



Граничные условия к решению уравнения Больцмана в периодических решетках

Г. Я. Румянцев

Обобщается методический подход к решению уравнений переноса в гетерогенных периодических решетках, который в диффузионном приближении изложен в работе [1]. Выводятся граничные условия на контуре ячейки для точного решения односкоростного кинетического уравнения Больцмана, позволяющие рассматривать только одну ячейку гетерогенной среды. Кратко обсуждаются способы решения задачи с этими граничными условиями и вопрос о собственных числах.

Общее решение для всей гетерогенной среды в точной и макроскопической (усредненной) форме образуется из частных решений, найденных для одной ячейки, по тому же принципу, как и в работе [1].

Граничные условия, сформулированные для плоской одномерной решетки, могут быть распространены на двумерные решетки.

Введение

Описанный в работе [1] подход к решению уравнения диффузии в периодических решетках и вытекающие из него правила гомогенизации решеток являются достаточно общими. Однако использованное там ради простоты диффузионное приближение не всегда приводит к удовлетворительным результатам, что особенно проявляется при вычислении эффективных макроскопических коэффициентов диффузии для различных направлений. В этих задачах диффузионная теория не дает правильного предельного перехода к случаю гомогенной среды, следовательно, учет гетерогенности в диффузионном приближении может привести даже к большей ошибке, чем простая гомогенизация без учета микрораспределения нейтронов, если шаг решетки в сравнении со средней длиной свободного пробега невелик.

В настоящей статье методическая идея работы [1] развита применительно к точному (односкоростному) кинетическому уравнению Больцмана, и в результате найдены точные граничные условия, позволяющие (как и в диффузионном приближении) ограничиться решением уравнения только в пределах одной ячейки.

Благодаря общности граничных условий способы решения кинетического уравнения могут варьироваться произвольно, в зависимости от

требуемой точности и практического удобства. Частные решения, найденные для одной ячейки, используются для получения общего решения во всей среде и для вычисления характеристик гомогенизированной среды точно таким же образом, как и в работе [1].

Вывод граничных условий

Рассмотрим плоскую одномерную решетку с шагом $2a$. Пусть x — координата, отсчитываемая от центра какой-либо ячейки в направлении, перпендикулярном слоям решетки, Ω — орт направления скорости нейтрона. Будем искать граничные условия для односкоростного кинетического уравнения

$$\Omega_x \frac{\partial}{\partial x} F(x, \Omega_x) + \Sigma(x) F(x, \Omega_x) - \Sigma_s(x) \int_{4\pi} F(x, \Omega'_x) W(\mu_0) d\Omega' = 0, \quad (1)$$

которые позволили бы ограничиться рассмотрением одной ячейки среды.

Нетрудно убедиться, что если $F(x, \Omega_x)$ — решение уравнения, то $F(-x, -\Omega_x)$ и $F(x + 2na, \Omega_x)$, где n — целое число, тоже являются решениями (напомним, что $\mu_0 = \Omega_x \Omega'_x + \Omega_y \Omega'_y + \Omega_z \Omega'_z$). На основе этого можно искать решение в каждой ячейке номера k в кусочном пред-

ставлений*:

$$F(x, \Omega_x) \equiv F(x_k + \xi, \Omega_x) = A_k F_s(\xi, \Omega_x) + B_k F_{as}(\xi, \Omega_x). \quad (2)$$

Функции F_s и F_{as} — частные решения со следующими свойствами симметрии:

$$\begin{aligned} F_s(-\xi, -\Omega_x) &= F_s(\xi, \Omega_x), \\ F_{as}(-\xi, -\Omega_x) &= -F_{as}(\xi, \Omega_x). \end{aligned} \quad (3)$$

Теперь необходимо записать условия непрерывности потока нейтронов на границе двух соседних ячеек номеров k и $k+1$. Более удобной оказывается запись условий непрерывности для функций $F(x, \Omega_x) + F(x, -\Omega_x)$ и $F(x, \Omega_x) - F(x, -\Omega_x)$ в пределах $0 \leq \Omega_x \leq 1$, что эквивалентно условию непрерывности функции $F(x, \Omega_x)$ в пределах $-1 \leq \Omega_x \leq 1$.

