

A páros paritású P_N transzportszámítási módszer vizsgálata

OTDK dolgozat

Jancsovics Janka

Témavezető:
Dr. Kópházi József
egyetemi docens, BME NTI



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Természettudományi Kar
Nukleáris Technikai Intézet
Budapest, 2025

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. Motiváció	3
1.2. Célkitűzés	3
1.3. Áttekintés	4
2. Elméleti háttér	4
2.1. Megoldási módszerek a transzportegyenlet alakja szerint	6
2.2. Irányfüggés	8
2.2.1. Diffúziós transzportközelítés	8
2.2.2. Páros paritású P_N transzportközelítés	9
2.3. Energiafüggés	14
2.4. Helyfüggés	14
2.5. Időfüggés	18
3. Diffúziós reaktorfizikai kód fejlesztése	19
3.1. Kód felépítése	19
3.1.1. Inputolvasás	20
3.1.2. Koordináta- és kapcsolati táblák felállítása	23
3.1.3. Térbeli integrálok számítása	23
3.1.4. Globális operátorok összeállítása	24
3.1.5. Egyenletrendszer megoldása iterációval	26
3.1.6. Outputírás	27
4. Páros paritású P_N reaktorfizikai kód fejlesztése	27
4.1. Kód felépítése	27
4.1.1. Szög szerinti integrálok kiszámítása	30
4.1.2. Numerikus nehézségek	33
5. Kódok tesztelése	34
5.1. Diffúziós kód tesztelése	34
5.1.1. Tesztfeladatok	34
5.1.2. Számítási eredmények	37
5.2. Páros paritású P_N kód tesztelése	40
5.2.1. Tesztfeladatok	40
5.2.2. Számítási eredmények	43
6. Összefoglalás	52
6.1. Kitekintés	52

Kivonat

Reaktorfizikai számítások végzéséhez számos különböző transzportszámítási módszer közül választhatunk a probléma jellegétől, a rendelkezésre álló számítástechnikai kapacitástól, az időkerettől és egyéb tényezőktől függően. Elmondható azonban, hogy a gyakorlatban az elsőrendű transzportszámítási módszerek előnyt élveznek a másodrendűekkel szemben, az utóbbi módszereket csak ritkábban alkalmazzák, annak ellenére, hogy igényelt számítógépi kapacitás szempontjából kedvezőbbek. Jellemzően diffúziószerű egyenletek rendszeréhez juthatunk el a másodrendű közelítések esetén, ezek pedig nagy hatékonysággal oldhatóak meg numerikusan. Másfelől komolyabb transzportproblémákat az elsőrendű és integrális módszerek jobban kezelnek, így ezek esetén a nagyobb kapacitásigény és az ezzel járó magasabb költségek indokoltak lehetnek; tehát adott reaktorfizikai problémához a megfelelő transzportközelítés választása egyfajta optimalizációs folyamatként fogható fel.

Jelen dolgozat célja, hogy a másodrendű transzportszámítási módszerekben rejlő lehetőségeket, alkalmazhatóságukat vizsgálja egy választott módszeren, a páros paritású P_N transzportközelítésen keresztül. A páros paritású P_N transzportközelítés tanulmányozása tehát indokolt, hiszen mind a közelítés és peremfeltételeinek elméleti származtatása, mind pedig a reaktorfizikai kódba való implementálásának numerikus vonatkozásai más másodrendű transzportszámítási módszereknél is relevánsak lehetnek. A tekintett transzportközelítés vizsgálatának szerves részét képezi, hogy működését gyakorlatban is demonstráljuk, erre egy általam fejlesztett végeelem-módszeren alapuló reaktorfizikai kód szolgál.

Jelen munka a páros paritású P_N transzportszámítási módszert a klasszikus értelmezés szerinti peremfeltételeivel dolgozza fel, a reaktorfizikai kódba is ezek kerültek implementálásra. Hosszabb távon viszont cél a klasszikus és a P_N közelítésnél gyakorlatban alkalmazott peremfeltételeket egy keretrendszerbe foglalni, valamint egy jellemzően elsőrendű egyenletekre megalkotott, az ún. Riemann-módszer alkalmazhatóságát is megvizsgálni másodrendű egyenletek peremfeltételeinek megfogalmazására.

1. Bevezetés

1.1. Motiváció

A nukleáris ipar gyakorlatában kulcsfontosságúak a hitelesség, költség és idő szempontjából megfelelő reaktorfizikai számítások. A számítási módszer választását rengeteg tényező befolyásolhatja, ezek közül azonban elsődleges a probléma jellege. Más transzportszámítási módszert érdemes választani például egy nagy méretű, kis abszorpciójú homogén rendszer belsejét vizsgálva, mint egy sugárárnyékolás tervezésekor, ahol a keresett fluxus több nagyságrendes változását várjuk. Általánosan igaz, hogy "keményebb" transzportszámítási módszerek, tehát magasabb rendű transzportközelítések a problémák szélesebb körében szolgáltatnak megbízható eredményt, ugyanakkor alkalmazásuk nem mindig indokolt. Nem erősen transzportjellegű, diffúzív feladatokra magasabb rendű transzportszámítási módszerek használata nem bizonyul idő- és költséghatékonynak, hiszen ezek magasabb számítástechnikai kapacitást igényelnek, illetve hosszabb futási idővel járnak. Összeségében tehát elmondható, hogy adott problémához a megfelelő transzportközelítés kiválasztása egy több faktoros optimalizációs feladat.

