \sigma_{42}^{c} \phi N_{42}' - \left(\sigma_{43}^{a} \phi + \lambda_{43}\right) N_{43}', \\ \frac{dN_{53}'}{dt} &= \lambda_{43} N_{43}' - \sigma_{53}^{a} \phi N_{53}'. \end{aligned}$$

2. lineáris lánc:

$$\begin{split} \frac{dN_{41}}{dt} &= \sigma_{40}^{c} \phi N_{40} - \left(\sigma_{41}^{a} \phi + \lambda_{41}\right) N_{41}, \\ \frac{dN_{51}}{dt} &= \lambda_{41} N_{41} - \sigma_{51}^{a} \phi N_{51}, \\ \frac{dN_{52}}{dt} &= 0,89 \sigma_{51}^{c} \phi N_{51} - \left(\lambda_{52}^{K} + \lambda_{52}^{\beta}\right) N_{52}, \\ \frac{dN_{42}''}{dt} &= \lambda_{52}^{K} N_{52} - \sigma_{42}^{a} \phi N_{42}'', \\ \frac{dN_{43}''}{dt} &= \sigma_{42}^{c} \phi N_{42}'' - \left(\sigma_{43}^{a} \phi + \lambda_{43}\right) N_{43}'', \\ \frac{dN_{53}''}{dt} &= \lambda_{43} N_{43}'' - \sigma_{53}^{a} \phi N_{53}''. \end{split}$$

3. lineáris lánc:

$$\frac{dN_{41}}{dt} = \sigma_{40}^{c} \phi N_{40} - (\sigma_{41}^{a} \phi + \lambda_{41}) N_{41},$$

$$\frac{dN_{51}}{dt} = \lambda_{41} N_{41} - \sigma_{51}^{a} \phi N_{51},$$

$$\frac{dN_{52m}}{dt} = 0,11 \sigma_{51}^{c} \phi N_{51} - \sigma_{52m}^{a} \phi N_{52m},$$

$$\frac{dN_{53}^{\prime\prime\prime}}{dt} = \sigma_{52m}^{c} \phi N_{52m} - \sigma_{53}^{a} \phi N_{53}^{\prime\prime\prime}.$$

Az 1. és 2. lineáris lánc összege:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}(N'_{42}+N''_{42})}{\mathrm{d}t} &= \sigma^{\mathrm{c}}_{41} \phi N_{41} + \lambda^{\mathrm{K}}_{52} N_{52} - \sigma^{\mathrm{a}}_{42} \phi (N'_{42}+N''_{42}),\\ \frac{\mathrm{d}(N'_{43}+N''_{43})}{\mathrm{d}t} &= \sigma^{\mathrm{c}}_{42} \phi (N'_{42}+N''_{42}) - \left(\sigma^{\mathrm{a}}_{43} \phi + \lambda_{43}\right) (N'_{43}+N''_{43}), \end{aligned}$$

Ha

 $N_{42} = N_{42}' + N_{42}''$

és

$$N_{43} = N'_{43} + N''_{43},$$

akkor ezek az egyenletek azonosak az eredeti láncra felírt egyenletekkel. Hasonlóan legyen

 $N_{53} = N_{53}' + N_{53}'' + N_{53}'''.$

A három lineáris láncra vonatkozó egyenletek összege kiadja az eredeti láncra felírt egyenletet:

$$\frac{\mathrm{d}(N'_{53} + N''_{53} + N''_{53})}{\mathrm{d}t} = \lambda_{43} (N'_{43} + N''_{43}) + \sigma^{\mathrm{c}}_{52\mathrm{m}} \phi N_{52\mathrm{m}} - \sigma^{\mathrm{a}}_{53} \phi (N'_{53} + N''_{53} + N''_{53})$$

7.2. A lineáris láncokra vonatkozó egyenletek megoldása

Vektori jelölés:

$$\mathbf{N}(t) = \begin{bmatrix} N_1(t) \\ N_2(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ N_n(t) \end{bmatrix}$$

A lineáris láncra vonatkozó egyenletek vektori alakja:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{N}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{A}\mathbf{N}(t) + \mathbf{F} ,$$

ahol F ismert vektor. Csak a hasadási termékek esetében lép fel, a hasadási gyakorisággal arányos.

A homogén egyenlet általános megoldása:

$$\mathbf{N}_{h}(t) = \mathbf{e}^{\mathbf{A}t}\mathbf{C}$$
.

Az inhomogén egyenlet egy partikuláris megoldása:

$$\mathbf{N}_{\rm inh}(t) = \mathbf{e}^{\mathbf{A}t} \mathbf{C}(t)$$

Behelyettesítve:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{N}_{\mathrm{inh}}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{A}\mathbf{e}^{\mathbf{A}t}\mathbf{C}(t) + \mathbf{e}^{\mathbf{A}t}\frac{\mathrm{d}\mathbf{C}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{A}\mathbf{N}_{\mathrm{inh}}(t) + \mathbf{e}^{\mathbf{A}t}\frac{\mathrm{d}\mathbf{C}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{A}\mathbf{N}_{\mathrm{inh}}(t) + \mathbf{F},$$

amiből

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{C}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathrm{e}^{-\mathbf{A}t}\mathbf{F},$$
$$\mathbf{C}(t) = \int_{0}^{t} \mathrm{e}^{-\mathbf{A}t'}\mathrm{d}t' \mathbf{F} = \mathbf{A}^{-1}\int_{0}^{t} \mathbf{A}\mathrm{e}^{-\mathbf{A}t'}\mathrm{d}t' \mathbf{F} = \mathbf{A}^{-1}\left[-\mathrm{e}^{-\mathbf{A}t'}\right]_{0}^{t} \mathbf{F} = \mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{E}-\mathrm{e}^{-\mathbf{A}t}\right)\mathbf{F}$$

Ezzel

$$\mathbf{N}_{inh}(t) = \mathbf{e}^{\mathbf{A}t} \mathbf{C}(t) = \mathbf{e}^{\mathbf{A}t} \mathbf{A}^{-1} \left(\mathbf{E} - \mathbf{e}^{-\mathbf{A}t} \right) \mathbf{F} = \mathbf{A}^{-1} \left(\mathbf{e}^{\mathbf{A}t} - \mathbf{E} \right) \mathbf{F}.$$

Ha $N(t=0) = N_0$, akkor a differenciálegyenlet megoldása

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{e}^{\mathbf{A}t}\mathbf{N}_0 + \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{e}^{\mathbf{A}t} - \mathbf{E})\mathbf{F}.$$

Az **A** mátrix alakja:

	$-a_1$	0	0	0
	c_1	$-a_{2}$	0	0
Λ -	0	c_2 –	- <i>a</i> ₃	0
A –		•••••		
		•••••		
	0	0		$c_{n-1} - a_n$

k-adik sajátértéke –*a_k*. A jobb oldali sajátvektorok:

$$u_{ki} = 0, \quad i < k$$

$$u_{kk} = 1$$

$$u_{ki} = \frac{c_k c_{k+1} \dots c_{i-1}}{(a_{k+1} - a_k)(a_{k+2} - a_k) \dots (a_i - a_k)}, \quad i > k$$

A bal oldali sajátvektorok:

$$\begin{aligned} v_{ki} &= \frac{c_i c_{i+1} \dots c_{k-1}}{\left(a_i - a_k\right) \left(a_{i+1} - a_k\right) \dots \left(a_{k-1} - a_k\right)}, & i < k \\ v_{kk} &= 1 \\ v_{ki} &= 0, \quad i > k \end{aligned}$$

A bal oldali sajátvektorok transzponáltjaiból megalkotjuk a

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{v}_2^{\mathrm{T}} \\ . \\ . \\ \mathbf{v}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

mátrixot, a jobb oldaliakból pedig a következőt:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \dots \ \mathbf{u}_n \end{bmatrix}$$

Ezek egymás inverzei:

$$UV = VU = E$$

Az A mátrix ezek segítségével diagonalizálható:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} < -a > \mathbf{V} ,$$

ahol <-a> olyan diagonális mátrix, amelynek az elemei $-a_1, -a_2, ..., -a_n$. Ezzel a differenciálegyenlet megoldása

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{U} < \mathbf{e}^{-at} > \mathbf{V}\mathbf{N}_0 + \mathbf{U} < -\frac{1}{a} > \mathbf{V}\left(\mathbf{U} < \mathbf{e}^{-at} > \mathbf{V} - \mathbf{U}\mathbf{V}\right)\mathbf{F} =$$
$$= \mathbf{U} < \mathbf{e}^{-at} > \mathbf{V}\mathbf{N}_0 + \mathbf{U} < -\frac{1}{a} > \left(<\mathbf{e}^{-at} > -<1>\right)\mathbf{V}\mathbf{F}$$
$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{U} < \mathbf{e}^{-at} > \mathbf{V}\mathbf{N}_0 + \mathbf{U} < \frac{1 - \mathbf{e}^{-at}}{a} > \mathbf{V}\mathbf{F}$$

1. FÜGGELÉK. A TRANSZPORTEGYENLET KÜLÖNBÖZŐ GEOMETRIÁKBAN

Amikor a vizsgált rendszer szimmetriái miatt a szögfüggő fluxust a derékszögű koordináták helyett valamilyen más koordináták függvényének célszerű tekinteni, a transzportegyenlet minden tagja változatlan alakú marad, kivéve a kifolyási tagot. Ez utóbbi az Ω vektor mentén felmért koordináta szerinti derivált:

$$\frac{d\Phi(\mathbf{r}_0 + s\mathbf{\Omega})}{ds} = \Omega_x \frac{\partial\Phi}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial\Phi}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial\Phi}{\partial z} .$$
(F1.1)

Úgy lehet más koordinátákra áttérni, hogy ezt a vonalmenti deriváltat kifejezzük az új koordinátákkal.