С учетом выражения (2) и свойств (3) запишем эти условия для точки $\xi = a$:

$$\left. \begin{aligned} A_k [F_s(\Omega_x) + F_s(-\Omega_x)] + B_k [F_{as}(\Omega_x) + F_{as}(-\Omega_x)] &= A_{k+1} [F_s(-\Omega_x) + F_s(\Omega_x)] - B_{k+1} [F_{as}(-\Omega_x) + F_{as}(\Omega_x)], \\ A_k [F_s(\Omega_x) - F_s(-\Omega_x)] + B_k [F_{as}(\Omega_x) - F_{as}(-\Omega_x)] &= A_{k+1} [F_s(-\Omega_x) - F_s(\Omega_x)] - B_{k+1} [F_{as}(-\Omega_x) - F_{as}(\Omega_x)]. \end{aligned} \right\} (4)$$

Сравнивая условия (4) с условиями, записанными в работе [1] в диффузионном приближении, легко усмотреть аналогию между ними, если функции $F_s(\Omega_x) + F_s(-\Omega_x)$, $F_{as}(\Omega_x) + F_{as}(-\Omega_x)$, $F_s(\Omega_x) - F_s(-\Omega_x)$ и $F_{as}(\Omega_x) - F_{as}(-\Omega_x)$ противопоставить соответственно функциям Φ_s , Φ_{as} , Φ'_s и Φ'_{as} . Таким образом, результаты работы [1] справедливы и в данной задаче. Они заключаются в следующем.

Уравнения непрерывности удовлетворяются для любого k , если положить $A_k = C(x_k)$ и $B_k = aC'(x_k)$, где $C(x)$ — решение уравнения

$$\frac{d^2}{dx^2} C(x) + \kappa^2 C(x) = 0, \quad (5)$$

и одновременно выполнить следующие граничные условия при $\xi = a$:

$$\begin{aligned} F_{as}(\Omega_x) + F_{as}(-\Omega_x) &= \frac{\text{tg } \kappa a}{\kappa a} [F_s(\Omega_x) + F_s(-\Omega_x)], \\ F_s(\Omega_x) - F_s(-\Omega_x) &= -\kappa a \text{tg } \kappa a [F_{as}(\Omega_x) - F_{as}(-\Omega_x)]. \end{aligned} \quad (6)$$

* Обозначения и терминология здесь те же, что и в работе [1].

Условия (6) могут быть выполнены только при определенных значениях κ , т. е. для одно-родной задачи этот параметр является собственным. Заменяя решение F_{as} на F_{as}^* , отличающееся от первого нормировкой

$$F_{as}^*(\xi, \Omega_x) = \frac{\kappa a}{\text{tg } \kappa a} F_{as}(\xi, \Omega_x), \quad (7)$$

запишем граничные условия (6) в виде

$$\begin{aligned} F_{as}^*(\Omega_x) + F_{as}^*(-\Omega_x) &= F_s(\Omega_x) + F_s(-\Omega_x), \\ F_s(\Omega_x) - F_s(-\Omega_x) &= \lambda [F_{as}^*(\Omega_x) - F_{as}^*(-\Omega_x)], \end{aligned} \quad (8)$$

где $\lambda = -\text{tg}^2 \kappa a$.

Очевидно, при решении системы уравнений (8) в качестве собственных чисел можно найти значения величины λ , а затем перейти к значениям κ .

Собственные числа задачи и вид общего решения

Практически кинетическое уравнение всегда решается каким-нибудь приближенным способом. При этом условия (8) должны удовлетворяться в том же приближении, в котором получены функции F_s и F_{as} . Рассмотрим наиболее употребительные способы решения кинетического уравнения.