Az első- és másodrendű transzportszámítási módszereket is megvizsgálhatjuk ebben a kontextusban. Az első- és másodrendű módszerek különböző szerkezetű egyenleteket eredményeznek, - előbbiek hiperbolikus, utóbbiak elliptikus egyenletekre vezetnek - sejthető tehát, hogy sok tekintetben különböznek alkalmazhatóságuk, előnyeik és hátrányaik terén. A gyakorlatban az elsőrendűek szélesebb körben ismertek, így szélesebb körben is kerülnek alkalmazásra, míg a kevésbé ismert másodrendű módszereket - kivétel ez alól a diffúzió - csak ritkábban használják. Azonban van előnye a másodrendű módszerek alkalmazásának az elsőrendűekkel szemben, ezek közül talán a legfontosabb, hogy numerikusan jobban kezelhető problémákra vezetnek, hiszen ezeknél a módszereknél általában diffúziószerű egyenletek rendszeréhez juthatunk el, amelyek numerikusan nagy hatékonysággal oldhatók meg. Ennek ellenére vannak olyan problémák, jellemzően erősen transzportjellegű feladatok, amelyek megoldására a másodrendű módszerek nem, vagy csak korlátozott mértékben alkalmasak, így ezeknél az elsőrendű és integrális módszerek egyértelműen előnyt élveznek.

Mindazonáltal érdemes a másodrendű transzportszámítási módszerekkel mélyebben is foglalkozni, megvizsgálni az alkalmazhatóságukat reaktorfizikai problémák megoldására. Ez indokolta a dolgozat témaválasztását is. Jelen dolgozat a másodrendű módszereket egy választott transzportközelítésen, a páros paritású P_N közelítésen keresztül hivatott tanulmányozni, külön figyelmet szentelve az adott közelítés, tágabb értelemben pedig a másodrendű transzportszámítási módszerek numerikus aspektusára, numerikus viselkedésére. Tehát a választott transzportközelítés vizsgálata indokolt, mivel a másodrendű módszerek közötti hasonlóságokat kihasználva nem csak a konkrét közelítés, hanem egyéb másodrendű módszerek tulajdonságaira, jellemzőire is fény derülhet.

1.2. Célkitűzés

Jelen dolgozat fő célja, hogy a páros paritású P_N transzportszámítási módszert, ezen keresztül pedig általánosan a másodrendű számítási módszereket vizsgálja. A másodrendű módszerek több szempontból is érdekesek, ennek megfelelően több aspektus mentén tanulmányozzuk, és értékeljük a választott páros paritású P_N transzportközelítést, majd terjesztjük ki a megfigyelt eredményeket egyéb másodrendű esetekre is. Ilyen aspektus például az adott transzportszámítási módszer egyenleteinek és peremfeltételeinek származtatása, elméleti levezetése, ezek valós reaktorfizikai kódba való implementálása, ennek előnyei, hátrányai, esetleges kihívásai, vagy

akár az elkészített reaktorfizikai program viselkedése, hatékonyságának növelése, fejlesztési lehetőségei stb.

További célkitűzés, hogy a páros paritású P_N transzportszámítási módszer működését gyakorlatban is megmutassuk, melyre egy általam fejlesztett végeelem-módszeren alapuló reaktorfizikai kód szolgál. Az említett kódfejlesztést megelőzően egy ugyanúgy végeelem-módszeren alapuló, de diffúziós közelítést használó kód került megírásra. Ez egyfelől azért előnyös, mert a páros paritású P_N módszer diffúziószerű egyenletek rendszerének megoldására vezet, így a hasonlóságok miatt egy egyszerűbb szerkezetű és egyszerűbben tesztelhető diffúziós kód teljes moduljai átemelhetők a transzportkódba, meggyorsítva ezzel a kódfejlesztés folyamatát. Másfelől a páros paritású P_N transzportközelítés $N = 1$ esete megegyezik magával a diffúziós közelítéssel, így ezek összevetése is kulcsfontosságú.

Az elkészült diffúziós és páros paritású P_N kódok működését célunk széleskörűen tesztelni, valamint bemutatni felépítésüket, a kódok által alkalmazott közelítésekre és módszerekre is kitérve. A teszteléshez két- és háromdimenziós benchmarkfeladatok, illetve ezekhez megfelelően magas rendű diszkrét ordinátás (S_N) referencia transzportmegoldások lettek kiválasztva. Távlati cél pedig, hogy kijelöljük, milyen változtatásokat tehetnénk a transzportkód hatékonyságának növelése érdekében, illetve, hogy megvizsgáljuk egy elsőrendű egyenletekre kifejlesztett, az ún. Riemann-módszer alkalmazhatóságát másodrendű egyenletek esetében.

1.3. Áttekintés

A következőkben röviden áttekintjük, és összefoglaljuk a dolgozat tartalmát. Elsőként a dolgozat elméleti háttere kerül bemutatásra, minden olyan közelítés és módszer kifejtésre kerül, amellyel a diffúziós és a páros paritású P_N reaktorfizikai kódok operálnak. Tehát a megoldandó neutrontranszport-egyenlet irány-, tér-, energia- és időfüggésének kezelésére is kitérünk. Ezután foglalkozunk a kódfejlesztés folyamatával, először a diffúziós, majd a páros paritású P_N kód esetén mutatom be az adott program felépítését, működését, valamint a tesztelésére választott feladatokat. Külön kitérünk a két közelítés kapcsolatára, és ezt konkrét számítási eredményeken keresztül is szemléltetjük. Ezt követi a számítási eredmények közzlése és diszkutálása, majd pedig egy rövid összegzés és kitekintés zárja a dolgozatot.

