П-90

НАУЧНО–ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ

ИНСТИТУТ АТОМНЫХ РЕАКТОРОВ

ИМ. В. И. ЛЕНИНА

А.П. ПЛАТОНОВ

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АДАМСА К ЗАДАЧЕ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ В ГОМОГЕННОЙ БЕСКОНЕЧНОЙ СРЕДЕ

МЕЛЕКЕСС

1970

НИИАР П-90

УДК 517.9.621.039

А.П.Платонов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АДАМСА К ЗАДАЧЕ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ В ГОМОГЕННОЙ БЕСКОНЕЧНОЙ СРЕДЕ

МЕЛЕКЕСС

1970

В В Е Д Е Н И Е

При решении основных задач физики реакторов часто приходится решать задачи, в которых необходимо знать основные особенности энергетической зависимости потока нейтронов при замедлении их в бесконечных однородных средах, имеющих резонансную структуру.

Эффекты резонансного поглощения нейтронов на отдельных узких резонансах хорошо описываются приближением Вигнера. Однако основные предположения данного приближения нарушаются как на резонансных уровнях в тяжелых поглотителях, так и на уровнях со значительным поглощением при высоких энергиях.

Учет влияния резонансной структуры на спектр замедляющих нейтронов развивается в двух направлениях, а именно: приближенные аналитические решения поставленной задачи и численные методы, позволяющие точно решить уравнение замедления в гомогенной бесконечной сред. Известные численные методы решения уравнения [I,2] страдают либо неточностью конечно-разностных формул [I], либо использованием различных приближений для плотности столкновений [2].

В настоящей работе к данной задаче применен численный метод, позволяющий получить разностные формулы высокой точности без каких-либо предположений о виде плотности столкновений и резонансной структуры сечений.

Одним из преимуществ данного метода является легкость обобщения его на случай многокомпонентных сред.

I. УРАВНЕНИЕ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ В ГОМОГЕННОЙ СРЕДЕ

Известно [3], что нахождение функции распределения нейтронов по энергиям при их замедлении в бесконечной среде, состоящей из атомов одного элемента, сводится к решению интегрального уравнения

$$\Psi(u) = \int_{u-q}^{u} h(u')\,\Psi(u')\,f(u-u')\,du' + S(u), \qquad (1)$$

где

$$f(u) = \begin{cases} \alpha e^{-u} & \text{при } 0 < u < q \\ 0 & \text{при } u > q \end{cases}$$
$$\alpha = \frac{(M+1)^2}{4M}, \quad q = \ln\left(\frac{M+1}{M-1}\right)^2 \qquad (2)$$

и M – отношение массы ядра замедлителя к массе нейтрона, $h(u)$ – отношение эффективного сечения рассеяния нейтронов к полному эффективному сечению взаимодействия нейтронов с веществом. Причем без ограничения общности функцию источника $S(u)$ выберем в виде моноэнергетического источника единичной мощности $S(u) = \delta(u)$.

Использование такого вида источника приводит к сингулярному потоку из-за сингулярной природы самого источника. Поэтому представим функцию распределения в виде

$$\Psi(u) = \Psi_0(u) + \delta(u), \qquad (3)$$

где $\Psi(u)$ – несингулярная часть плотности столкновений.

Подстановка этого выражения в (I) дает следующее интегральное уравнение для $\Psi_o(u)$

$$\Psi_o(u) = \alpha \int_{u-q}^{u} h(u')\Psi_o(u')\exp(u'-u)du' + S_o(u),$$

где
$$S_o(u) = \begin{cases} \alpha h(o)\, e^{-u} & \text{при} \quad o<u<q \\ 0 & \text{при} \quad u>q . \end{cases} \qquad (4)$$

Важно отметить, что функция источника $S_o(u)$ является разрывной как при $u = 0$, так и при $u = q$.
Дифференцируя уравнение (4), получим:

$$\Psi_o'(u) = [\alpha h(u)-1]\Psi_o(u)-\alpha h(u-q)e^{-q}\Psi_o(u-q) \qquad (5)$$

Это уравнение относится к типу дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом. Заменой

$$\varphi(u) = \Psi_o(u)\exp[u-\alpha\int_0^u h(u')du'] \qquad (6)$$

оно приводится к более простому виду

$$\varphi'(u) = C(u)\varphi(u-q), \qquad (7)$$

где

$$C(u) = -\alpha h(u-q)\exp[-\alpha\int_{u-q}^{u} h(u')du']. \qquad (8)$$

Обычным методом решения уравнения(4) или (7) является метод шагов [3,4,5].

П. ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД АДАМСА

Пусть требуется найти решение $\varphi(u)$ уравнения (7), отвечающее условию (6,7)

$$\varphi(u) = f(u) \qquad \text{при} \qquad u \in E_{u_0}. \tag{9}$$

Здесь $f(u)$ – достаточно гладкая функция, заданная на начальном множестве E_{u_0}, определенном как множество тех и только тех точек $y = u - q$, которые удовлетворяют условию $u - q \leq u_0$ при $u_0 \leq u \leq A$, где u_0 и А – известные числа.

Мы сформулировали задачу Коши, решение которой в отличие от классического дифференциального уравнения может претерпевать разрывы I рода и слабые разрывы (разрывы I рода производных) в точках последовательности ξ_i, $i = 0, 1, 2, \ldots, S$. Данная последовательность точек определяется по i из условия: ξ_i является первой точкой после ξ_{i-1}, удовлетворяющей уравнению $u - \xi_i = \xi_{i-1}$, $i = 1, 2 \ldots$ Для уравнения (7) получаем следующую последовательность точек разрывов 0, q, $2q$, $3q$ и т.д. Метод, развитый в работе [6], применим для решения задачи (7,9).

Пусть производные $\frac{d^\nu \varphi}{du^\nu}$ при $\nu = 0, 1, 2, \ldots, p$ претерпевают разрывы I рода в точках ξ_i, $i = 0, 1, 2, \ldots, S$ на отрезке [а,в], причем известны величины

$$\omega_i^\nu = \frac{d^\nu \varphi}{du^\nu}\Big|_{u=\xi_i+0} - \frac{d^\nu \varphi}{du^\nu}\Big|_{u=\xi_i-0} \tag{10}$$

$$i = 0, 1, 2, \ldots, S; \qquad \nu = 0, 1, 2, \ldots, p.$$

И будем рассматривать кусочно-непрерывную функцию φ как всюду непрерывную справа. Предполагая, что

$$a \le \xi_0 \le \xi_1 \le \dots \le \xi_s \le b,$$

введем в рассмотрение кусочно-постоянные функции

$$\Omega_i^{\nu}(u) = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad u < \xi_i \\ \omega_i^{\nu} & \text{при} \quad u \ge \xi_i \end{cases} \tag{II}$$

$$a \le u \le b; \quad i = 0,1,2,\dots,s; \quad \nu = 0,1,2,\dots,p$$

и положим

$$H(u) = \sum_{i=0}^{s} \sum_{\nu=0}^{n+1} \frac{(u-\xi_i)^{\nu}}{\nu!} \Omega_i^{\nu}(u). \tag{I2}$$

Легко видеть, что скачки производной $\overset{(\nu)}{H}(u)$ в точках последовательности $\{\xi_i\}$ совпадают с соответствующими скачками производной $\varphi^{(\nu)}(u)$, $\nu = 0, 1, \dots, p$. Поэтому функция

$$g(u) = \varphi(u) - H(u) \tag{I3}$$

на промежутке [a,в] имеет n+1 непрерывную производную.

В частности, функция

$$\frac{d^{\nu} g(u)}{du^{\nu}} = \frac{d^{\nu}\varphi(u)}{du^{\nu}} - \frac{d^{\nu}H(u)}{du^{\nu}}, \quad \nu = 0,1,2,\dots,n+1$$

непрерывна на отрезке [a,в] и имеет на нем непрерывные производные до n+I $-\nu$ порядка.

Сделаем замену неизвестной функции $\varphi(u)$ в уравнении (7) при помощи подстановки (I3). Тогда уравнение (7) будет иметь вид:

$$\frac{dg}{du} = C(u)[g(u-q) + H(u-q)] - \frac{dH}{du}, \tag{I4}$$

а условие (9) запишется следующим образом:

$$g(u) = f(u) \quad \text{при} \quad u \in E_{u_0}. \tag{I5}$$

При сделанных выше предположениях относительно функций $g(u)$ и $H(u)$ решение задачи (I4,I5) обладает s+I непрерывной производной. Отсюда следует возможность применения для решения данной задачи обычных формул типа Адамса.