F1.1. ábra. Hengerkoordináták

F1.1. Hengergeometria

Hengerszimmetrikus rendszer esetében hengerkoordinátákat célszerű használni. Ekkor a kiszemelt P pont (x, y, z) koordinátái helyett az (r, z) hengerkoordinátákat használjuk. Itt z ugyanaz, mint korábban, r pedig a P pontnak az x-y síkra való vetítésével kapott P' vetületnek az origótól való távolsága $(F1.1. \, dbra)$. Az Ω vektort pedig a θ és φ szöggel adjuk meg, amelyek definíciója szintén látszik az F1.1. ábrán. θ az Ω vektornak a z tengellyel bezárt szöge. A φ szög meghatározásához az Ω vektort vetítjük az x-y síkra. φ az így kapott Ω' vektornak az origót a P' ponttal összekötő sugárral bezárt szöge. Hengerkoordinátákban a szögfüggő fluxus ötváltozós függvény: $\Phi(r,z,E,\theta,\varphi)$, amelynek az (F1.1) szerinti vonalmenti deriváltját a következő alakban írhatjuk fel:

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial\Phi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial s} + \frac{\partial\Phi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial s} + \frac{\partial\Phi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial s} + \frac{\partial\Phi}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial s}.$$

Az F1.1. ábráról leolvasható, hogy az Ω irányban való ds elmozduláskor egyrészt θ nem változik meg, másrészt z megváltozása dz = ds·cos θ , vagyis:

$$\frac{\partial z}{\partial s} = \cos \theta$$
 és $\frac{\partial \theta}{\partial s} = 0$,

amivel



F1.2. ábra. Hengerkoordináták vetülete az *x*–*y* síkra

r és φ deriváltjának a kiszámításához nézzük az *F1.2. ábrát.* Történjen az Ω vektor irányában ds elmozdulás. Ennek az *x*–*y* síkra való vetülete az ábrán a

 $\overline{\mathbf{P}'\mathbf{Q}'} = \mathbf{d}s' = \mathbf{d}s\sin\theta \tag{F1.3}$

távolság. Az OP'Q' háromszög szögeiből könnyen kiszámolhatjuk, hogy az origónál keletkező szög $-d\phi$, vagyis

$$\mathrm{TP}' = r\sin(-\mathrm{d}\varphi)\,.$$

Ha ugyanezt a Q' pontnál levő szöggel is kifejezzük, az

$$r\sin(-d\varphi) = ds'\sin(\varphi + d\varphi)$$

összefüggést kapjuk. Mindkét oldalt ds'-vel osztva, majd a ds' $\rightarrow 0$ határértékre áttér-ve kapjuk:

$$\lim_{\mathrm{d}s'\to 0} \frac{\sin(-\mathrm{d}\varphi)}{\mathrm{d}\varphi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}s'} = -\frac{\partial\varphi}{\partial s'} = \lim_{\mathrm{d}s'\to 0} \frac{\sin(\varphi + \mathrm{d}\varphi)}{r} = \frac{\sin\varphi}{r},$$

vagyis

$$\frac{\partial \varphi}{\partial s'} = -\frac{\sin \varphi}{r}.$$

A Q' ponthoz mutató sugár hossza

$$OQ' = r + dr = r \cos(-d\varphi) + ds' \cos(\varphi + d\varphi),$$

továbbá a Q' pontnál keletkező szög φ +d φ . Ennek alapján ds' \rightarrow 0 mellett

$$\frac{\partial r}{\partial s'} = \lim_{ds' \to 0} \left(r \frac{\cos(d\varphi) - 1}{d\varphi} \frac{d\varphi}{ds'} + \cos(\varphi + d\varphi) \right) = \cos \varphi \,.$$

Ha még (F1.3)-at is figyelembe vesszük, a

$$\frac{\partial r}{\partial s} = \sin\theta\cos\varphi$$
 és $\frac{\partial\varphi}{\partial s'} = -\sin\theta\frac{\sin\varphi}{r}$ (F1.4)

képletekre jutunk. A vonalmenti deriváltat így (F1.2) szerint a következő képlet adja:

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial\Phi}{\partial r} - \sin\theta\frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Phi}{\partial z}\cos\theta. \tag{F1.5a}$$

A transzportegyenletet gyakran $\mu = \cos \varphi$ függvényében szoktuk felírni. Ennek érdekében a φ szerinti deriváltat átírjuk μ szerinti deriváltra:

$$-\frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial\varphi} = -\frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial(\cos\varphi)}\frac{d\cos\varphi}{d\varphi} = \frac{1-\cos^2\varphi}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial(\cos\varphi)}$$

amivel

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \sin\theta \left(\cos\varphi \,\frac{\partial\Phi}{\partial r} + \frac{1-\cos^2\varphi}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial(\cos\varphi)}\right) + \frac{\partial\Phi}{\partial z}\cos\theta\,. \tag{F1.5b}$$

,

F1.2. Gömbgeometria

Gömbszimmetrikus rendszerek vizsgálatára a gömbi koordinátákat használjuk, ami azt jelenti, hogy a kiszemelt P pont (x, y, z) koordinátái helyett a gömbi *r* koordinátát használjuk:

$$r = OP$$

Az Ω vektort elég a θ szöggel megadni, amely Ω és az O \rightarrow P sugár által bezárt szög. Történjen az Ω vektor irányában ds elmozdulás. Ha a rajz síkját az Ω vektor és a Phez vezető sugár által kifeszített síknak választjuk, az *F1.2. ábrá*n mutatott rajzot kapjuk, ha rajta ds'-t ds-sel azonosítjuk. Ennek alapján az F1.1. fejezetben követett gondolatmenettel a

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \cos\theta \frac{\partial\Phi}{\partial r} + \frac{1 - \cos^2\theta}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial(\cos\theta)}$$
(F1.6)

232

eredményt kapjuk. Itt figyelembe kellett vennünk, hogy az előző fejezetben φ -vel jelöltük azt a szöget, amelyet most θ -val jelölünk. (F1.6) úgy alkalmazható a transzportegyenletben, hogy a szögfüggő fluxust $\Phi(r,E,\mu)$ alakban írjuk fel, ahol $\mu = \cos \theta$.

F1.3. A kifolyási tag konzervatív alakja

Az (F1.5) és (F1.6) képleteket gyakran más alakban használjuk. Először a gömbgeometriához tartozó (F1.6) egyenletet alakítjuk át. Ebben az egyenletben a θ szerinti derivált amiatt lép fel, mert a neutronpályának a neutron pillanatnyi helyéhez húzott sugárral bezárt θ szöge a pálya mentén változik. Ennek a tagnak nincs világos jelentése abban az értelemben, hogy nem értelmezhető mint a neutronmérleghez való bármilyen hozzájárulás.

Ezért a fenti képletet célszerű az ún. *konzervatív alak*ra átírni, ami azt jelenti, hogy integráláskor a képlet fizikailag értelmezhető tagjai világos hozzájárulást adnak a neutronmérleghez. Az egyszerűség kedvéért bevezetjük a $\mu = \cos\theta$ jelölést. Gömbgeometriában ez az alak a következő:

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial \left[r^2 \Phi(r,\mu)\right]}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \left[\left(1-\mu^2\right) \Phi(r,\mu)\right]}{\partial \mu}.$$
(F1.7)

A deriváltak kifejtésével egyszerűen ellenőrizhetjük, hogy ez az előbbi alakkal ekvivalens. Az alábbiakban megmutatjuk, ez miért jobb (F1.6)-nál.