2. Elméleti háttér

Reaktorfizikai számítások esetén a neutrontér megfelelő leírása a cél. A neutrontér jellemzésére használt mennyiség a neutronfluxus, amely megadja az E energián $\underline{\Omega}$ irányra merőlegesen elhelyezett egységnyi felületen időegység alatt áthaladó neutronok számát. A neutrontér általános leírására pedig az ún. neutrontranszport-egyenlet szolgál, amelyet a neutronfluxusra vonatkozóan írunk fel [32]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)}{\partial t} = -\underline{\Omega} \nabla \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) - \Sigma_t(\underline{r}, E) \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) + Q(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t). \quad (1)$$

Az (1) egyenletet a reaktorfizika alapegyenletének is nevezik. Látható, hogy ez valójában egy mérlegegyenlet; a bal oldalon a neutronsűrűség időbeli változása van kifejezve a neutronfluxussal, míg az egyenlet jobb oldalán azoknak a folyamatoknak az előjelhelyes összege szerepel, amelyek a fázistér adott pontján növelik vagy csökkentik a neutronok számát. A $\underline{\Omega} \nabla \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ kifolyási tag megadja, hogy a neutronok mozgásának következtében hány neutron tűnik el a fázistér adott pontjáról, míg a $\Sigma_t(\underline{r}, E) \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ tag a neutronok reakcióban való eltűnését írja

le. Ez a két folyamat a neutronok számát csökkenti a fázistér adott pontján, míg a neutronok termelődését a $Q(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ általános forrástag fejezi ki. Ez a forrástag többféle neutronkeletkezési módot foglal magában, kifejtett alakját a (2) egyenletben láthatjuk [32].

$$\begin{aligned}
Q(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = & \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\underline{r}, E') \varphi(\underline{r}, E', \underline{\Omega}', t) dE' d\underline{\Omega}' + \\
& + \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\underline{r}, E' \rightarrow E, \underline{\Omega}\underline{\Omega}') \varphi(\underline{r}, E', \underline{\Omega}', t) dE' d\underline{\Omega}' + \\
& + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{in}(\underline{r}, E' \rightarrow E) \varphi(\underline{r}, E', \underline{\Omega}', t) dE' d\underline{\Omega}' + \\
& + S(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)
\end{aligned} \tag{2}$$

A (2) egyenlet értelmében keletkezhetnek neutronok a fázistér adott pontján hasadás, illetve rugalmas vagy rugalmatlan szórás következtében, valamint származhatnak ún. külső forrásból is. A külső forrás fontos jellemzője, hogy nem függ a neutronfluxustól. Az általános forrástag kifejtett alakjával együtt tekintve az (1) egyenletet látható, hogy a neutrontranszport-egyenlet valójában egy hétváltozós integro-differenciálegyenlet. Fontos megjegyezni, hogy a transzport-egyenlet változója az ún. szögfüggő fluxus vagy vektorfluxus, amely függ iránytól, helytől, energiától és időtől. Egy másik gyakran használt mennyiségre, az ún. skalárfluxusra az irányfüggés már nem áll fenn, a skalárfluxust a szögfüggő fluxus teljes 4π térszögtartományon való integrálásával kaphatjuk meg. Mindkettőt "fluxus"-ként szokták rövidíteni, de a két mennyiség nem összekeverendő, így a továbbiakban amikor a skalárfluxust említem, mindig a teljes nevén hivatokozom rá.

A neutrontér leírására azonban nem elegendő csupán felírni a neutrontranszport-egyenletet, hanem az adott problémára az egyenlet ún. kezdeti és peremfeltételeit is meg szükséges adni. A kezdeti feltételt általában úgy értelmezzük, mintha a fluxus értéke a fázistérben adott lenne a kezdeti $t = 0$ időpillanatban. A peremfeltételek közül a két legfontosabbat, a reflektív peremet, illetve a vákuumperemet foglaljuk itt össze. A reflektív peremfeltétel jelentése, hogy a peremen lévő $\underline{r}$ pontban a fluxus értéke megegyezik a kimenő és a reflektált irányra:

$$\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}', t), \tag{3}$$

ahol $\underline{r} \in \Gamma_r$ a szimmetriaperem egy pontja, és $\underline{\Omega}'$ a reflektált irány [4].

Míg vákuum peremfeltétel azt fogalmazza meg, hogy a rendszerbe nem kerülhetnek annak határán kívülről neutronok, tehát a peremen a neutronok csak kifelé haladhatnak:

$$\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = 0, \tag{4}$$

ha $\underline{r} \in \Gamma_v$ a vákuumperem egy pontja és $\underline{n} \cdot \underline{\Omega} < 0$. Vagyis a bejövő irányokra a neutronfluxus értéke zérus [4]. Megjegyezzük, hogy itt a rendszer felületét konvexnek tételezzük fel.