Рассмотрим формулу типа Адамса, которую запишем в виде [8]

$$L(g_k)=\sum_{i=0}^{m}\alpha_i\, g_{k-i}-h\sum_{i=0}^{n}\beta_i\, F_{k+\ell-i}=0, \qquad (I6)$$

где к -переменный индекс; h - шаг равномерной сетки узлов ($u_k=u_0+h$); $h>0$; α_i,β_i - определенные действительные числа [9]; m,n,ℓ - определенные целые числа; g_k - искомое приближенное решение, а F_k - правая часть уравнения (I4). Если в формуле (I6) перейти с помощью преобразования

$$g_k=\varphi_k-H(u_k)$$

к исходным обозначениям, то получим обобщенную формулу типа Адамса приближенного интегрирования задачи (7,9):

$$\sum_{i=0}^{m}\alpha_i\,\varphi_{k-i}-h\sum_{i=0}^{n}\beta_i\Big[C_{k+\ell-i}\,\varphi(u-q)-\frac{dH(u)}{du}\Big]_{u=u_{k+\ell-i}}-\sum_{i=0}^{m}\alpha_i\,H(u)\Big|_{u=u_k}. \qquad (I7)$$

Значение функции

$$\varphi(u-q)\Big|_{u=u_k}$$

определяется в результате интерполяции в точке (u_k-q) по имеющимся значениям φ_i при помощи обобщенного интерполяционного полинома степени n.

$$\varphi(u)=L(u)+H(u)+R(u)=\overset{*}{L}(u)+R(u), \qquad (I8)$$

где [8]

$$L^*(u) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i(u)[\varphi(u_i) - H(u_i)], \qquad (19)$$

а погрешность интерполирования выражается формулой

$$R(u) = \frac{\omega_n(u)}{(n+1)!} \frac{d^{n+1}}{du^{n+1}} [\varphi(u) - H(u)]_{u=\xi}; \qquad (20)$$

здесь α_i -соответствующие коэффициенты Лагранжа, а

$$\omega_n(u) = (u-u_0)\times\cdots\times(u-u_n).$$

Формула (17) может быть выведена непосредственно с использованием обобщенного интерполяционного полинома (19). Сходимость обобщенного метода типа Адамса и оценка вычислительной погрешности определяются следующей теоремой [6]. Если:

а) разностный оператор $L(q_k)$ имеет степень $s \geq 1$,

б) корни характеристического уравнения разностного оператора $\sum_{i=0}^{m} \alpha_i q_{k-i}$ по модулю не превышают единицы, причем те из них, модуль которых равен единице, являются простыми,

г) вектор-функция $f(u)$ имеет непрерывную производную по всем аргументам до порядка s включительно,

то для погрешности метода имеет место оценка $\delta_k = O(h^s)$.

III. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕЛИЧИН СКАЧКОВ ПРОИЗВОДНЫХ

Для успешного применения развитой методики численного решения поставленной задачи необходимо предварительно определить скачки производных и самой функции в точках последовательности $0, q, 2q, \ldots, nq$.

Для определения разрывов в точках 0 и q рассмотрим решение уравнения (5) на интервале $[0, q]$. Последний член в правой части равен 0 ($\Psi(u) = 0$ при $u < 0$), и данное уравнение легко интегрируется. Для того, чтобы решение было единственное, получим граничное условие. С этой целью, полагая $u=0$ при движении по энергетической оси справа, получим из уравнения (4)

$$\Psi_0(0+)=\alpha h(0). \tag{21}$$

Тогда решение уравнения (5) на интервале $[0,q]$ имеет вид

$$\Psi_0(u)=\alpha h(0)\exp\int_0^u(\alpha h(u')-1)\,du'. \tag{22}$$

Делая подстановку (6), получим выражение для функции $\varphi(u)$ на интервале $[0,q]$

$$\varphi(u)=\alpha h(0). \tag{23}$$

Таким образом, решение уравнения (7) на интервале $[0,q]$ постоянно и не зависит от вида функции $h(u)$ на данном интервале. Для определения скачка функции $\Psi(u)$ в точке $u=q$ приближая значение u в точку $u=q$ справа, получим:

$$\Psi_0(q+)=\alpha^2 h(0)e^{-q}\int_0^q h(u')\times \times\exp[\alpha\int_0^{u'}h(u'')du'']\,du' \tag{24}$$