Tekintsük az r_1 és r_2 sugarak közötti gömbhéjat. A megfelelő gömbfelületek rendre $A_1 = 4\pi r_1^2$ és $A_2 = 4\pi r_2^2$, a gömbhéj térfogata $V = 4\pi (r_2^3 - r_1^3)/3$. (F1.7)-et beszorozzuk $4\pi r^2$ -tel, majd integráljuk erre a gömbhéjra és a 4π térszögre – felhasználva, hogy most d Ω = $2\pi d\mu$:

$$2\pi \int_{r_1}^{r_2} 4\pi r^2 dr \int_{-1}^{1} \frac{d\Phi}{ds} d\mu = 2\pi A_2 \int_{-1}^{1} \mu \Phi(r_2, \mu) d\mu - 2\pi A_1 \int_{-1}^{1} \mu \Phi(r_1, \mu) d\mu.$$

A μ szerinti deriváltat tartalmazó tagban a μ szerinti integrál eltűnik, hiszen $\mu = \pm 1$ -re $1-\mu^2 = 0$. A jobb oldalon levő tagokban pedig világosan felismerhetők a radiális áramok:

$$J_i = 2\pi \int_{-1}^{1} \mu \Phi(r_i, \mu) d\mu$$
, (*i* = 1 és 2).

Ezzel tehát a kifolyási tag integrálja így írható: $A_2J_2 - A_1J_1$, ami könnyen értelmezhető: a gömbhéjból kifolyó és oda befolyó neutronok számának a különbsége, ami a neutronmérlegben világosan értelmezhető mennyiség.

Nem lesz ilyen világos a kép, amikor a (F1.6) egyenletet integráljuk. $4\pi r^2$ -tel való beszorzás és parciális integrálás után a következőt kapjuk:

$$\int_{r_1}^{r_2} 4\pi r^2 \mu \frac{\partial \Phi(r,\mu)}{\partial r} \mathrm{d}r = \mu \left(A_2 \Phi(r_2,\mu) - A_1 \Phi(r_1,\mu) \right) - \int_{r_1}^{r_2} 8\pi r \mu \Phi(r,\mu) \mathrm{d}r.$$

Az itt kapott második tag és (F1.6) második tagjának az integrálja együtt kiad valamit, aminek a fizikai értelme nem világos. Ezért vezet világosabban értelmezhető eredményre, ha az S_N módszerben az (F1.7) alakból indulunk ki. Hengergeometriában a kívánatos alak a következő:

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s} = \frac{\Omega_{\mathrm{r}}}{r} \frac{\partial(r\Phi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\Omega_{\varphi}\Phi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Omega_{\mathrm{z}}, \qquad (F1.8)$$

ahol

$$\Omega_{\rm r} = \sin\theta\cos\varphi, \qquad \Omega_{\varphi} = \sin\theta\sin\varphi, \qquad \Omega_{\rm z} = \cos\theta.$$

Egyszerűen beláthatjuk, hogy ez konzervatív alak. A *z* szerinti deriváltat tartalmazó tag ilyen, tehát elég a másik kettővel foglalkozni. Ha ezeket beszorozzuk $2\pi r$ -rel, majd *r* szerint integrálunk az (r_1 , r_2) intervallumban, Ω szerint pedig a teljes térszögben, a következőt kapjuk:

$$\int_{4\pi} \mathrm{d}\Omega \int_{r_1}^{r_2} 2\pi r \left(\frac{\Omega_r}{r} \frac{\partial (r\Phi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial (\Omega_{\varphi}\Phi)}{\partial \varphi} \right) \mathrm{d}r = 2\pi r_2 J_2 - 2\pi r_1 J_1,$$

ahol

$$J_i(z) = \int_{4\pi} \Omega_r \, \mathcal{O}(r_i, z, \mathbf{\Omega}) \mathrm{d}\mathbf{\Omega} \,, \qquad (i = 1 \text{ és } 2)$$

a radiális áram. A φ szerinti derivált integrálja eltűnik, mivel $\Omega_{\varphi} \Phi \varphi$ -nek periodikus függvénye (2π periódussal). A gömbgeometriánál mondottak értelmében legutóbbi eredményünknek is megvan a neutronmérlegben értelmezhető jelentése: megadja az (r_1, r_2) intervallumhoz tartozó hengergyűrűből kifolyó és oda befolyó neutronok számának a különbségét.

2. FÜGGELÉK. GAUSS-KVADRATÚRA

A Gauss-kvadratúra az

$$\int_{a}^{b} \rho(x) f(x) \mathrm{d}x$$

alakú integrálok numerikus számítására szolgáló hatékony módszer, ahol f(x) az integrálandó függvény, $\rho(x)$ pedig adott súlyfüggvény. Az utóbbi azonosan 1, ha $\rho(x)f(x)$ -et tekintjük integrálandó függvénynek. Ennél pontosabb eredményt lehet kapni, ha nem ezt tesszük, hanem az adott súlyfüggvényre szabott módszert alkalmazzuk, ami azt jelenti, hogy a numerikus módszert a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó ortogonális polinomokra alapozzuk. Ebben a függelékben összegezzük a leggyakrabban szükséges tudnivalókat a módszer három változatára vonatkozóan. Mindegyik esetben az integrálási tartomány a [-1, 1] intervallum. Ha az [a, b] intervallum ettől eltér, az integrál egyszerű helyettesítéssel átvihető a [-1, 1] intervallumra vonatkozó integrálba.

F2.1. Gauss–Legendre-kvadratúra

A $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó ortogonális polinomok a Legendre-polinomok. A segítségükkel kapott Gauss-kvadratúra az alapeset. Annak érdekében, hogy az erre vonatkozóan kapott eredményeink a későbbi fejezetekbe is átvihető legyenek, képleteinkben – formálisan – szerepeltetjük a $\rho(x)$ súlyfüggvényt. Jelöljük μ_k -val a $P_{L+1}(\mu)$ Legendre-polinom gyökhelyeit. A Gauss-kvadratúra abban áll, hogy a [-1, 1] intervallumra vonatkozó integrálokat az alábbi módon közelítjük:

$$\int_{-1}^{1} \rho(\mu) f(\mu) \, \mathrm{d}\mu \approx \sum_{k} w_{k} f(\mu_{k}).$$
(F2.1)

A w_k együtthatókat úgy határozzuk meg, hogy ez a közelítés egzakt legyen, ha $f(\mu)$ legfeljebb *L*-edfokú polinom. Legyen

$$u_{k}(\mu) = \frac{P_{L+1}(\mu)}{(\mu - \mu_{k})P_{L+1}'(\mu_{k})}$$

Nyilvánvaló, hogy ezekre a polinomokra fennáll (k, j = 1, 2, ..., L+1):

$$u_k(\mu_j) = \delta_{kj}$$

/ \)

Egy *L*-edfokú polinomot meghatározza, ha *L*+1 helyen megadjuk az értékét, tehát egy ilyen $F_L(\mu)$ polinom mindig előállítható az

$$F_L(\mu) = \sum_k u_k(\mu) F_L(\mu_k)$$

alakban. (Általános $F_L(\mu)$ függvények esetében ez a Lagrange-féle interpoláció.) Így tehát integrálja egzaktul kiszámítható az (F2.1) képlettel, ha

$$w_{k} = \int_{-1}^{1} \rho(\mu) u_{k}(\mu) \, \mathrm{d}\mu \,. \tag{F2.2}$$

Az F2.1 táblázatban megadjuk a Gauss-kvadratúra alkalmazásához szükséges mennyiségeket L = 1, 3 és 5 esetében.

