

mgr inż. Michał Podowski

Instytut Techniki Ciepłej

METODA RÓŻNICOWA ROZWIĄZYWANIA UKŁADU RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH CZĄSTKOWYCH TYPU RÓWNAŃ DYFUZJI NEUTRONÓW

1. Sformułowanie zadania

Metodę wyboru schematu różnicowego, aproksymującego układ równań różniczkowych zwyczajnych i dającego najlepsze oszacowanie błędu [1], można rozszerzyć na przypadek równań cząstkowych. Z uwagi na zastosowanie w teorii reaktorów, w niniejszej pracy rozważane będzie zagadnienie różniczkowe postaci:

$$\frac{\partial u(\bar{r}, t)}{\partial t} = A(t)u(\bar{r}, t) + E \nabla^2 u(\bar{r}, t), \quad (\bar{r}, t) \in D, \quad (1.1)$$

$$\bar{D} = \left\{ (\bar{r}, t) : t \in \langle t_0, T \rangle, \bar{r} \in \bar{\Omega} \right\}$$

z warunkami granicznymi:

$$1) u(\bar{r}, 0) = \varphi(\bar{r}), \quad (1.2)$$

$$2) u(\bar{r}, t)|_{\Gamma} = \psi(\Gamma, t) \quad (\Gamma - \text{brzeg obszaru } \Omega), \quad (1.3)$$

gdzie: $u(\bar{r}, t)$, $\varphi(\bar{r})$, $\psi(\Gamma, t)$ - wektory K -wymiarowe,

$A(t)$, E - macierze $[K \times K]$ -wymiarowe,

oraz aproksymujące je zagadnienie różnicowe:

$$\mathbf{v}_m^{n+1} = \left[\mathbf{I} + \tau(1 - \tau \gamma_n) \mathbf{B}_n \right] \mathbf{v}_m^n + \tau \mathbf{L}_n \mathbf{v}_m^n, \quad (\bar{r}_m, t_n) \in D_h, \quad (1.4)$$

$$\bar{D}_h = \left\{ (\bar{r}, t) : t = t_0 + n\tau \quad (n=0, 1, \dots, N = \frac{T-t_0}{\tau} - 1), \bar{r} \in \bar{\Omega}_h \right\},$$

z warunkami granicznymi

$$1) v_m^0 = \varphi_m, \quad (1.5)$$

$$2) v_m^n = \psi_m^n \quad \text{dla } \bar{r}_m \in \Gamma_h \quad (\Gamma_h - \text{brzeg obszaru } \Omega_h), \quad (1.6)$$

gdzie: $v_m^n = v(\bar{r}_m, t_n), \quad (1.7)$

$$B_n = B(t_n), \quad (1.8)$$

$$\varphi_m = \varphi(\bar{r}_m), \quad (1.9)$$

$$\psi_m^n = \psi(\bar{r}_m, t_n) \quad (\text{zakładając, że } \Gamma_h \subset \Gamma), \quad (1.10)$$

$$L_h u_m^n = L_h u^n(\bar{r}_m) = \sum_{\bar{\rho} \in N(\bar{r}_m)} a^n(\bar{r}_m, \bar{\rho}) u^n(\bar{\rho}), \quad (1.11)$$

$N(\bar{r})$ - otoczenie siatkowe p-tu \bar{r} .

Zadanie polega na takim doborze ciągu liczb rzeczywistych $\{\tau_n\}$ oraz ciągu macierzy $\{B_n\}$ ($n=0, 1, \dots, N$), aby wartość normy (euklidesowej) błędów aproksymacji była możliwie najmniejsza.

2. Oszacowanie błędów metody różnicowej

Ponieważ

$$u^{n+1}(\bar{r}) = u^n(\bar{r}) + \tau \frac{\partial u^n(\bar{r})}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 u^n(\bar{r})}{\partial t^2} + O(\tau^3), \quad (2.1)$$

gdzie, zgodnie z (1.1):

$$\frac{\partial u^n(\bar{r})}{\partial t} = A_n u^n(\bar{r}) + E \nabla^2 u^n(\bar{r}) \quad (A_n = A(t_n)), \quad (2.2)$$

oraz

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u^n(\bar{r})}{\partial t^2} &= \frac{dA_n}{dt} u^n(\bar{r}) + A_n \frac{\partial u^n(\bar{r})}{\partial t} + E \nabla^2 \frac{\partial u^n(\bar{r})}{\partial t} = \left(\frac{dA_n}{dt} + A_n^2 \right) u^n(\bar{r}) + \\ &+ (A_n E + E A_n) \nabla^2 u^n(\bar{r}) + E^2 \nabla^2 (\nabla^2 u^n(\bar{r})) + O(\tau^3), \quad (2.3) \end{aligned}$$