и, действуя оператором

$$F\varphi(u)=\varphi(u+0)-\varphi(u-0) \tag{25}$$

на функцию $\varphi(u)$ в точках $u=0$ и $u=q$, получим явный вид скачков функции $\varphi(u)$:

$$F\varphi(u)|_{u=0}=\omega_0=\alpha h(0), \tag{26}$$

$$F\varphi(u)|_{u=q}=\omega_1= =\omega_0[\alpha\int_0^q h(u')\exp[-\alpha\int_{u'}^q h(u'')du'']\,du'-1]. \tag{27}$$

Скачки производных функции $\varphi(u)$ определяются в результате действия оператора F на соответствующую производную $\varphi(u)$, определяемую рекуррентным соотношением

$$\overset{(\nu)}{\varphi}(u) = \sum_{m=1}^{\nu} C_{\nu}^{m} \overset{(m)}{C}(u) \overset{(\nu-m)}{\varphi}(u-q), \qquad (28)$$

где C_{ν}^{m} – биноминальные коэффициенты.

Таким образом,

$$F \overset{(1)}{\varphi}(u) = \overset{(1)}{\varphi}(u+0) - \overset{(1)}{\varphi}(u-0) =$$
$$= C(u)\left[\varphi(u-q+0) - \varphi(u-q-0)\right]$$

имеет разрывы в точках $u=q$ и $u=2q$, т.е.

$$F \overset{(1)}{\varphi}(u)\Big|_{u=q} = \omega_1^{1} = C(q)\,\omega_0\,, \qquad (29)$$

$$F \overset{(1)}{\varphi}(u)\Big|_{u=2q} = \omega_2^{1} = C(2q)\,\omega_1\,. \qquad (30)$$

Дифференцируя уравнение (7), получим выражение для второй производной $\varphi(u)$

$$\overset{(2)}{\varphi}(u) = C(u)\overset{(1)}{\varphi}(u-q) + \overset{(1)}{C}(u)\varphi(u-q) = C(u)C(u-q)\varphi(u-2q) + \overset{(1)}{C}(u)\,\varphi(u-q),$$

которая имеет разрывы в точках

$u=q$, $u=2q$, $u=3q$, т.е.

$$F \overset{(2)}{\varphi}(u)\Big|_{u=q} = \omega_1^{2} = \overset{(1)}{C}(q)\,\omega_0\,, \qquad (31)$$

$$F \overset{(2)}{\varphi}(u)\Big|_{u=2q} = \omega_2^{2} = C(2q)C(q)\,\omega_0 + \overset{(1)}{C}(2q)\,\omega_1\,, \qquad (32)$$

$$F \overset{(2)}{\varphi}(u)\Big|_{u=3q} = \omega_3^{2} = C(3q)C(2q)C(q)\,\omega_1\,. \qquad (33)$$

Проделывая аналогичные операции для следующих производных функции $\varphi(u)$, найдем все скачки производных в точках последовательности $q, 2q, \ldots, nq$.

В выражения для определения скачков производных входят значения производных от функции С (u), определяемой равенством (8). Первая производная от функции равна

$$C^{(1)}(u) = (-\alpha h'(u-q)+\alpha^2 h(u-q))(h(u) - \\ - h(u-q))\exp(-\alpha\int\limits_{u-q}^{u} h(u')du') = \\ = \left\{\frac{h'(u-q)}{h(u-q)} - \alpha[h(u) - h(u-q)]\right\} \times C(u). \qquad (34)$$

Обозначая выражение в фигурных скобках через $A(u)$, запишем рекуррентное соотношение для определения $(\nu+1)$ производной функции С (u):

$$C^{(\nu+1)}(u) = \sum_{m=0}^{\nu} C_\nu^m A^{(\nu)}(u) C^{(\nu-m)}(u) \qquad (35)$$

$$\nu = 0, 1, 2, \ldots, n,$$

где

C_ν^m – биноминальные коэффициенты;

$A^{(\nu)}(u)$ - ν - производная от выражения $A(u)$.