L	k	$W_k = W_{-k}$	$\mu_k = \mu_{-k}$
1	1	1,0000	0,57735
3	1	0,65214	0,33998
	2	0,34786	0,86114
5	1	0,46792	0,23861
	2	0,36076	0,66121
	3	0,17132	0,93247

F2.1. táblázat. A Gauss-Legendre-kvadratúra állandói

Befejezésül megmutatjuk, hogy az (F2.1) képlet nemcsak legfeljebb *L*-edfokú polinomokra, hanem még egy (2*L*+1)-edfokú polinomra vonatkozóan is egzakt. Legyen ez a legfeljebb (2*L*+1)-edfokú polinom $F(\mu)$. Ha elosztjuk $P_{L+1}(\mu)$ -vel, mind a maradék, mind a hányados legfeljebb *L*-edfokú. A hányadost tehát elő lehet állítani az első *L* Legendre-polinom lineáris kombinációjaként:

$$F(\mu) = P_{L+1}(\mu) \sum_{j=0}^{L} a_j P_j(\mu) + F_L(\mu),$$

ahol $F_L(\mu)$ ismét egy legfeljebb *L*-edfokú polinom. A Legendre-polinomok ortogonalitása miatt ennek az integrálja megegyezik a maradék integráljával:

$$\int_{-1}^{1} \rho(\mu) F(\mu) \, \mathrm{d}\mu = \int_{-1}^{1} \rho(\mu) F_{L}(\mu) \, \mathrm{d}\mu$$

 $F_L(\mu)$ -re viszont az (F2.1) integrálformula egzakt, hiszen legfeljebb *L*-edfokú polinom:

$$\int_{-1}^{1} \rho(\mu) F_L(\mu) \, \mathrm{d}\mu = \sum_k w_k F_L(\mu_k) = \sum_k w_k F(\mu_k).$$

Az utóbbi egyenlőség amiatt érvényes, hogy $\mu = \mu_k$ -ra $P_{L+1}(\mu)$ definíció szerint eltűnik. A fentiek szerint ez az integrál megegyezik $F(\mu)$ integráljával, amivel állításunkat igazoltuk.

F2.2. Gauss–Csebisev-kvadratúra

Amikor egy $f(\varphi)$ függvényt a $[0, \pi]$ intervallumban kell integrálni, alkalmazható a Gauss-kvadratúrának a Csebisev-polinomok szerinti változata. Mivel a koszinusz függvény ebben az intervallumban szigorúan monoton, az integrálandó függvényt tekinthetjük $\cos\varphi$ függvényének is. Ha az integrálban elvégezzük a $\mu = \cos\varphi$ helyettesítést, a következőt kapjuk:

$$\int_{0}^{\pi} f(\varphi) d\varphi = \int_{-1}^{1} h(\mu) \frac{d\mu}{\sqrt{1 - \mu^{2}}}, \qquad h(\mu) = f(\arccos \mu).$$
(F2.3)

Itt tehát a súlyfüggvény: $\rho(\mu) = (1 - \mu^2)^{-1/2}$. Az ehhez tartozó ortogonális polinomok a Csebisev-polinomok, amelyek definíció szerint a következők:

$$T_n(\cos\varphi) = \cos(n\varphi). \tag{F2.4a}$$

Kielégítik a következő ortogonalitási relációkat:

$$\int_{-1}^{1} T_{n}(\mu) T_{n'}(\mu) \frac{d\mu}{\sqrt{1-\mu^{2}}} = \begin{cases} 0, & \text{ha } n \neq n', \\ \pi, & \text{ha } n = n' = 0, \\ \pi/2, & \text{ha } n = n' \neq 0. \end{cases}$$
(F2.4b)

A Gauss-Csebisev-kvadratúra analóg az (F2.1) képlettel:

$$\int_{-1}^{1} h(\mu) \frac{d\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} \cong \sum_{k=1}^{n} w_k h(\mu_k),$$
 (F2.5a)

ahol w_k alkalmas súlyfaktor és μ_k a $T_n(\mu)$ polinom k-adik gyöke:

$$\mu_k = \cos \varphi_k, \quad \text{ahol} \quad \varphi_k = \frac{2k-1}{2n}\pi, \quad (F2.5b)$$

amint az (F2.4a) definícióból egyszerűen megkaphatjuk.

Ha a w_k súlyfaktorokat – (F2.2) értelmében – a

$$w_{k} = \int_{-1}^{1} u_{k}(\mu) \frac{\mathrm{d}\mu}{\sqrt{1-\mu^{2}}}$$
(F2.6)

képlet szerint választjuk meg, akkor az (F2.5a) képlet egzakt, ha az integrálandó függvény legfeljebb *n*-edfokú polinom. Az F2.1. fejezetben követett gondolatmenettel beláthatjuk, hogy ebből és a polinomok ortogonalitásából következik: a Gauss–Csebisev-kvadratúra egészen a (2n-1)-edfokú polinomokig egzakt.

Az integrálási súlyok (F2.6) szerinti kiszámítása meglehetősen körülményes dolog, ezért kerülő utat fogunk követni: megmutatjuk, hogy a

$$w_k \equiv \frac{\pi}{n} \tag{F2.7}$$

súlyok jelentik a megfelelő választást. Ehhez elég bebizonyítani, hogy ezekkel a súlyokkal az (F2.5a) képlet egzakt, ha az integrálandó függvény legfeljebb *n*-edfokú polinom. Egy ilyen függvény pontosan előállítható a

$$h(\mu) = \sum_{j=1}^n a_j T_j(\mu)$$

sor alakjában. (F2.4b) alapján ennek az integrálja:

$$\int_{-1}^{1} h(\mu) \frac{\mathrm{d}\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} = \pi a_0$$

(F2.5a) egzakt voltának a belátásához tehát azt kell igazolnunk, minden $j \ge 1$ -re fennáll:

$$\sum_{k=1}^{n} T_{j}(\mu_{k}) = \sum_{k=1}^{n} \cos(j\varphi_{k}) = \sum_{k=1}^{n} \frac{e^{ij\varphi_{k}} + e^{-ij\varphi_{k}}}{2} = 0.$$

Az itt álló exponenciálisok összege egyszerű mértani sor, amelynek az értéke könynyen kiszámítható:

$$\sum_{k=1}^{n} T_{j}(\mu_{k}) = \frac{\sin j\pi}{2\sin \frac{j\pi}{2n}}$$

A számláló minden pozitív egész *j*-re eltűnik, de a nevező *j* minden szóba jövő értékére ($j \le n$) pozitív. Ezzel tehát beláttuk, hogy

$$\frac{\pi}{n} \sum_{k=1}^{n} h(\mu_k) = \pi a_0 = \int_{-1}^{1} h(\mu) \frac{\mathrm{d}\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}$$

A kapott eredményt érdemes visszaírni a φ szerinti integrálra is:

$$\int_{0}^{\pi} f(\varphi) \mathrm{d}\varphi \cong \frac{\pi}{n} \sum_{k=1}^{n} f(\varphi_{k}).$$
(F2.8)

Vegyük észre, hogy ez az integrálnak egyszerű téglányösszeggel való közelítése, amelyet akár azonnal felírhattunk volna. Fenti gondolatmenetünk ehhez azt a fontos dolgot teszi hozzá, hogy ez egzakt formula, amíg a $h(\mu) = f(\arccos \mu)$ függvény legfeljebb (2*n*-1)-edfokú polinom.

F2.3. Gauss–Jacobi-kvadratúra

A gyűrűs hengergeometriához tartozó ütközési valószínűségek számításához (vö. 5.3.2. rész) szükség van

$$\int_{0}^{1} xf(x) \mathrm{d}x$$

alakú integrálok kiszámítására. Ez úgy oldható meg Gauss-kvadratúrával, hogy keresünk az itt szereplő $\rho(x) = x$ súlyfüggvényre vonatkozóan ortogonális polinomokat:

$$\int_{0}^{1} x p_n(x) p_k(x) dx = 0 , \qquad \text{ha} \qquad n \neq k.$$

Ebben az integrálban az alábbi egyszerű helyettesítést alkalmazzuk:

$$\int_{0}^{1} x p_{n}(x) p_{k}(x) dx = \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} (1+x) p_{n}\left(\frac{1+x}{2}\right) p_{k}\left(\frac{1+x}{2}\right) dx.$$
 (F2.9)

Megmutatjuk, hogy az itt szereplő függvények visszavezethetők a Jacobi-polinomokra. Ezért először ez utóbbiakra vonatkozó tételeket foglaljuk össze.