więc podstawiając:

$$A_n = A_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2} \frac{dA_n}{dt} + O(\tau^2), \text{ gdzie } A_{n+\frac{1}{2}} = A \left[t_0 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \tau \right] \quad (2.4)$$

$$A_n^2 = A_{n+\frac{1}{2}}^2 + O(\tau), \quad (2.5)$$

otrzymano następujący schemat różnicowy, spełniony przez rozwiązanie zagadnienia (1.1) z warunkami (1.2) i (1.3):

$$\begin{aligned} u^{n+1}(\bar{r}) = & u^n(\bar{r}) + \tau A_{n+\frac{1}{2}} u^n(\bar{r}) + \tau E \nabla^2 u^n(\bar{r}) + \frac{\tau^2}{2} A_{n+\frac{1}{2}}^2 u^n(\bar{r}) + \\ & + \frac{\tau^2}{2} \left[\left(A_{n+\frac{1}{2}} E + E A_{n+\frac{1}{2}} \right) \nabla^2 u^n(\bar{r}) + E^2 \nabla^2 \left(\nabla^2 u^n(\bar{r}) \right) \right] + \\ & + O(\tau^3), \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$u^0(\bar{r}) = \varphi(\bar{r}) \quad \text{dla} \quad \bar{r} \in \Omega_n, \quad (2.7)$$

$$u^n(\bar{r}) = \psi^n(\bar{r}) \quad \text{dla} \quad \bar{r} \in \Gamma_h. \quad (2.8)$$

Zastąpienie operatora różniczkowego $\nabla^2 u^n(\bar{r})$ operatorem różnicowym (określonym w węzłach siatki) postaci

$$L_h u_m^n = E \nabla^2 u_m^n + O(h^4) = E \nabla^2 u_m^n + O(\tau^2), \quad (2.9)$$

gdzie $\tau = \sigma h^2$ a L_h jest operatorem typu (1.11) oraz podstawienie $B_n = A_{n+\frac{1}{2}}$, (2.10)

powodują przekształcenie (2.6) do postaci

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} = & (I + \tau B_n) u_m^n + \tau L_h u_m^n + \frac{\tau^2}{2} B_n^2 u_m^n + \frac{\tau^2}{2} \left[(B_n E + E B_n) \nabla^2 u_m^n + \right. \\ & \left. + E^2 \nabla^2 (\nabla^2 u_m^n) \right] + O(\tau^3). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Jak wynika z [1], rozwiązanie schematu (1.4) z warunkami (1.5) i (1.6) jest, przy podstawieniach (2.9) i (2.10), zbież-

ne do rozwiązania zagadnienia (2.6) z warunkami (2.7) i (2.8), natomiast błąd aproksymacji jest rozwiązaniem następującego zagadnienia różnicowego:

$$\begin{aligned} z_m^{n+1} &= u_m^{n+1} - v_m^{n+1} = \left[I + \tau(1 - \tau\gamma_n)B_n \right] z_m^n + \tau L_h z_m^n + \\ &+ \frac{\tau^2}{2} B_n (B_n + 2\gamma_n I) u_m^n + \frac{\tau^2}{2} \left[(B_n E + E B_n) \nabla^2 u_m^n + \right. \\ &\left. + E^2 \nabla^2 (\nabla^2 u_m^n) \right] + O(\tau^3), \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$z_m^0 = 0, \quad (2.13)$$

$$z_m^n = 0 \text{ dla } \bar{r}_m \in \Gamma_h. \quad (2.14)$$

Stosując podstawienie:

$$\bar{z}^n = \left\{ z_i^n \right\} \quad i \in \left\{ m: \bar{r}_m \in \Omega_h \right\}. \quad (2.15)$$

$$\varrho^n = \left\{ u_i^n \right\} \quad i \in \left\{ m: r_m \in \Omega_h \right\}, \quad (2.16)$$

można schemat (2.12) z warunkami (2.13) i (2.14) zapisać następująco

$$\begin{aligned} \bar{z}^{n+1} &= \left[I + \tau(1 - \tau\gamma_n^*)Q_n \right] \bar{z}^n + \tau P \bar{z}^n + \frac{\tau^2}{2} Q_n (Q_n + 2\gamma_n^* I) \varrho^n + \\ &+ \frac{\tau^2}{2} S_n \varrho^n + O(\tau^3), \quad (n=0, 1, \dots, N) \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\bar{z}^0 = 0, \quad (2.18)$$

$$\text{gdzie: } \|Q_n\| = \|B_n\|, \quad (2.19)$$

$$\|P \bar{z}^n\| \leq \sup_m \|L_h z_m^n\| \leq C_1(n), \quad (2.20)$$

$$\|S_n \varrho^n\| \leq C_2(n), \quad (2.21)$$

(C_1 i C_2 nie zależą od h).