A transzportegyenletnek analitikusan számítható megoldása néhány speciális esettől eltekintve nincsen. Általános esetben tehát, ha a transzportegyenlet megoldása a cél, közelítő módszereket alkalmazunk, az egyenlet egy közelítő változatát oldjuk meg numerikusan, determinisztikus módon [30]. Azonban nem csak determinisztikus számításokat végezhetünk a transzportegyenlet megoldására, hanem használhatunk ún. Monte Carlo módszert is. A Monte Carlo módszer lényege, hogy a neutronok sztochasztikus terjedését megfelelő valószínűségi változók sorsolásával szimuláljuk, és kellően sok részecsketörténet lejátszása után a modell egy változójának várható értékeként adódik a meghatározni kívánt mennyiség. A szimulációk számának növelésével az eredmény pontossága is növelhető, ennek értelmében úgy tekinthetünk a Monte Carlo

módszerekre, mint amelyek a transzportegyenlet közvetlen megoldására alkalmasak [23]. Ebben a tekintetben a Monte Carlo nem közelítő módszer. Mivel a dolgozat determinisztikus számításokkal foglalkozik, ezek fognak hangsúlyt kapni a továbbiakban, a Monte Carlo módszert nem tárgyaljuk.

A következőkben megismerkedünk a transzportszámítási módszerek egy fontos csoportosításával (elsőrendű, másodrendű és integrális módszerek), majd egyenként áttekintjük, hogyan kezelhetjük a neutrontranszport-egyenlet egyes változóit a determinisztikus számítások során.

2.1. Megoldási módszerek a transzportegyenlet alakja szerint

A transzportegyenlet megoldási módszereit kézenfekvő az alapján csoportosítani, hogy számításaink az egyenlet melyik alakjából indulnak ki. Az (1) egyenletet hívjuk a neutrontranszport-egyenlet differenciális alakjának, míg az integrális alakját a (5) egyenlet mutatja [32]:

$$\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \int_{-\infty}^s e^{-\Sigma_t(s' \rightarrow s)} Q(\underline{r}_0 + s' \underline{\Omega}, E, \underline{\Omega}, t_0 + \frac{s'}{v}) ds'. \quad (5)$$

A (5) egyenlet egyenértékű a transzportegyenlet differenciális alakjával, csak megfogalmazásában tér el tőle. Az integrális megfogalmazás alapja, hogy egy kiszemelt neutronnyaláb pályáját követjük végig. A t_0 kezdeti időpillanatban a nyaláb helykoordinátája $\underline{r}_0$, a helykoordináta és az idő ezek fényében a következőként paraméterezhető.

$$\underline{r} = \underline{r}_0 + s \underline{\Omega} \quad (6)$$

$$t = t_0 + \frac{s}{v} \quad (7)$$

Az integrandusban megjelenő $e^{-\Sigma_t(s' \rightarrow s)}$ tag a nyaláb gyengülését írja le, - a kitevőben szereplő mennyiséget optikai úthossznak nevezzük - $Q(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ pedig a forrástag. Látható, hogy az integrandust adott s paraméterig integrálva s' szerint a nyaláb pályája mentén megkapjuk a fázistér adott s paraméterhez tartozó pontjában a vektorfluxus értékét.

Az integrális módszerek a transzportegyenlet (5) egyenletben megadott alakjából indulnak el, ezt oldják meg különböző közelítésekkel, ellentétben az első- és másodrendű módszerekkel, amelyek a differenciális alakot használják fel. Az (1) egyenlet valójában már a neutrontranszport-egyenlet elsőrendű differenciális formája, míg az egyenlet leggyakrabban használt másodrendű formáihoz a szögfüggő fluxus páros- és páratlan fluxuskomponensekre való bontásán keresztül juthatunk el [21]. Itt megjegyezzük, hogy a számunkra releváns másodrendű forma, vagyis a páros paritású transzportegyenlet levezetésénél az energia- és az időfüggéssel nem foglalkozunk, továbbá izotróp szórási magfüggvényt és külső forrást tételezünk fel. Anizotrópia figyelembevételekor az egyenletek alakja bonyolódik [10]. Másik fontos megjegyzés, hogy a legszélesebb körben ismert és alkalmazott másodrendű módszer maga a diffúzió, amely azonos az általunk vizsgált páros paritású P_N közelítés $N = 1$ esetével.

Tekintve, hogy bármilyen határozott paritással nem rendelkező függvény előállítható páros és páratlan függvények összegeként, a neutronfluxust is felbonthatjuk egy páros és egy páratlan fluxuskomponensre:

$$\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \varphi^+(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) + \varphi^-(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t), \quad (8)$$

ahol $\varphi^+(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ páros és $\varphi^-(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t)$ páratlan fluxuskomponensek értelmezése a következő [29]:

$$\varphi^+(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \frac{1}{2}[\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) + \varphi(\underline{r}, E, -\underline{\Omega}, t)], \quad (9)$$

$$\varphi^-(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \frac{1}{2}[\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) - \varphi(\underline{r}, E, -\underline{\Omega}, t)]. \quad (10)$$

Az említett egyszerűsítésekkel élve (energiafüggetlenség, állandósult állapot, izotrópia) a transzportegyenlet a következő formában írható fel [3]:

$$\underline{\Omega} \nabla \varphi(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \Sigma_t(\underline{r}) \varphi(\underline{r}, \underline{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' + \frac{S(\underline{r})}{4\pi}. \quad (11)$$

A (11) egyenletet felírhatjuk mind az $\underline{\Omega}$, mind az ellentétes $-\underline{\Omega}$ irányra, ekkor két egyenletet kapunk. Az $\underline{\Omega}$ és a $-\underline{\Omega}$ irányokra vonatkozó egyenleteket összeadva, illetve kivonva egymásból, majd a páros és páratlan fluxuskomponensek definícióját kihasználva az alábbi egyenletekre jutunk.