В заключение рассмотрим простой пример численного интегрирования поставленной задачи, когда $h(u)$ не зависит от (u), т.е. случай отсутствия поглощения замедляющей средой. В данном случае определение скачков не вызывает больших трудностей

$$\omega_0 = \alpha;$$

$$\omega_1^0 = -\alpha e^{-\alpha q}; \quad \omega_1^1 = \alpha\omega_1^0; \quad \omega_1^2 = 0;$$

$$\omega_2^0 = 0; \quad \omega_2^1 = \omega_1^{0\,2}; \quad \omega_2^2 = \alpha\omega_2^1; \quad \omega_2^3 = 0;$$

$$\omega_3^0 = 0; \quad \omega_3^1 = 0; \quad \omega_3^2 = \omega_1^{0\,3}; \quad \omega_3^3 = \alpha\omega_3^2;$$

$$\omega_3^4 = 0.$$

Решение на интервале $[0, q]$ определяется равенством

$$\Psi(u) = \alpha \exp(-(1-\alpha)u).$$

Результаты расчетов на интервале $[q, 2q]$ приведены в таблице I для M=4, где $\Psi(u)$–решение, построенное методом шагов, и на интервале $[q, 2q]$ равно [4]

$$\Psi(u) = (\alpha-1)[e^{\alpha q} - 1 - \alpha(u-q)]\exp[(\alpha-1)(u-q)],$$

а $\Psi_4(u), \Psi_4(u)^*$ – приближенные решения, полученные по обобщенной формуле Адамса и по обыкновенной формуле Адамса 4 порядка.

Таблица I

u_k	$\Psi(u)$	$\Psi_4(u)$	$\Psi_4^*(u)$	$\Delta = \Psi(u)-\Psi_4(u)$	$\Delta = \Psi(u)-\Psi_4^*(u)$
I	2,21337	2,21337	2,21337	0	0
I,I	2,24919	2,24919	2,24181	0	0,00738
I,2	2,28151	2,28151	2,26965	0	0,01186
I,3	2,30977	2,30977	2,25614	0	0,05363
I,4	2,33339	2,33339	2,27776	0	0,05563
I,5	2,35174	2,35174	2,29268	0	0,05906
I,6	2,36408	2,36408	2,29940	0	0,06468
I,7	2,36966	2,36966	2,30241	0	0,07232
I,9	2,35706	2,35706	2,28169	0	0,07537
2,0	2,33696	2,33696	2,25604	0	0,08092

Сравнение результатов показывает, что погрешность метода не превышает 0,01% на всем интервале энергий. Результаты расчетов функции замедления по формуле (17) приведены на рисунке I.

В заключение автор считает своим долгом поблагодарить А.А.Лукьянова за постановку задания и постоянное внимание к работе.