A Jacobi-polinomok a $\rho(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$ súlyfüggvényhez ($\alpha, \beta > -1$) tartozó ortogonális polinomok, amelyek a

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^n}{dx^n} \Big[(1-x)^{\alpha+n} (1+x)^{\beta+n} \Big]$$
(F2.10)

képlettel állíthatók elő (n = 0, 1, 2, ...). Az (F2.9) alatti integrálban a súlyfüggvény: $\rho(x) = (1+x)$, tehát a kiszámítandó integrálnak az $\alpha = 0$, $\beta = 1$ választás felel meg. Ilyen paraméterek mellett a Jacobi-polinomok a következő rekurziós képlettel állíthatók elő:

$$(n+2)(2n+1)P_{n+1}^{(0,1)}(x) = [(2n+1)(2n+3)x-1]P_n^{(0,1)}(x) - n(2n+3)P_{n-1}^{(0,1)}(x),$$

és normálásuk a következő:

$$\int_{-1}^{1} (1+x) \left[P_n^{(0,1)}(x) \right]^2 dx = \frac{2}{n+1}.$$

(F2.9)-ből látható, hogy az eredeti integrál számára keresett polinomok:

$$p_n(x) = P_n^{(0,1)}(2x-1),$$

amelyek a fentiek alapján a

$$(n+2)(2n+1)p_{n+1}(x) = \left[2(2n+1)(2n+3)x - 4(n+1)^2\right]p_n(x) - n(2n+3)p_{n-1}(x)$$
(F2.11)

rekurzióval állíthatók elő, és normájukat a

$$\int_{0}^{1} x [p_n(x)]^2 dx = \frac{1}{2(n+1)}$$

képlet adja.

Példák az első néhány polinomra:

$$p_0(x) \equiv 1, \qquad p_1(x) = 3x - 2, \qquad p_2(x) = 10x^2 - 12x + 3,$$

$$p_3(x) = 35x^3 - 60x^2 + 30x - 4,$$

$$p_4(x) = 126x^4 - 280x^3 + 210x^2 - 60x + 5,$$

$$p_5(x) = 462x^5 - 1260x^4 + 1260x^3 - 560x^2 + 105x - 6.$$

Zérushelyeik és az (F2.2) képlet szerint számított súlyok az F2.2. táblázatban találhatók. Az ott megadott mennyiségek felhasználásával a következő képlet adja a keresett integrált:

$$\int_{0}^{1} xf(x) \mathrm{d}x \cong \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k).$$

A súlyokat és az x_k számokat a táblázat *n*-hez tartozó soraiból kell venni. Befejezésül megjegyezzük, hogy nem az (F2.11) rekurziós képlet az egyenlet mód a Jacobi-polinomok kiszámítására, mivel érvényes a következő explicit képlet:

$$p_n(x) = \sum_{\ell=0}^n \binom{n}{\ell} \binom{n+1}{n-\ell} (x-1)^{n-\ell} x^{\ell} .$$
 (F.2.12)

Ha ezt *x* hatványai szerint rendezzük, a következő eredményt kapjuk:

$$p_n(x) = (-1)^n \sum_{\ell=0}^n a_\ell(-x)^\ell$$
,

ahol

$$a_{\ell} = \sum_{k=0}^{\ell} \binom{n}{\ell-k} \binom{n+1}{\ell+1-k} \binom{n+\ell-k}{k}.$$

п	k	w_k	x_k
1	1	0,5	0,66667
2	1	0,18196	0,35505
	2	0,31804	0,84495
3	1	0,069827	0,21234
	2	0,229241	0,59053
	3	0,200932	0,91141
4	1	0,031181	0,13976
	2	0,129848	0,41641
	3	0,203465	0,72316
	4	0,135507	0,94290
5	1	0,015748	0,098054
	2	0,073909	0,30454
	3	0,146387	0,56203
	4	0,167175	0,80199
	5	0,096782	0,96019

F2.2. táblázat. A Gauss–Jacobi-kvadratúra állandói

3. FÜGGELÉK. A KI_N(X) BICKLEY-FÜGGVÉNYEK

A hengergeometriára vonatkozó integrális transzportelméletben alapvető szerepet játszanak a Bickley-függvények. Mivel használatuk nem általánosan elterjedt, ebben a függelékben röviden összefoglaljuk a rájuk vonatkozó legfontosabb tudnivalókat. A függvényeket először Bickley és Nayler vezette be.⁵³ Az n indexű Bickleyfüggvény definíciója:

$$\operatorname{Ki}_{n}(x) = \int_{0}^{\pi/2} e^{-x/\cos\theta} \cos^{n-1}\theta \, \mathrm{d}\theta = \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-x} \cosh u}{\cosh^{n} u} \, \mathrm{d}u \,. \tag{F3.1}$$

A Bickley-függvények *x* monoton csökkenő függvényei. Csökkenésük az $x \rightarrow \infty$ határesetben egyre inkább exponenciálissá válik. Az $x \rightarrow 0$ határesetben az *n*-edik deriváltnak logaritmikus szingularitása van. Az n = 0 indexű Bickley-függvény a módosított Bessel-függvénnyel egyenlő:

$$Ki_0(x) = K_0(x).$$
 (F3.2)

A definícióból könnyen levezethetők a következő rekurziós összefüggések:

$$n \operatorname{Ki}_{n+1}(x) = (n-1) \operatorname{Ki}_{n-1}(x) + x [\operatorname{Ki}_{n-2}(x) - \operatorname{Ki}_n(x)], \quad (F3.3a)$$

$$\frac{\mathrm{d}\operatorname{Ki}_{n}(x)}{\mathrm{d}x} = -\operatorname{Ki}_{n-1}(x), \qquad \frac{\mathrm{d}^{n}\operatorname{Ki}_{n}(x)}{\mathrm{d}x^{n}} = (-1)^{n}\operatorname{Ki}_{0}(x), \qquad (F3.3b)$$

$$\operatorname{Ki}_{n}(x) = \operatorname{Ki}_{n}(0) - \int_{0}^{x} \operatorname{Ki}_{n-1}(t) dt = \int_{x}^{\infty} \operatorname{Ki}_{n-1}(t) dt.$$
(F3.3c)

Idézett munkájukban Bickley és Nayler megmutatják, hogy (F3.3a) meglehetősen stabil rekurziót tesz lehetővé a magasabb indexű Bickley-függvények kiszámítására.

A függvényeknek az x = 0 helyen felvett értékei a következők (vö. (F3.3c)):

$$\operatorname{Ki}_{n}(0) = \int_{0}^{\infty} \operatorname{Ki}_{n-1}(t) dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\left(\frac{n}{2} - 1\right)!}{\left(\frac{n-1}{2}\right)!},$$
(F3.4a)

aminek speciális értékei:

$$Ki_0(0) = \infty$$
, $Ki_1(0) = \frac{\pi}{2}$, $Ki_2(0) = 1$,

⁵³ W.G. Bickley & J. Nayler, A Short Table of the Functions $Ki_n(x)$ from n = 1 to n = 16, Philisophical Magazine, 20, 343–347 (1935).

$$\operatorname{Ki}_{3}(0) = \frac{\pi}{4}, \qquad \operatorname{Ki}_{4}(0) = \frac{2}{3}, \qquad \operatorname{Ki}_{5}(0) = \frac{3\pi}{16}.$$
 (F3.4b)

Aszimptotika nagy *x*-ekre:

$$\operatorname{Ki}_{n}(0) = \frac{\sqrt{\pi/2}}{e^{x}\sqrt{x}} \left(1 - \frac{4n+1}{8x} + O\left(\frac{1}{x^{2}}\right) \right).$$
(F3.5)

Véges *x*-ekre a Bickley-függvények hatványsorba fejthetők, és kiszámításukra ezek alapján készíthetünk szubrutinokat. A hatványsor felírásától eltekintünk.

4. FÜGGELÉK. A GÖMBFÜGGVÉNYEKRE VONATKOZÓ RE-**KURZIÓS KÉPLETEK**

A P_L közelítésben alapvető szerepet játszanak a gömbfüggvényekre vonatkozó (41.5) és (43.3) rekurziós képletek, amelyekhez hasonlók számos matematikai kézikönyvben (Rizsik-Gradstein, Jahnke-Emde, Mikolás) szerepelnek, de éppen ezek ritkán találhatók meg – legalábbis is itt idézett alakjukban. A reaktorfizikai kézikönyvek gyakran hivatkoznak rájuk, de nem ritkán hibásan. Célszerűnek tartjuk ezért az alábbiakban megadni a képletek levezetését.