$$\underline{\Omega} \nabla \varphi^-(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^-(\underline{r}, \underline{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^-(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' + \frac{S(\underline{r})}{4\pi} \quad (12)$$

$$\underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = 0 \quad (13)$$

Látható, hogy a (12) és (13) egyenletek vegyesen tartalmazzák a páros és páratlan fluxuskomponenseket. Amennyiben kifejezzük a (13) egyenletből a páratlan komponenst, majd ezt visszahelyettesítjük a (12)-be, kapunk egy egyenletet, amely csak a páros fluxuskomponensre vonatkozik. Ezt hívjuk páros paritású transzportegyenletnek [34].

$$-\underline{\Omega} \nabla \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' + \frac{S(\underline{r})}{4\pi} \quad (14)$$

Ha viszont a páros komponens kerül kifejezésre a (12) egyenletből, majd visszahelyettesítésre a (13)-ba, az ún. páratlan paritású egyenletre jutunk, amely már csak a páratlan fluxuskomponenst tartalmazza.

Az így származtatott páros és páratlan paritású egyenlet már másodrendű egyenlet, a neutrontranszport-egyenlet másodrendű megfogalmazásai. Meg kell említeni, hogy hasonló szerkezetű egyenletet lehet felírni magára a szögfüggő fluxusra is [14]. Megállapítható, hogy a kapott egyenletek szerkezete különbözik az elsőrendű transzportegyenlettől, az előbbieket elliptikusak, az utóbbi pedig hiperbolikus egyenlet. A valódi különbségek a kifolyási tag eltéréséből adódnak; míg az elsőrendű transzportegyenlet kifolyási tagja egy térbeli deriválást tartalmaz, addig a másodrendűeké kettőt. Ez okozza, hogy a másodrendű egyenletekből numerikus számítások során felállított globális együttható mátrix alapból szimmetrikus, - a peremfeltételek alkalmazása ezt megváltoztathatja - diffúzióegyenlethez hasonló szerkezetű, így nagy hatékonysággal oldható meg numerikusan [10].

Az egyenlet szimmetriájának és az ebből fakadó numerikus előnyöknek ellenére a másodrendű formalizmusnak is van hátránya. Hogy példát említsünk, a kifolyási tagban szereplő $\frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})}$ miatt az egyenlet használhatósága korlátozott, kis totális hatáskeresztmetszetű közeg esetén (pl. vákuum) nem alkalmazható [21]. Továbbá a másodrendű módszerek általánosságban szenvednek ugyanattól a dologtól, mint amitől a leggyakrabban használt másodrendű módszer, a diffúziós közelítés is; amennyiben a fluxus helyfüggése erős, nem adnak olyan megbízható eredményeket, mint az elsőrendű vagy integrális módszerek.

Jelen dolgozat a páros paritású transzportegyenlet megoldásával foglalkozik egy kiválasztott transzportközelítés, a P_N módszer esetében, amely a fluxus gömbharmonikusokkal való kifejtésén alapul. Az egyenlet megoldását egy általam felállított végeselem-kód valósítja meg, amely a DEEP-END nevet viseli. A DEEP-END betűszó a *Demonstrative EvEn Parity P_N code* kifejezést rövidíti. A következő alfejezetekben egyenként bemutatom, hogy ez a reaktorfizikai kód milyen módon kezeli a vektorfluxus irány-, tér-, energia- és időfüggését.

2.2. Irányfüggés

A neutrontranszport-egyenlet megoldásának egyik sarkalatos kérdése, hogy a szögfüggő fluxus irányfüggését milyen módon írjuk le. A fluxus irányfüggésének kezelésére szolgáló különböző módszereket transzportközelítéseknek hívjuk [30]. A dolgozat szempontjából számunkra az ún. P_N módszer és a diffúziós közelítés releváns. Ezeket nézzük át részletesebben a következőkben. Az időfüggést mindkét közelítés levezetésekor mellőzzük, időfüggetlen esetet feltételezünk, valamint izotróp forrástagot.

2.2.1. Diffúziós transzportközelítés

A diffúziós transzportközelítés a legismertebb és egyben leggyakrabban használt transzportközelítés, levezetése is több módon lehetséges [32]. Itt azt a levezetést fogom szerepeltetni, amely számunkra a legszemléletesebben mutatja a diffúziós és a páros paritású P_N közelítés kapcsolát. Diffúziós közelítés esetén úgy küszöböljük ki a fluxus szögfüggését, hogy azt irány szerint sorba fejtjük.

$$\varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} \Phi(\underline{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \underline{\Omega} \underline{J}(\underline{r}, E, t) + \dots \quad (15)$$

A sorfejtést csak a második tagig bezárólag végezzük el, amely egyben meg is határozza, hogy a diffúzió csak lineáris anizotópiát képes leírni. A sorfejtésben megjelenő $\Phi(\underline{r}, E, t)$ mennyiség a skalárfluxus, $\underline{J}(\underline{r}, E, t)$ pedig a neutronáram; származtatásuk a következő:

$$\Phi(\underline{r}, E, t) = \int_{4\pi} \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) d\underline{\Omega}, \quad (16)$$

$$\underline{J}(\underline{r}, E, t) = \int_{4\pi} \underline{\Omega} \varphi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}, t) d\underline{\Omega}. \quad (17)$$

Ha integrálok a (1) transzportegyenletet $\underline{\Omega}$ szerint a 4π tartományon, eljutok egy egyenletre, amely a skalárfluxusra van felírva, de kifolyási tagjában még tartalmazza a neutronáramot. Másfelől integrálhatom az (1) egyenlet $\underline{\Omega}$ -szorosát is ugyanezen a tartományon ugyanezen változó szerint, ezúttal pedig olyan egyenletet kapok eredményül, amely a neutronáramra vonatkozik, de a kifolyási tagjában megjelenik a skalárfluxus.