Jak łatwo można wykazać [1], rozwiązanie schematu (2.17) z warunkiem (2.18) ma postać

$$\bar{z}^n = \frac{1}{2} \tau^2 \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} \left[I + \tau \sum_{k=i+1}^{n-1} (B_k + P) \right] \right\} (Q_i R_i \varrho^i + S_i \varrho^i) + O(\tau^2), \quad (2.22)$$

gdzie: $R_i = Q_i + 2\gamma_i^* I$, $(\|R_i\| = \|B_i + 2\gamma_i I\|)$. (2.23)

Oszacowanie błędu aproksymacji jest następujące

$$\begin{aligned} \|\bar{z}^n\| \leq & \frac{1}{2} \tau^2 \left[\sum_{i=0}^{n-1} \left\| I + \tau \sum_{k=i+1}^{n-1} B_k \right\| \|Q_i\| \|R_i\| \|\varrho^i\| \right] + \\ & + \frac{1}{2} \tau^2 \sum_{i=0}^{n-1} (n-i-1) (\|Q_i\| \|R_i\| + 1) C_1(i), \end{aligned} \quad (2.24)$$

gdych

$$\begin{aligned} \|PQ_i R_i \varrho^i\| &= \sup_m \|L_h [B_i (B_i + 2\gamma_i I) u_m^i]\| = \sup_m \|B_i (B_i + 2\gamma_i I) L_h u_m^i\| \leq \\ &\leq \|B_i\| \|B_i + 2\gamma_i I\| \sup_m \|L_h u_m^i\| \leq \|Q_i\| \cdot \|R_i\| \cdot C_1(i). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Z postaci wyrażenia (2.24) wynika, że podobnie jak w przypadku układu równań zwyczajnych, najlepsze oszacowanie błędu można uzyskać wówczas, gdy ciąg γ_n będzie spełniał warunek

$$\min_{\tau \in (-\infty, +\infty)} \|B_n + 2\gamma I\| = \|B_n + 2\gamma_n I\| \quad (n=0, 1, \dots, N). \quad (2.26)$$

Stosowanie schematu (1.4)-(1.6) z ciągiem γ_n określonym wzorem (2.26) jest oczywiście celowe jedynie w pewnych przypadkach. Rzeczywistą poprawę oszacowania błędu w porównaniu ze schematem, w którym $\gamma_n = 0$ ($n=0, \dots, N$) otrzymuje się wtedy, gdy spełniony jest jeden z poniższych warunków:

Warunek 1

Jeżeli wartości własne $\lambda_i(t)$ ($i=1, \dots, K$) macierzy $A(t)$ są dla każdego $t \in \langle t_0, T \rangle$ rzeczywiste i jednokrotne oraz spełniają nierówność

$$\frac{\min_i |\lambda_i(t)|}{\max_i |\lambda_i(t)|} < \varepsilon \quad (i=1, \dots, K), \quad (2.27)$$

gdzie ε - dowolna liczba dodatnia, znacznie mniejsza od jedności, to przyjmując

$$\gamma_n = -\frac{1}{4} \max_i \lambda_i \left(t_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.28)$$

otrzymuje się oszacowanie normy $\|B_n + 2\gamma_n I\|$ około dwa razy mniejsze niż normy $\|B_n\|$.

Warunek 2

Jeżeli wartości własne $\lambda_i(t)$ ($i=1, \dots, L$) każda o krotności s_i ($\sum_{i=1}^L s_i = K$) macierzy $A(t)$ spełniają dla każdego $t \in t_0, T$ następujące nierówności

1) istnieje $k=1, 2, \dots, L$ takie, że

$$|\operatorname{Re} \lambda_k(t)|^{-1} < \varepsilon \quad (2.29)$$

$$2) \left| \frac{\operatorname{Im} \lambda_i(t)}{\operatorname{Re} \lambda_k(t)} \right| < \varepsilon \quad (i=1, \dots, L), \quad (2.30)$$

$$3) \left| \frac{\operatorname{Re} \lambda_i(t)}{\operatorname{Re} \lambda_k(t)} \right| < \varepsilon \quad (i=1, \dots, L, i \neq k), \quad (2.31)$$

gdzie, podobnie jak poprzednio, ε oznacza liczbę dodatnią, znacznie mniejszą od jedności, to podstawienie

$$\gamma_n = -\frac{1}{4} \operatorname{Re} \lambda_k \left(t_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.32)$$

powoduje, że oszacowanie normy $\|B_n + 2\gamma_n I\|$ jest około dwa razy mniejsze, niż normy $\|B_n\|$.