Метод сферических гармоник. В P_N -приближении метода сферических гармоник [2–4] уравнения (8) должны быть предварительно умножены на Ω_x , а затем решены приближенно с помощью сферических моментов порядка вплоть до N включительно на отрезке $-1 \leq \Omega_x \leq 1$ (необходимость умножения на Ω_x показана в работе [5]).

Очевидно, для первого условия (8), умноженного на Ω_x , нетривиальны только нечетные моменты, а для второго, наоборот, — только четные. В результате каждая пара моментов от функций $\Omega_x F_s$ и $\Omega_x F_{as}$ должна удовлетворять только одному условию в зависимости от четности. Совершенно так же, как это сделано в работе [5], можно доказать, что система условий (8) в P_N -приближении будет состоять из N уравнений при четном N и из $N+1$ — при нечетном N . Из них половина будет содержать параметр λ . Следовательно, определитель системы является относительно λ полиномом степени $\frac{N}{2}$ или $\frac{N+1}{2}$, в зависимости от четности N , т. е. количество собственных чисел будет таким же, как для однородной среды.

Набором собственных параметров κ , (знак их не имеет значения) определяется набор част-

ных решений $F_s^{(j)}(\xi, \Omega_x)$, $F_{as}^{(j)}(\xi, \Omega_x)$ и соответствующих им функций $C_j(x)$. Разумеется, каждое из частных решений в P_N -приближении представляет собой сумму сферических гармоник порядка от 0 до N включительно, при этом нулевая гармоника — скалярный поток нейтронов — в решениях $F_s^{(j)}$ четна, а в решениях $F_{as}^{(j)}$ нечетна относительно ξ .

Методы дискретных направлений. В некоторых численных методах, таких, например, как S_N -метод Карлсона [2, 3], метод Вика-Чандрасекара [3, 4] и др., функция распределения вычисляется только при нескольких дискретных значениях Ω_x . В этом случае условия (8) должны записываться тоже только для этих значений Ω_x . Очевидно, требуется, чтобы разбиение отрезка $-1 \leq \Omega_x \leq 1$ было симметричным, т. е. каждой точке Ω_{x_l} должна соответствовать точка $-\Omega_{x_l}$. Если l принимает N значений, то условия (8) являются системой $2N$ уравнений.

При решении кинетического уравнения можно задавать только распределение падающих на среду нейтронов — в данном случае набор значений $F_s(a, -\Omega_{x_l}) = m_l$ и $F_{as}(a, -\Omega_{x_l}) = n_l$. В центральной плоскости ячейки имеют место следующие условия отражения:

$$\begin{aligned} F_s(0, \Omega_x) &= F_s(0, -\Omega_x), \\ F_{as}(0, \Omega_x) &= -F_{as}(0, -\Omega_x). \end{aligned} \quad (9)$$

Распределение вылетающих из ячейки нейтронов, т. е. набор величин $F_s(a, \Omega_{x_l})$ и $F_{as}(a, \Omega_{x_l})$ выражается линейно через совокупность величин m_l и n_l . Таким образом, в условиях (8) будут фигурировать $2N$ неизвестных — столько же, сколько уравнений. Определитель системы уравнений относительно λ будет полиномом степени N и, следовательно, количество собственных значений λ тоже равно N . Каждому значению λ соответствует свой набор величин m_{l_j} и n_{l_j} , свое значение κ_j и свой вид функции $C_j(x)$.

Среди всех собственных чисел κ_j особо важным является наименьшее по модулю κ_1 , соответствующее асимптотическому решению. Есть основания полагать, что это единственное число, при котором все значения m_{l_1} и n_{l_1} положительны.

Вероятно, при отыскании κ_1 можно применить итерационную методику, основанную на том, что в практике почти всегда $|\kappa_1| a \ll 1$. Разумеется, рассмотренные схемы не исчерпывают всех возможных способов решения кинетического уравнения в данной задаче.