$$\nabla \underline{J}(\underline{r}, E) + \Sigma_t(\underline{r}, E) \Phi(\underline{r}, E) = Q(\underline{r}, E) \quad (18)$$

$$\frac{1}{3} \nabla \Phi(\underline{r}, E) + \Sigma_t(\underline{r}, E) \underline{J}(\underline{r}, E) = 0 \quad (19)$$

A (18) egyenletben $Q(\underline{r}, E)$ az általános izotróp forrást jelenti. Hasonlóan eljárva, mint a 2.1. alfejezetben, kifejezzük a neutronáramot a (19) egyenletből, majd a skalárfluxusra felírt egyenletbe visszahelyettesítjük azt. Így eljutottunk egy olyan alakra, amely csak a skalárfluxust tartalmazza; ezt nevezzük diffúzióegyenletnek [12].

$$-\nabla \frac{1}{3\Sigma_t(\underline{r}, E)} \nabla \Phi(\underline{r}, E) + \Sigma_t(\underline{r}, E) \Phi(\underline{r}, E) = Q(\underline{r}, E) \quad (20)$$

A (19) egyenletre Fick-törvényként hivatkoznak általában, ez a törvény írja le a neutronáram és a skalárfluxus gradiense közötti összefüggést. A kifolyási tagban megjelenő $\frac{1}{3\Sigma_t(\underline{r}, E)}$ mennyiséget diffúzióállandónak nevezzük, és $D(\underline{r}, E)$ -ként jelöljük. Az is megjegyzendő, hogy időfüggő egyenleteket felírva az említett kiküszöbölés csak akkor tehető meg, ha eltekinthetünk a neutronáram időderiváltjától.

A diffúzióegyenlet peremfeltételeit a parciális áramok segítségével fogalmazhatjuk meg. A rendszer határának minden $\underline{r} \in \Gamma_b$ pontjára felírhatunk egy kimenő, illetve egy bejövő parciális áramot, amelyek összege megadja az adott pontban a nettó áramot:

$$\underline{J} \cdot \underline{n} = \underline{J}_+ + \underline{J}_-, \quad (21)$$

ahol $\underline{n}$ a perem adott $\underline{r}_b$ pontjában vett felületi normálisa, $\underline{J}_+$ és $\underline{J}_-$ pedig a kimenő és bejövő parciális áramok. Szimmetriaperem esetén a két parciális áram egyenlőségét írjuk elő, míg vákuum peremfeltétel előírásakor a $\underline{J}_-(\underline{r}) = 0$ feltételnek kell teljesülnie [32].

Mint említettük a másodrendű módszereknél is, a diffúzióegyenlet már könnyen kezelhető, szerkezete numerikusan igen kedvező, ennek ellenére alkalmazhatóságának komoly korlátai vannak. Olyan esetekben, amikor a fluxus és a források erősen helyfüggőek, vagy jelentős mértékű abszorpció áll fenn, nem ad megfelelő eredményt. Gyakorlatban tehát nagy homogén rendszerek belsejének, abszorbensektől és a határfelületekről távol eső régiók számításakor alkalmazzuk [12].

2.2.2. Páros paritású P_N transzportközelítés

A P_N transzportközelítés alapja, hogy mind a szögfüggő fluxust, mind a szórási magfüggvényt kifejtethetjük harmonikus gömbfüggvények segítségével. Ezt a módszert nem csak a reaktorfizikában, de más tudományterületeken is gyakran alkalmazzák; irányfüggés leírására egy bevett technikaként tartjuk számon. Jelen esetben a transzportegyenlet másodrendű, páros paritású formájára alkalmazzuk. Az irányfüggés leírására választhatunk komplex vagy valós értékű gömbfüggvényeket, ezeket is az alkalmazás céljának megfelelő normalizációban. Munkám során én valós értékű ortonormált bázist alkotó gömbharmonikusokkal dolgoztam. Ebben az esetben egy tetszőleges l rendű, m momentumú valós értékű gömbfüggvény az alábbi formát ölti.

$$\begin{aligned} Y_l^m(\theta, \phi) = & \\ & (-1)^{|m|} \sqrt{2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \sin(|m|\phi) \leftarrow m < 0 \\ & \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l^m(\cos\theta) \leftarrow m = 0 \\ & (-1)^m \sqrt{2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \cos(m\phi) \leftarrow m > 0 \end{aligned} \quad (22)$$

A harmonikus gömbfüggvények (22) egyenletben felírt változatának alkalmazásakor egységi normalizációt kapunk, ortonormált bázisban dolgozunk, amely a következőt jelenti:

$$\int_{4\pi} Y_l^m(\underline{\Omega}) Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (23)$$

vagyis két tetszőleges gömbfüggvény szorzatának a teljes térszögtartományon vett integrálja minden esetben zérus, kivéve, ha az adott l rendű, m momentumú gömbfüggvényt önmagával vett szorzatáról van szó, ekkor a kifejezés értéke 1 [34]. Nagyon fontos megjegyezni, hogy ez a normalizáció eltér a reaktorfizikában használt normalizációtól, ahol a gömbfüggvényeket a

következő alakban írják fel [33]:

$$\begin{aligned}
Y_l^{m*}(\theta, \phi) = & \\
& (-1)^{|m|} \sqrt{2} \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \sin(|m|\phi) \leftarrow m < 0 \\
& P_l^m(\cos\theta) \leftarrow m = 0 \\
& (-1)^m \sqrt{2} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \cos(m\phi) \leftarrow m > 0,
\end{aligned} \tag{24}$$

ez pedig az alábbi normalizációra vezet:

$$\int_{4\pi} Y_l^{m*}(\underline{\Omega}) Y_{l'}^{m'*}(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \tag{25}$$