A gömbfüggvények a következő alakban írhatók fel:

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = e^{im\varphi} (-\sin\theta)^m Q_{\ell m}(\cos\theta), \qquad (F4.1a)$$

ahol

$$Q_{\ell m}(x) = \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \frac{1}{\ell! 2^{\ell}} \frac{d^{\ell + m} (x^2 - 1)^{\ell}}{dx^{\ell + m}}.$$
 (F4.1b)

m = 0-ra ez nem más, mint a $P_{\ell}(x)$ Legendre-polinom. Ha az itt szereplő ℓ -edik hatványt a binomiális tétel segítségével kifejtjük, majd a deriválást tagonként elvégezzük, az eredmény a következő (ℓ -*m*)-edfokú polinom:

$$Q_{\ell m}(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k (-1)^k x^{\ell - m - 2k} = a_0 x^{\ell - m} - \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} (-1)^k x^{\ell - 2 - m - 2k}, \quad (F4.2a)$$
abol:

anoi.

$$n = \left[\frac{\ell - m}{2}\right] \tag{F4.2b}$$

és

$$a_{k} = \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \frac{1}{\ell! 2^{\ell}} {\ell \choose k} \frac{(2\ell-2k)!}{(\ell-m-2k)!}.$$
 (F4.2c)

Itt [z] az egész rész, vagyis a z-nél nagyobb egész számok közül legnagyobb. Ez azt jelenti, hogy

$$\ell - m = 2n$$
 vagy $\ell - m = 2n + 1.$ (F4.2d)

Az alábbiakban ezt a két esetet kell majd szétválasztanunk. (F4.2a)-ból látszik, hogy a $Q_{im}(x)$ polinom vagy csak páros vagy csak páratlan kitevőjű tagokat tartalmaz. A rekurziós képleteket legegyszerűbb tételek formájában kimondani.

1. tétel. Bármely pozitív egész ℓ -re és $0 \le m \le \ell$ -re fennáll:

$$(2\ell+1)\cos\theta Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \sqrt{(\ell+1)^2 - m^2}Y_{\ell+1,m}(\theta,\varphi) + \sqrt{\ell^2 - m^2}Y_{\ell-1,m}(\theta,\varphi).$$

Bizonyítás. Nyilván elég megmutatni, hogy:

$$(2\ell+1)xQ_{\ell m}(x) = \sqrt{(\ell+1)^2 - m^2}Q_{\ell+1,m}(x) + \sqrt{\ell^2 - m^2}Q_{\ell-1,m}(x).$$
(F4.3)

Az $xQ_{\ell m}(x)$ polinomról leválasztjuk a legmagasabb fokú hatványt:

$$xQ_{\ell m}(x) = a_0 x^{\ell+1-m} - \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} (-1)^k x^{\ell-1-m-2k} .$$
 (F4.4a)

Innen hiányzik x 0-adik hatványa. (F4.2a) alapján felírhatjuk a $Q_{\ell^{-1},m}(x)$ és $Q_{\ell^{+1},m}(x)$ polinomokat is:

$$Q_{\ell-1,m}(x) = \sum_{k=0}^{n} b_k (-1)^k x^{\ell-1-m-2k} , \qquad (F4.4b)$$

$$Q_{\ell+1,m}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} c_k (-1)^k x^{\ell+1-m-2k} =$$

$$= c_0 x^{\ell+1-m} - \sum_{k=0}^{n} c_{k+1} (-1)^k x^{\ell-1-m-2k} , \qquad (F4.4c)$$

ahol

$$b_{k} = \sqrt{\frac{(\ell - 1 - m)!}{(\ell - 1 + m)!}} \frac{1}{(\ell - 1)!2^{\ell - 1}} {\ell - 1 \choose k} \frac{(2\ell - 2 - 2k)!}{(\ell - 1 - m - 2k)!}, \qquad k < n,$$
(F4.5a)

$$c_{k} = \sqrt{\frac{(\ell+1-m)!}{(\ell+1+m)!}} \frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}} {\ell+1 \choose k} \frac{(2\ell+2-2k)!}{(\ell+1-m-2k)!}, \quad k < n+1.$$
(F4.5b)

Az (F4.4.b) és (F4.4.c) polinomok utolsó tagjánál szét kell választani az (F4.2d) alatti eseteket. Az utolsó tag indexe (F4.2b) szerint rendre $k = [(\ell-1-m)/2]$ és $[(\ell+1-m)/2]$. A szétválasztandó esetekben ezek értéke:

Amikor
$$\ell - m = 2n$$
:

$$[(\ell - 1 - m)/2] = n - 1$$
, illetve $[(\ell + 1 - m)/2] = n$

Tehát (F4.4b)-ben és (F4.4c)-ben csak úgy maradhat meg az utolsó tag k = n, illetve k = n+1 indexe, ha ekkor $b_n = 0$, illetve $c_{n+1} = 0$.

Amikor
$$\ell - m = 2n + 1$$
:

$$[(\ell - 1 - m)/2] = n$$
, illetve $[(\ell + 1 - m)/2] = n + 1$.

Tehát (F4.4b)-ben és (F4.4c)-ben az utolsó tag nem tűnik el, nevezetesen:

$$b_n = \sqrt{\frac{(\ell - 1 - m)!}{(\ell - 1 + m)!}} \frac{1}{(\ell - 1)! 2^{\ell - 1}} {\ell - 1 \choose n} (\ell - 1 + m)!, \qquad (F4.5c)$$

$$c_{n+1} = \sqrt{\frac{(\ell+1-m)!}{(\ell+1+m)!}} \frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}} {\ell+1 \choose n+1} (\ell+1+m)!.$$
(F4.5d)

Az (F4.3) összefüggésnek a polinomok azonos kitevőjű tagjaira külön-külön fenn kell állnia. Három típusú tagot kell megvizsgálnunk:

- állandó tag,
- legmagasabb, $(\ell+1-m)$ -edfokú tag,
- többi tagok.

Az $xQ_{\ell m}(x)$ polinomnak nincs állandó tagja, tehát a másik két polinom megfelelő tagjának egymást ki kell ejtenie, ha a rekurziós képlet fennáll. Amikor a b_n és c_{n+1} együtthatók eltűnnek, ez triviális. A másik esetben azt kell belátnunk (vö. (F4.4.b) és (F4.4c)), hogy:

$$\sqrt{(\ell+1)^2 - m^2} c_{n+1} (-1)^{n+1} + \sqrt{\ell^2 - m^2} b_n (-1)^n = 0.$$

(F4.5c) és (F4.5d) alapján ez – némi számolással – belátható. A legmagasabb fokú tag esetében azt kell belátnunk, hogy:

$$(2\ell+1)a_0 = \sqrt{(\ell+1)^2 - m^2}c_0$$
,

hiszen $Q_{\ell-1,m}(x)$ -ben x legmagasabb kitevője (ℓ -1–m). (F4.2c)-ből és (F4.5b)-ből kapjuk az itt szereplő együtthatókat:

$$a_{0} = \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \frac{1}{\ell ! 2^{\ell}} \frac{(2\ell)!}{(\ell - m)!}$$

és

$$c_0 = \sqrt{\frac{(\ell+1-m)!}{(\ell+1+m)!}} \frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}} \frac{(2\ell+2)!}{(\ell+1-m)!},$$

amelyek kielégítik a fenti azonosságot. Marad még annak belátása, hogy a "többi tag" szintén kielégíti a rekurziós képletet. Egyszerűen ellenőrizhetők az alábbi összefüggések:

$$\sqrt{\left(\ell+1\right)^2 - m^2} c_{k+1} = \left(\ell+1 - m\right) \left(\frac{\ell+m}{\ell-1 - m - 2k} + 1\right) a_{k+1},$$
$$\sqrt{\ell^2 - m^2} b_k = \left(\ell+m\right) \left(\frac{\ell+1 - m}{\ell-1 - m - 2k} - 1\right) a_{k+1},$$

vagyis:

$$-\sqrt{\left(\ell+1\right)^2 - m^2}c_{k+1} + \sqrt{\ell^2 - m^2}b_k = -(2\ell+1)a_{k+1},$$

ami az (F4.4) képletek szerint az (F4.3) rekurziós képlet igazolását jelenti. <u>Következmény</u>. Mivel

$$Y_{\ell,-m}(\mathbf{\Omega}) = (-1)^m Y_{\ell m}^*(\mathbf{\Omega}), \qquad (F4.6)$$

a most bebizonyított tétel negatív *m*-re is fennáll, amíg $-\ell \le m$.

2. tétel. Bármely pozitív egész *l*-re érvényes a

$$(2\ell+1)xP_{\ell}(x) = (\ell+1)P_{\ell+1}(x) + \ell P_{\ell-1}(x)$$

rekurziós képlet.