Основываясь на аналогии гомогенизированной среды с истинно гомогенной средой, можно ожидать, что кроме асимптотического числа κ_1 , которое может быть мнимым или действительным, все прочие числа κ_j должны быть мнимыми и по модулю гораздо большими κ_1 . Для определения этих чисел условия в форме (8) не вполне удобны, так как соответствующие λ будут мало отличаться от единицы. Устранить это неудобство можно следующим образом.

Пусть $\kappa = i\varepsilon$,

$$f(\xi, \Omega_x) = F_s(\xi, \Omega_x) + \varepsilon a F_{as}(\xi, \Omega_x).$$

Тогда условия (6) можно привести к виду

$$\begin{aligned} f(-a, \Omega_x) &= e^{-2\varepsilon a f}(a, \Omega_x), \\ -1 &\leq \Omega_x \leq 1. \end{aligned} \quad (10)$$

В такой форме граничные условия представляют собой обобщение условий, использованных в работах [6, 7].

Четное и нечетное решения образуются из решения $f(\xi, \Omega_x)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} F_s(\xi, \Omega_x) &= \frac{1}{2} [f(\xi, \Omega_x) + f(-\xi, -\Omega_x)], \\ F_{as}(\xi, \Omega_x) &= \frac{1}{2\varepsilon a} [f(\xi, \Omega_x) - f(-\xi, -\Omega_x)]. \end{aligned} \quad (11)$$

Определив полный набор собственных чисел и решений, общее решение для всей гетерогенной среды можно записать в такой форме:

$$\begin{aligned} F(x, \Omega_x) &= \sum_j [C_j(x_{\kappa_j}) F_s^{(j)}(\xi, \Omega_x) + \\ &+ a C'_j(x_{\kappa_j}) F_{as}^{(j)}(\xi, \Omega_x)], \end{aligned} \quad (12)$$

где $F_s^{(j)}$ и $F_{as}^{(j)}$ представляются в зависимости от метода суммой сферических гармоник, набором дискретных значений или другим способом. Каждая функция $C_j(x)$ содержит два произвольных коэффициента, значения которых определяются условиями на внешних границах среды, требованиями ограниченности симметрии и т. п., иначе говоря, макроскопическими свойствами решения.

Интеграл от выражения (12) по полному телесному углу представляет глобальный поток нейтронов как функцию координаты x :

$$\Phi(x) = \sum_j [C_j(x_{\kappa_j}) \Phi_s^{(j)}(\xi) + a C'_j(x_{\kappa_j}) \Phi_{as}^{(j)}(\xi)]. \quad (13)$$

Макроскопическая зависимость потока от координаты x имеет следующий вид:

$$\bar{\Phi}(x) = \sum_j \langle \Phi_s^{(j)} \rangle \frac{\kappa_j a}{\sin \kappa_j a} C_j(x), \quad (14)$$

где $\langle \Phi_s^{(j)} \rangle$ — среднее значение функции $\Phi_s^{(j)}(\xi)$ на отрезке $-a \leq \xi \leq a$.

Аналогично можно получить точные и макроскопические выражения для других сферических моментов функции распределения, из сравнения которых в принципе могут быть определены различные гомогенизированные характеристики среды, в том числе и такие, которые в элементарной диффузионной теории не фигурируют.

Обобщение результатов

До сих пор рассматривалась однородная задача, однако полученные основные соотношения справедливы и для задачи с источником при условии, что функция распределения источников в среде представлена в форме, аналогичной (12). Переход к неоднородной задаче описан в работе [1]. Использование точного кинетического уравнения никаких существенных особенностей в этом отношении не вносит. Можно указать еще раз, что в частных решениях неоднородного уравнения параметр κ является заданным. Система уравнений, к которой сводятся условия (8) или (10), будет неоднородной, следовательно, вопрос об отыскании собственных чисел здесь не возникает. Результаты работы легко применить к двумерным решеткам, если ячейки имеют вид прямоугольников.