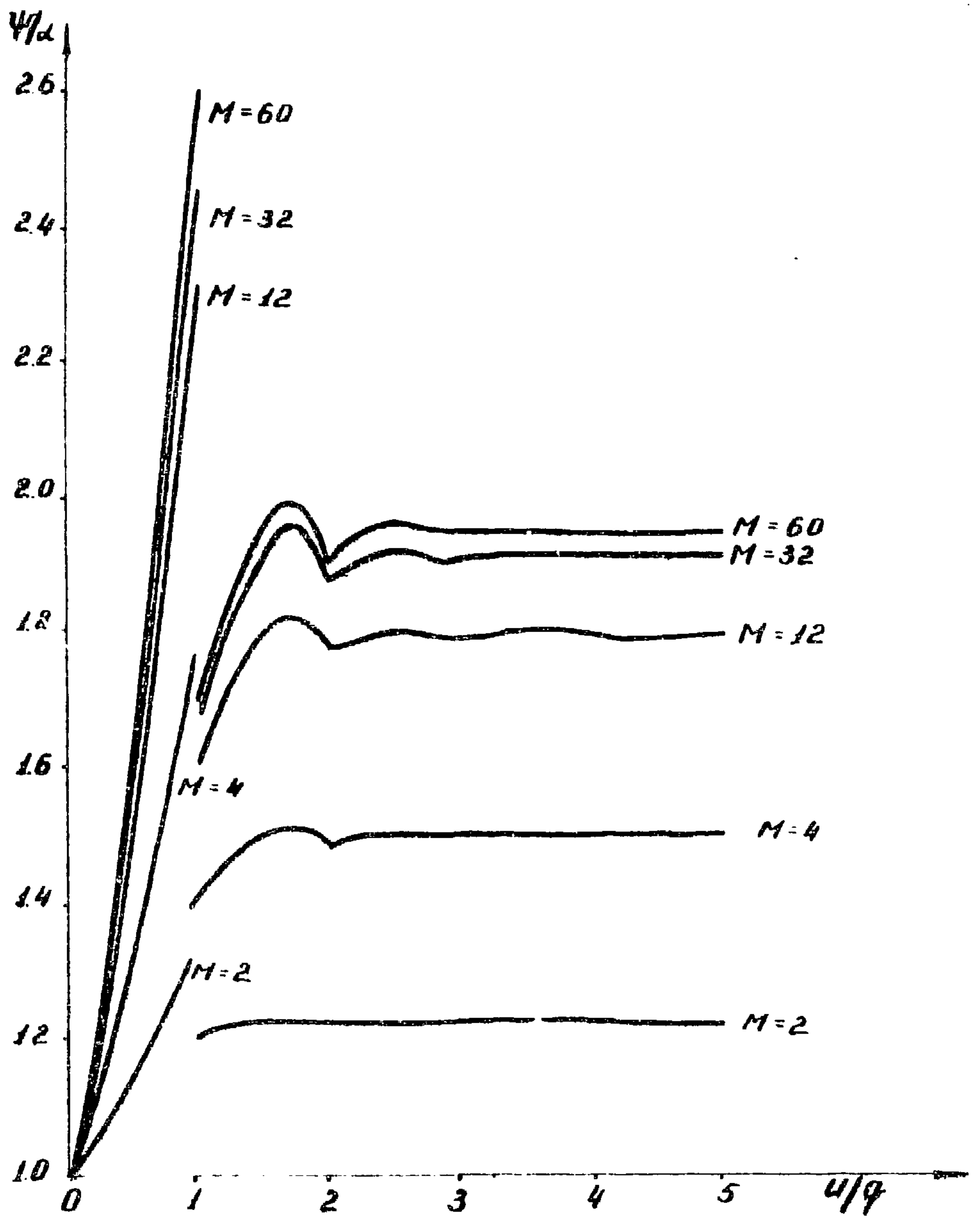

Рис. I. Функция распространения нейтронов $\psi(u)/\alpha$

Л И Т Е Р А Т У Р А

I. Rowlands G. A numerical study of the fast neutron spectrum in homogeneous media. J.Nucl.Energy. Part A, 13 (1960)14.

2. Михайлус Ф.Ф. Расчет резонансного поглощения нейтронов в гомогенных средах. Теория и методы расчета ядерных реакторов. Госатомиздат (1962) I60.

3. Marshak R.E. Theory of the slowing down of neutrons by elastic collisions with atomic nuclei. Rev.Mod.Phys. 19 (1947)185.

4. Дреснер Л. Резонансное поглощение в ядерных реакторах. Госатомиздат (1962).

5. Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория атомных реакторов. Изд-во ин.лит-ры, М. (1961).

6. Горбунов А.Д., Попов В.Н. О методах типа Адамса приближенного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздыванием. Сб. "Численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений и квадратные формулы". М., "Наука" (1964) I35.

7. Зверкина Г.С. Модификация конечноразностных методов для интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений с негладкими решениями. Сб. "Численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений и квадратные формулы". М., "Наука" (1964) I49.

8. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. М., Физматгиз, т.I,2 (1959).

9. Токмалаева С.С. Ординатные формулы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений I порядка. Сб. "Вычислительная математика" АН СССР, 5 (1959) 3-57.

Рукопись поступила в редакцию ОНТИ 19 июня 1970 г.

Отпечатано в Научно-исследовательском институте атомных реакторов
им. В.И.Ленина

Т-08338 от 2.VI.70г. Тираж 135. И ю л ь, 1970.
Редактор М.К.Белова.