<u>Bizonyítás</u>. Mivel $P_{\ell}(x) = Q_{\ell 0}(x)$, a tétel m = 0 helyettesítéssel következik (F4.3)-ból. **3. tétel**. Bármely pozitív egész ℓ -re $0 \le m \le \ell$ mellett fennáll:

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{i\varphi}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) =$$

= $-\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}Y_{\ell+1,m+1}(\theta,\varphi) + \sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}Y_{\ell-1,m+1}(\theta,\varphi).$

Bizonyítás. (F4.1a) szerint elég a Q polinomokra bizonyítani a következő rekurziót:

$$(2\ell+1)Q_{\ell m} = \sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}Q_{\ell+1,m+1} - \sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}Q_{\ell-1,m+1}.$$
(F4.7)

(F4.2a) alapján:

$$Q_{\ell+1,m+1}(x) = \sum_{k=0}^{n} d_k (-1)^k x^{\ell-m-2k} = d_0 x^{\ell-m} - \sum_{k=0}^{n-1} d_{k+1} (-1)^k x^{\ell-2-m-2k}$$
(F4.8a)

és

$$Q_{\ell-1,m+1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} e_k (-1)^k x^{\ell-2-m-2k} , \qquad (F4.8b)$$

ahol:

$$d_{k} = \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+2+m)!}} \frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}} {\ell+1 \choose k} \frac{(2\ell+2-2k)!}{(\ell-m-2k)!}$$
(F4.8c)

és

$$e_{k} = \sqrt{\frac{(\ell-2-m)!}{(\ell+m)!}} \frac{1}{(\ell-1)!2^{\ell-1}} {\ell-1 \choose k} \frac{(2\ell-2-2k)!}{(\ell-2-m-2k)!}.$$
 (F4.8d)

(F4.7) jobb oldalának $Q_{\ell-1,m+1}(x)$ ($\ell-2-m$)-edfokú polinom, a képletben szereplő másik két polinom fokszáma pedig azonosan ($\ell-m$). Ezért volt célszerű (F4.8a)-ban a legmagasabb fokú tagot leválasztani. Ezekre vonatkozóan (F4.7) azt állítja, hogy:

$$(2\ell+1)a_0 = \sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}d_0$$

Valóban (vö. (F4.2c) és (F4.8c)):

$$\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}d_0 = \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}}\frac{(2\ell+2)!}{(\ell-m)!} = (2\ell+1)a_0$$

Ez az összefüggés ℓ és *m* minden megengedett értékére fennáll. Amikor $\ell = m$, és $\ell = m-1$, a $Q_{\ell-1,m+1}(x)$ polinom nem jelenik meg (F4.7) jobb oldalán. Ilyenkor a másik két polinom állandó, tehát az imént beláttuk (F4.7) érvényességét *m* e két értékére. Legyen a továbbiakban $m \leq \ell-2$. Ekkor minden $k \leq n-1$ -re be kell látnunk, hogy:

$$-(2\ell+1)a_{k+1} = -\sqrt{(\ell+m+2)(\ell+m+1)}d_{k+1} - \sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1)}e_k.$$

Ha az itt szereplő együtthatókat (F4.2)-ből és (F4.8)-ból behelyettesítjük, rövid számolás után kapjuk legutóbbi összefüggésünket.

4. tétel. Bármely pozitív egész ℓ -re $0 \le m \le \ell$ mellett fennáll:

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{-i\varphi}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) =$$

= $-\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}Y_{\ell-1,m-1}(\theta,\varphi) + \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}Y_{\ell+1,m-1}(\theta,\varphi).$

<u>Bizonyítás</u>. Először legyen *m* pozitív. (F4.1a) szerint elég a *Q* polinomokra bizonyítani a következő rekurziót:

$$(2\ell+1)(1-x^2)Q_{\ell m} = \sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}Q_{\ell-1,m-1} - \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}Q_{\ell+1,m-1}.$$
(F4.9a)

Az m = 0 esetet külön kell vizsgálnunk, hiszen ekkor m-1 negatív, vagyis nem érvényes az (F4.1a) képlet. (F4.6) alapján viszont azt kapjuk, hogy ekkor a tétel a következőt állítja:

$$(2\ell+1)Q_{\ell 0} = -\sqrt{\ell(\ell-1)}Q_{\ell-1,1} + \sqrt{(\ell+2)(\ell+1)}Q_{\ell+1,1}.$$
 (F4.9b)

(F4.2a) alapján:

$$Q_{\ell+1,m-1}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} f_k (-1)^k x^{\ell+2-m-2k} = f_0 x^{\ell+2-m} - \sum_{k=0}^n f_{k+1} (-1)^k x^{\ell-m-2k}$$
(F4.10a)

és

$$Q_{\ell-1,m-1}(x) = \sum_{k=0}^{n} g_k (-1)^k x^{\ell-m-2k} , \qquad (F4.10b)$$

ahol:

$$f_{k} = \sqrt{\frac{(\ell+2-m)!}{(\ell+m)!}} \frac{1}{(\ell+1)!2^{\ell+1}} {\ell+1 \choose k} \frac{(2\ell+2-2k)!}{(\ell+2-m-2k)!}$$
(F4.10c)

és

$$g_{k} = \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell-2+m)!}} \frac{1}{(\ell-1)!2^{\ell-1}} {\ell-1 \choose k} \frac{(2\ell-2-2k)!}{(\ell-m-2k)!}.$$
 (F4.10d)

Végül:

$$(1-x^{2})Q_{\ell m}(x) = -a_{0}x^{\ell+2-m} + a_{n}(-1)^{n}x^{\ell-m-2n} + \sum_{k=0}^{n-1}(a_{k}+a_{k+1})(-1)^{k}x^{\ell-m-2k},$$
(F4.11)

(F4.9a) fennálláshoz a következő azonosságoknak kell fennállniuk. $0 \le k \le n-1$ mellett:

$$(2\ell+1)(a_k+a_{k+1}) = \sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}g_k + \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}f_{k+1},$$

továbbá:

$$(2\ell+1)a_0 = \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}f_0,$$

(2\ell+1)a_n = \sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}g_n + \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}f_{n+1}.

Behelyettesítéssel meggyőződhetünk az első két azonosság fennállásáról. (Útmutatás az elsőre vonatkozóan: ha mindkét oldalt a_{k+1} -gyel osztjuk, egyszerűen kezelhető képletekre jutunk.) Az utolsó azonosság esetében meg kell különböztetni az (F4.2d) alatti eseteket. Páratlan (ℓ -*m*) esetén mindegyik együttható eltűnik. A másik esetben:

$$a_{n} = \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \frac{1}{\ell ! 2^{\ell}} {\ell \choose n} (\ell + m)!,$$

$$g_{n} = \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell - 2 + m)!}} \frac{1}{(\ell - 1)! 2^{\ell - 1}} {\ell \choose n} (\ell - 2 + m)!,$$

$$f_{n+1} = \sqrt{\frac{(\ell + 2 - m)!}{(\ell + m)!}} \frac{1}{(\ell + 1)! 2^{\ell + 1}} {\ell \choose n + 1} (\ell + m)!.$$

Ezek behelyettesítésével egyszerűen kapjuk a harmadik azonosságot is. Végeredményben beláttuk (F4.9a) fennállását. Hátravan még (F4.9b) bizonyítása. Ezt az Olvasóra bízzuk, mert a fenti módszerrel egyszerűen elvégezhető.

<u>Következmény</u>. A 3. és 4. tétel érvényes negatív *m*-re is, amíg $-\ell \le m$. Helyettesítsünk ugyanis a 3. tételben *m* helyére -m-et:

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{i\varphi}Y_{\ell,-m}(\theta,\varphi) = = -\sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}Y_{\ell+1,-m+1}(\theta,\varphi) + \sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}Y_{\ell-1,-m+1}(\theta,\varphi) .$$

(F4.6) alapján ez így írható:

$$(2\ell+1)\sin\theta e^{i\varphi}Y_{\ell m}^{*}(\theta,\varphi) = = \sqrt{(\ell-m+2)(\ell-m+1)}Y_{\ell+1,m-1}^{*}(\theta,\varphi) - \sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1)}Y_{\ell-1,m-1}^{*}(\theta,\varphi)$$

Ha mindkét oldal komplex konjugáltját vesszük, a 4. tételt kapjuk. Hasonlóan láthatjuk be, hogy a 4. tétel is érvényes negatív *m*-re.

5. tétel. Bármely pozitív egész *l*-re érvényes a

$$(1-x^2)\frac{dP_{\ell}(x)}{dx} = \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1}(P_{\ell-1}(x) - P_{\ell+1}(x))$$

rekurziós képlet.

<u>Bizonyítás</u>. A tétel az (F4.9a) rekurziós képlet egyenes következménye. A 2. tétel bizonyításánál láttuk, hogy $P_{\ell}(x) = Q_{\ell 0}(x)$. (F4.1b)-ből következik:

$$\frac{\mathrm{d}P_{\ell}(x)}{\mathrm{d}x} = \sqrt{\ell(\ell+1)}Q_{\ell 1}(x).$$

(F4.9a)-ban m = 1-et helyettesítünk:

$$(2\ell+1)(1-x^2)Q_{\ell 1} = \sqrt{\ell(\ell+1)}Q_{\ell-1,0} - \sqrt{\ell(\ell+1)}Q_{\ell+1,0}$$

Ebből – előbbi képletünk figyelembevételével – adódik a tétel.