Пусть шаг решетки в направлениях x и y равен соответственно $2a$ и $2b$. Можно искать решение с макроскопически разделяющимися переменными, т. е. в форме

$$F(x, y, \Omega_x, \Omega_y) = X(x_n)Y(y_m)F_{00} + aX'(x_n)Y(y_m)F_{10} + bX(x_n)Y'(y_m)F_{01} + abX'(x_n)Y'(y_m)F_{11}, \quad (15)$$

где x_n, y_m — координаты центра ячейки номера nm , а F_{00}, F_{10}, F_{01} и F_{11} — частные решения, обладающие следующими свойствами симметрии;

$$\begin{aligned} F_{00}(\xi, \eta, \Omega_x, \Omega_y) &= F_{00}(-\xi, \eta, -\Omega_x, \Omega_y) = \\ &= F_{00}(\xi, -\eta, \Omega_x, -\Omega_y), \\ F_{10}(\xi, \eta, \Omega_x, \Omega_y) &= -F_{10}(-\xi, \eta, -\Omega_x, \Omega_y) = \\ &= F_{10}(\xi, -\eta, \Omega_x, -\Omega_y), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} F_{01}(\xi, \eta, \Omega_x, \Omega_y) &= F_{01}(-\xi, \eta, -\Omega_x, \Omega_y) = \\ &= -F_{01}(\xi, -\eta, \Omega_x, -\Omega_y), \\ F_{11}(\xi, \eta, \Omega_x, \Omega_y) &= -F_{11}(-\xi, \eta, -\Omega_x, \Omega_y) = \\ &= -F_{11}(\xi, -\eta, \Omega_x, -\Omega_y). \end{aligned}$$

Здесь ξ, η — текущие координаты, отсчитываемые от центра рассматриваемой ячейки. Функции $X(x)$ и $Y(y)$ являются решениями уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} X(x) + \alpha^2 X(x) &= 0, \\ \frac{d^2}{dy^2} Y(y) + \beta^2 Y(y) &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Решение в форме (15) позволяет формулировать условия на границах ячейки по такому же принципу, который использован в данной работе для одномерной задачи.

При решении двумерной задачи в большинстве случаев имеют место облегчающие обстоятельства:

1. Прямоугольные ячейки обычно бывают квадратными, т. е. $a = b$.

2. Наиболее интересным решением чаще всего является асимптотическое неоднородное решение, для которого величины αa и βb близки к нулю.

3. Для многих практических целей достаточно найти только эффективные макроскопические параметры гомогенизированной среды, чтобы перейти к макроскопическому рассмотрению задачи. Для этого достаточно иметь лишь усредненные значения функций F_{00}, F_{10}, F_{01} и F_{11} на сторонах ячейки.

Если при этом используется P_N -приближение не очень высокого порядка, решение двумерной задачи осуществляется сравнительно легко. Пример расчета непоглощающих ячеек в P_2 -приближении приведен в работе [8].

К отысканию решения в форме (15) можно свести, в частности, задачу об эффективных макроскопических параметрах при диффузии нейтронов под различными углами к осям решетки.

Поступила в Редакцию 31/V 1962 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Я. Румянцев. «Атомная энергия», 13, № 6, 556 (1962).
2. Г. И. Марчук. Методы расчета ядерных реакторов. М., Госатомиздат, 1961.
3. А. Вейнберг, Е. Вигнер. Физическая теория ядерных реакторов. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
4. Б. Дэвисон. Теория переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1960.
5. Г. Я. Румянцев. «Атомная энергия», 10, № 1, 26 (1961).
6. В. I. Spingard. J. Appl. Phys., 26, 548 (1955).
7. Я. В. Шевелев. «Атомная энергия», 2, № 3, 224 (1957).
8. Г. Я. Румянцев. Метод сферических гармоник и теория переноса нейтронов в P_2 -приближении. Диссертация. МИФИ, 1961.