A $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$ esetében a $*$ hivatott jelölni, hogy nem a munkánk során alkalmazott, hanem a reaktorfizikában használatos normalizációnak megfelelő gömbfüggvényekről van szó. Annak érdekében, hogy számításaink során valós reaktorfizikai mennyiségeket kapjunk, az eredményeket vissza szükséges váltani a (24) egyenletben megjelenő bázisba. A két bázis közötti átjárást a (26) egyenlet mutatja.

$$Y_l^{m*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^m(\theta, \phi) \tag{26}$$

A gömbfüggvények bemutatása után nézzük meg, hogyan fejezhető ki a szögfüggő fluxus és a szórási magfüggvény a P_N közelítésben. Mivel a P_N közelítést a páros paritású egyenletre alkalmazzuk, valójában a páros fluxuskomponenst fejtjük ki a gömbharmonikusokkal. A sorfejtésben a gömbfüggvényeknél használatos l - m indexelést alkalmazzuk, illetve a sorfejtésnek csak a páros l rendekre vonatkozó tagjait tekintjük a választott transzportszámítási módszer értelmében. Kiemeljük, hogy az elsőrendű P_N közelítést csak páratlan N -ekre használjuk [33]. Ez a páros paritású formalizmusban annyit tesz, hogy a kifejtést az $L = N - 1$ rendig bezárólag végezzük el.

$$\varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}), \tag{27}$$

$$\Sigma_s(\underline{r}, \underline{\Omega}\underline{\Omega}') = \sum_{\substack{l''=0 \\ \text{even}}}^{L''} \Sigma_{sl''}(\underline{r}) \sum_{m''=-l''}^{l''} Y_{l''}^{m''}(\underline{\Omega}) Y_{l''}^{m''}(\underline{\Omega}') \delta_{l''=0}, \tag{28}$$

Látható, hogy amennyiben a fenti sorfejtéseknél $L' \rightarrow \infty$ és $L'' \rightarrow \infty$, visszakapnánk a valós vektorfluxust és szórási magfüggvényt, ám a valóságban ezt csak bizonyos L' és $L'' \leq L'$ értékig bezárólag végezzük el. Az is fontos, hogy bár a szórási magfüggvény általános kifejtése a (28) egyenlet szerint alakul, mi csak izotróp esetet tekintünk, így sokkal egyszerűbb formában írhatjuk fel $\Sigma_s(\underline{r}, \underline{\Omega}\underline{\Omega}')$ -t:

$$\Sigma_s(\underline{r}, \underline{\Omega}\underline{\Omega}') = \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi}; \tag{29}$$

ezt az összefüggést már a páros paritású egyenlet származtatásánál is kihasználtuk [3]. Ebben az alfejezetben a transzportegyenlet irányfüggésével foglalkozunk, így célszerű lenne csak az $\underline{\Omega}$ tekintetében vizsgálni az egyenletet. Ám ahhoz, hogy a páros paritású egyenlet peremfeltételeit be tudjuk vezetni, előbb a térváltozó szerint kell alakítanunk az egyenletet. Elsőként a páros paritású egyenletet beszorozzuk egy $\underline{r}$ -függő tesztfüggvénnyel, majd integráljuk a

vizsgált rendszer teljes térfogatára [2].

$$\begin{aligned} \int_V w(\underline{r}) \underline{\Omega} \nabla \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \int_V \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} = \\ = \int_V \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{4\pi} d\underline{r} \end{aligned} \quad (30)$$

Ezután alkalmazzuk a (30) egyenletre a Gauss-tételt.

$$\begin{aligned} \int_{\delta V} w(\underline{r}) (\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \int_V \underline{\Omega} \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \\ + \int_V \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} = \int_V \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{4\pi} d\underline{r} \end{aligned} \quad (31)$$

Látható, hogy a Gauss-tételt követően az egyenlet szimmetriája megbomlik a felületi tag integrandusának aszimmetriája miatt. Az egyenlet szimmetriája azonban mégis megtartható, ha kihasználjuk a páros paritású egyenlet vákuum peremfeltételét. Ezt a következőkben röviden bemutatjuk. A vákuum peremfeltételt fontos még a szög szerinti diszkretizáció előtt bevezetni az egyenletbe, mivel a diszkretizált alakban ez már csak nagy nehézségek árán tehető meg úgy, hogy megőrizzük a egyenlet szimmetriáját [10].