TARTALOMJEGYZÉK

1. HATÁSKERESZTMETSZETEK	3
1.1. Evaluált hatáskeresztmetszetek	3
1.2. Rugalmas szórási magfüggvények a lassulási tartományban	4
1.2.1. Általános megjegyzések.	4
1.2.2. Átszámítás a TKR- és az LR-beli szögeloszlások között	8
1.2.3. A rugalmas szórási magfüggvény sorfejtése	12
1.2.4. Áttérés letargiára	15
1.2.5. TKR-ben lineárisan anizotrop szórás	16
1.2.6. Lassulás hidrogénen (A = 1).	18
1.3. Rugalmatlan szóródási magfüggyény	21
2. ASZIMPTOTIKUS LASSULÁSI KÓDOK	22
2.1. Konzisztens P ₁ és B ₁ közelítés	22
2.1.1. Definíciók	23
2.1.2. P ₁ és B ₁ közelítés	25
P ₁ közelítés	25
B ₁ közelítés	26
A +iB és –iB esetek összevetése	27
2.1.3. A P ₁ és B ₁ egyenletek megoldása	28
2.1.4. Diffúzióállandó a P ₁ és B ₁ közelítés szerint	30
2.2. Lassulási modellek	31
2.2.1. A Greuling-Goertzel egyenletek	32
2.2.2. Egyéb lassulási modellek	36
(1) Fermi-modell	36
(2) Wigner-modell	36
(3) Greuling-Goertzel modell	36
A (22.5) alakú modellek általános jellemzői	36
2.3. Áttérés a sokcsoport-közelítésre	40
2.3.1. A sokcsoport-modellhez tartozó mennyiségek	42
2.3.2. A sokcsoport-egyenletek és megoldásuk	44
2.3.3. Az aktív zóna és a reflektor kezelése	47
2.3.4. Rezonanciaabszorpció és -hasadás	49
Rezonanciaintegrálok	49
A sokcsoport-egyenletek módosítása	51
A fiktív fluxus számítása	52
2.3.5. Rezonanciaintegrálok korrekciói	53
2.3.6. Áttérés az általános szórási mátrixra	56
2.4. Kevéscsoport-állandók számítása	58
2.4.1. Csoportállandók kondenzálása	58
2.4.2. Spektrális jellemzők számítása	59
2.4.3. Szórási mátrix és removal (kiszórási) hatáskeresztmetszet	60
2.5. Kitekintés más lassulási programokra	64
3. KEVÉSCSOPORT DIFFÚZIÓELMÉLET	65
3.1. A kevéscsoport diffúzióegyenlet	65
3.2. A véges differenciák különböző geometriákban	66
3.2.1. Egy dimenzió (1D)	67
3.2.2. Két dimenzió (2D)	68
X–Y geometria	68
R–Z geometria	69
R– Θ geometria	71
2D gömbgeometriák	73
Összegzés az 5-pontos 2D sémákra	76
Hatszöges geometria	77
Pálcakódok	80
Összegzés a hatszöges 2D geometriára és a pálcakódokra	83
3.2.3. Három dimenzió (3D)	83

v akuum-natarreneter.	07
Zérus fluxusderivált határfeltételek	87
Periodikus határfeltétel	88
Szektorszimmetria	89
Tükrözéses szektorszimmetria	91
Eltolási szimmetria	92
A határfeltételek összegzése	93
Határfeltételek pálcakódok esetében	94
Szabályozórudak kezelése	97
3.2.5. A végesdifferencia-egyenletek és határfeltételek pontossága	101
Megfontolások 1D síkgeometriában	101
1D gömbi és hengeres geometriák	105
Megfontolások a 2D geometriákra vonatkozóan	105
3.3. A végesdifferencia-egyenletek megoldása iterációval	107
3.3.1. Az egyenletrendszer felírása	107
3.3.2. Belső iteráció	109
3.3.3. Külső iteráció	111
3.4. A belső iteráció gyorsítása	115
3.4.1. Gauss-Seidel iteráció	
3.4.2. Közvetlen mátrixinverzió egy dimenzióban	
3 4 3 Sorról sorra való iteráció két dimenzióban	119
3 4 4 A sorról sorra való iteráció analízise	121
3.4.5. Iteráció síkról síkra három dimenzióhan	124
3 4 6. Szukcesszív túlrelaválás	125
3.4.7 Durvahálós kiegvenlítés	128
3.5. A z időfüggő diffúzióegyenlet megoldása	133
3.5.1. Véges differenciák az idő szerint	133
3.5.1. Veges untereneia az idő szerint	135
3.5.2. Konvergenera 3.5.3. Az időbeli sajátártákek becsláse	138
3.5.7. A káső neutronok figyelembevétele	1/0
A D VÖZEL ÍTÉS	140
4. Γ_L NOLELITES	140
4.1. A gomonuggveniyek szerini valo sorrejtes	1/10
4.2. F _L egyennetek tobb unnenzioban	1/10
4.2.1. P _L egyemetek az analanos esetben	140
4.2.2. P _L egyenletek nengergeometriaban	152
4.3. P _L egyenietek egy dimenzioban (1D geometriaban)	134
4.3.1. P _L egyenletek 1D sikgeometriaban	154
4.3.2. P _L egyenletek gombgeometriaban	155
4.3.3. P _L egyenletek 1D hengergeometriaban	156
4.3.4. P_1 egyenletek ID geometriakban	158
4.3.5. I ranszverzalis aram a P_1 közelítésben	160
4.4. A Milne-problèma megoldàsa P_L közelítésben	163
4.5. Véges differenciák a P _L közelítésben	168
4.5.1. Véges differenciák egy dimenzióban	168
4.5.2. Attérés a sokcsoport közelítésre	172
4.5.3. A végesdífferencia-egyenletek megoldása	173
4.5.4. A határfeltételek figyelembevétele	175
5. S _N MODSZER	179
5.1. Az S_N módszer egyes geometriákban	181
5.1.1. Négyszögletes geometria	181
5.1.2. Gömbgeometria	181
5.1.3. Hengergeometria	183
5.2. A szegmensek megválasztása	184
5.2.1. Szegmensek az általános esetben	185
5.2.2. Szegmensek két dimenzióban	189
5.2.3. Egydimenziós geometriák	189
5.2.4. Speciális sémák	190
5.3. Térbeli diszkretizálás	190

5.3.1. Példa a diszkretizálásra: R–Z geometria	191
5.3.2. Térbeli diszkretizálás az általános esetben	192
5.3.3. A feles indexű fluxusok közelítése	194
5.4. Az iteráció	195
5.4.1. A belső iteráció	195
5.4.2. A külső iteráció	198
6. ÜTKÖZÉSI VALÓSZÍNŰSÉGEK MÓDSZERE	205
6.1. A transzport magfüggvény	206
6.2. Ütközési valószínűségek	
6.3. Ütközési valószínűségek számítása hengergeometriában	
6.3.1. Általános hengergeometria	
6.3.2. Gyűrűs hengergeometria	
6.3.3. A THERMOS program	
6.3.4. A neutronforrás számítása	
6.4. Az ütközési valószínűségek alkalmazása	
6.4.1. Cella fekete környezetben	
6.4.2. Feketeség és kiszökési valószínűség	
6.4.3. Részben reflektált cella kívülről belépő árammal	220
7. A KIÉGÉS	
7.1. Az uránlánc	225
7.2. A lineáris láncokra vonatkozó egyenletek megoldása	
1. FÜGGELÉK. A TRANSZPORTEGYENLET KÜLÖNBÖZŐ GEOMETRIÁKBAN	
F1.1. Hengergeometria	
F1.2. Gömbgeometria	
F1.3. A kifolyási tag konzervatív alakja	
2. FÜGGELÉK. GAUSS-KVADRATÚŘA	
F2.1. Gauss–Legendre-kvadratúra	
F2.2. Gauss–Csebisev-kvadratúra	
F2.3. Gauss–Jacobi-kvadratúra	
3. FÜGGELÉK. A KI _N (X) BICKLEY-FÜGGVÉNYEK	
4. FÜGGELÉK. A GÖMBFÜGGVÉNYEKRE VONATKOZÓ REKURZIÓS KÉPLETEK	