3. Zastosowanie do rozwiązywania równań dyfuzji

Rozkład neutronów termicznych w reaktorze (z uwzględnieniem neutronów opóźnionych) można opisać następującym układem równań [2]:

$$\begin{aligned} 1_0 \frac{\partial \phi(\bar{r}, t)}{\partial t} &= L^2 \nabla^2 \phi(\bar{r}, t) + \left[(1-\beta)k e^{-B^2 \tau} - 1 \right] \phi(\bar{r}, t) + \\ &+ \frac{\rho e^{-B^2 \tau}}{\sum a} \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i(\bar{r}, t), \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial C_i(\bar{r}, t)}{\partial t} = \frac{k\beta_i}{\rho l_0 v} \phi(\bar{r}, t) - \lambda_i C_i(\bar{r}, t) \quad (i=1, 2, \dots, G), \quad (3.2)$$

gdzie: $\beta = \sum_{i=1}^G \beta_i,$

$\phi(\bar{r}, t)$ - strumień neutronów termicznych,

$C_i(\bar{r}, t)$ - koncentracja prekursorów i -tej grupy neutronów opóźnionych.

Układ ten jest szczególnym przypadkiem układu (1.1), podanego w [3].

Uwzględniając, że:

$$\sum_a = \frac{1}{l_0 v}, \quad (3.3)$$

$$\phi(\bar{r}, t) = v n(\bar{r}, t), \quad (3.4)$$

gdzie: $n(\bar{r}, t)$ - gęstość neutronów termicznych,

$$k_{\text{eff}} = \frac{k e^{-B^2 \tau}}{1 + L^2 B^2}, \quad (3.5)$$

$$l = \frac{l_0}{1 + L^2 B^2}, \quad (3.6)$$

można układ (3.1) przekształcić do postaci:

$$\frac{\partial n(\bar{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{\Lambda} \frac{L^2}{1 + L^2 B^2} v^2 n(\bar{r}, t) + \left[\frac{\rho - \beta}{\Lambda} + \frac{1}{\Lambda} \frac{L^2 B^2}{1 + L^2 B^2} \right] n(\bar{r}, t) + p e^{-B^2 \tau} \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i(\bar{r}, t), \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial C_i(\bar{r}, t)}{\partial t} = \frac{e^{-B^2 \tau}}{p} \frac{\beta_i}{\Lambda} n(\bar{r}, t) - \lambda_i C_i(\bar{r}, t), \quad (3.8)$$

gdzie: $\Lambda = \frac{1}{k_{\text{eff}}}, \quad (3.9)$

$$\frac{k_{\text{eff}} - 1}{k_{\text{eff}}} = \rho. \quad (3.10)$$

Jeśli teraz oznaczyć:

$$n(\bar{r}, t) = x_0(\bar{r}, t) \quad (3.11)$$

$$C_i(\bar{r}, t) = x_i(\bar{r}, t) \quad (i=1, \dots, G),$$

$$x(\bar{r}, t) = \left\{ x_i(\bar{r}, t) \right\} \quad (i=0, \dots, G), \quad (3.12)$$

to można układ (3.7) - (3.8) przepisać w postaci

$$\frac{\partial x(\bar{r}, t)}{\partial t} = A(\rho)x(\bar{r}, t) + B \nabla^2 x(\bar{r}, t), \quad (3.13)$$

gdzie:

$$A(\rho) = \begin{bmatrix} \frac{\rho - \beta}{\Lambda} + \frac{1}{\Lambda} \frac{L^2 B^2}{1 + L^2 B^2} & pe^{-B^2 \tau} \lambda_1 & \dots & pe^{-B^2 \tau} \lambda_G \\ \frac{e^{B^2 \tau}}{p} \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{e^{B^2 \tau}}{p} \frac{\lambda_G}{\Lambda} & 0 & \dots & -\lambda_G \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Lambda} \frac{L^2}{1 + L^2 B^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Zakładając, że reaktywność jest jedynie funkcją czasu ($\rho = \rho(t)$) oraz przyjmując, że na granicy reaktora (mającego kształt prostopadłościanu, walca lub kuli) gęstość neutronów jest stale równa zero, natomiast w momencie początkowym ($t = t_0$) posiada pewien określony rozkład w całej objętości reaktora, otrzymuje się następujące różniczkowe zagadnienie graniczne:

$$\frac{\partial x(\bar{r}, t)}{\partial t} = A(t) x(\bar{r}, t) + B \nabla^2 x(\bar{r}, t), \quad (3.16)$$

$$x(\bar{r}, 0) = \varphi(\bar{r}), \quad (3.17)$$

$$x(\bar{r}, t)|_{\Gamma} = 0, \quad (3.18)$$

gdzie Γ - powierzchnia boczna reaktora.

Wartości własne macierzy $A(t)$ są (dla każdego t) rzeczywiste, jednokrotne i spełniają (ze względu na ω) następujące równanie [4]

$$\frac{1}{\Lambda} \left[\rho(t) - \beta + \frac{L^2 B^2}{1 + L^2 B^2} \right] - \omega + \sum_{i=1}^G \frac{\beta_i \lambda_i}{\omega + \lambda_i} = 0, \quad (3.19)$$

które można przepisać w postaci

$$\omega \Lambda + \sum_{i=1}^G \frac{\omega \beta_i}{\omega + \lambda_i} - \left[\rho(t) + \frac{L^2 B^2}{1 + L^2 B^2} \right] = 0. \quad (3.20)$$

Wiadomo również [2], że najmniejsza wartość własna $\omega_{\min}(t)$ spełnia dla każdego t nierówność

$$\omega_{\min}(t) < -\lambda_{\max} = -14s^{-1}, \quad (3.21)$$

gdzie $\lambda_{\max} = \max \lambda_i$ ($i=1, 2, \dots, G$), (3.22)

natomiast największa wartość własna $\omega_{\max}(t)$ spełnia, dla niewielkich wartości $\rho(t)$ (czyli dla k_{eff} bliskich jedności), nierówność następującą

$$|\omega_{\max}(t)| < 1. \quad (3.23)$$

Widoczne więc jest, że zastosowanie do aproksymacji zagadnienia (3.16) - (3.18) schematu (1.4) przy założeniu, że

$$\tau_n = \tau_0 = -\frac{1}{4} \omega_0(\min) \quad (n=0, 1, \dots, N), \quad (3.24)$$

gdzie $\omega_0(\min)$ jest najmniejszym pierwiastkiem równania

$$\omega \Lambda + \sum_{i=1}^G \frac{\omega \beta_i}{\omega + \lambda_i} - \frac{L^2 B^2}{1 + L^2 B^2} = 0, \quad (3.25)$$

powoduje istotną poprawę oszacowania błędu.

Bibliografia

1. Podowski M.: Metoda różnicowa rozwiązywania układu równań kinetyki reaktora. Biuletyn ITC nr 35/1, Warszawa 1972.

2. Glasstone S., Edlung M.C.: Podstawy teorii reaktorów jądrowych. PWN. Warszawa 1957.
3. Porsching T.A.: On the spectrum of a matrix, arising from a problem in reactor kinetics. SIAM J.Appl.Math. 1968, T. 16, nr. 2.
4. Ash M.: Nuclear reactor kinetics. McGraw-Hill Book Company. New York 1965.

РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ
СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИПА
УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ НЕЙТРОНОВ

К р а т к о е с о д е р ж а н и е

Проведено анализ вопроса аппроксимации системы дифференциальных уравнений в частных производных типа уравнений диффузии с помощью системы разностных уравнений, с точки зрения возможности получения минимальной величины оценки погрешности (по Эвклидовой норме).

Указаны примеры, когда внедрение полученной схемы дает уменьшение оценки погрешности в сравнении с типовой двухслойной схемой или другими методами. Более подробно рассмотрена схема уравнений диффузии тепловых нейтронов в ядерном реакторе.

A FINITE DIFFERENCE SOLUTION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS
OF NEUTRON DIFFUSION

S u m m a r y

Partial differential equations of neutron diffusion type have been reduced to a set of finite difference equations and an error of approximation in the meaning of an Euclidean norm has been investigated.

The cases when the proposed method gives better estimation of error than other methods have been demonstrated.

A special attention has been paid to the equations of thermal neutron diffusion in a nuclear reactor.

Rękopis dostarczony w listopadzie 1971 r.