A páros paritású egyenlet vákuum peremfeltétele a transzportegyenlet elsőrendű peremfeltételéből, a (4) egyenletből indul ki. Tehát azt írjuk elő, hogy a teljes szögfüggő fluxus, azaz a páros és páratlan fluxuskomponensek össze a perem egy $\underline{r}$ pontjában a bejövő $\underline{\Omega}$ irányokra nulla legyen [24]:

$$\varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \varphi^-(\underline{r}, \underline{\Omega}) = -\frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) + \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = 0, \quad (32)$$

ha $\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega} < 0$. A másodrendű módszerek peremfeltételeinek származtatásánál fontos kiemelni, hogy nem csak a bejövő, de a kimenő $\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega} > 0$ irányokra is kiterjeszthetjük a peremfeltételt, felhasználva a páros paritású fluxuskomponens párosságát. A kimenő irányokra (32)-hez hasonló egyenlet írható fel.

$$-\frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) - \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = 0, \quad (33)$$

A (32) és (33) egyenleteket megfogalmazhatjuk egy egyenletként is, ekkor pedig az előállított feltétel az adott felületi pontban minden $\underline{\Omega}$ irányra vonatkozik:

$$(\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) = |\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}| \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}). \quad (34)$$

Ennek a felhasználásával átírhatjuk a (31) egyenletet úgy, hogy az már csak szimmetrikus tagokat tartalmazzon, azaz az egyenletrendszer szimmetriáját helyreállítjuk [2].

$$\begin{aligned} \int_{\delta V} w(\underline{r}) |\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}| \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \int_V \underline{\Omega} \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \\ + \int_V \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} = \int_V \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{4\pi} d\underline{r} \end{aligned} \quad (35)$$

Tehát egyfelől biztosítottuk, hogy a megoldandó egyenletrendszer szimmetrikus maradjon a későbbi térbeli diszkretizáció során is, másfelől pedig belefoglaltuk az egyenletbe a vákuum peremfeltételt. Ha az adott $\underline{r}$ koordináta nem a vákuumperem egy pontja, úgy a (35) egyenlet felületi integráljának értéke ott nulla.

Az fenti átlakítások után visszatérhetünk az irányfüggés kérdésére. Ha a (27) és (29) sorfejtést visszahelyettesítjük a (35) páros paritású egyenletbe, majd az egyenletet egy $Y_l^m(\Omega)$ tesztfüggvénnyel beszorozva integráljuk a 4π tartományon, a következőre juthatunk.

$$\begin{aligned}
& \int_{\delta V} w(\underline{r}) \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} \int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega) |\underline{n}(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} + \\
& + \int_V \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \nabla \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} \int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega) \underline{\Omega} \underline{\Omega} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} + \\
& + \int_V w(\underline{r}) \Sigma_t(\underline{r}) \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} \int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega) Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} = \quad (36) \\
& = \int_V w(\underline{r}) \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} \int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega') d\underline{\Omega}' \int_{4\pi} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} + \\
& \quad + \int_V \frac{S(\underline{r})}{4\pi} d\underline{r} \int_{4\pi} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega}
\end{aligned}$$

Ezt a származtatási módot Galerkin-módszernek hívjuk, és jelen esetben a szögváltozóra alkalmaztuk. Látható, hogy a (36) egyenletet már csoportosítottuk irány-, és helyváltozók szerint, a következőkben pedig az egyenletben megjelenő szög szerinti integrálokat tárgyaljuk kicsit részletesebben, mivel ezeknek az értelmezése magyarázatra szorulhat. A reakcióban való eltűnést leíró tagnál az integrál értékét a gömbfüggvényekre vonatkozó ortogonalitási reláció adja meg. Ez az integrál valójában kívágya számunkra az adott l rendű és m momentumú egyenletet a sorfejtésből.

$$\int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega) Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (37)$$

Mivel az egyes gömbfüggvények teljes térszögtartományon vett integrálja zérus az $l = 0, m = 0$ eset kivételével, ezért szórási és külső forrás kizárólag az $Y_0^0(\underline{\Omega})$ -ra vonatkozó egyenletben jelenik meg. Ez nem meglepő, hiszen izotróp forrást és szórási magfüggvényt tételeztünk fel.

$$\int_{4\pi} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} = \sqrt{4\pi} \delta_{l=0} \delta_{m=0} \quad (38)$$

$$\int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega') d\underline{\Omega}' \int_{4\pi} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} = 4\pi \delta_{l=0} \delta_{m=0} \delta_{l'=0} \delta_{m'=0} \quad (39)$$

A felületi és térfogati kifolyási tagokban megjelenő integrálok kevésbé egyértelműek. A térfogati kifolyási tagra vonatkozó integrál valójában egy 3×3 mátrix adott $lm-l'm'$ párosításokra vonatkozóan, amely két dimenziója mentén végigmegy az egyes iránykomponenseken [35].

$$\int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\Omega) \underline{\Omega} \underline{\Omega} Y_l^m(\Omega) d\underline{\Omega} = \underline{\underline{A}}_{lm}^{l'm'} \quad (40)$$

Minden $l'm'-lm$ párosításra létezik egy ilyen mátrix, tehát az $\underline{\underline{A}}_{lm}^{l'm'}$ együtthatókból felépíthető egy négydimenziós szimmetrikus hipermátrix. A felületi kifolyási tag szög szerinti integráljában furcsa módon megjelenik egy helyfüggő mennyiség, még pedig a felületi normálvektor. A változók szétválasztása és a kifejezés szög szerinti integrálása mégis megtehető a későbbiekben

bemutatásra kerülő végeelem-módszer környezetén belül. A lényeg, hogy amikor a vizsgált térszert felbontjuk végeelemekre, akkor a rendszer felülete is szétesik ilyen módon véges számú kisebb felületre, amelyekre a felületi normális már egyenként számolható, és kvázi állandónak tekinthető. Ilyen módon adott felületi elemre vonatkozóan a normálist már nem tekintjük helyfüggőnek, és a keresett $\underline{\Omega}$ szerinti integrál már számítható.

$$\int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) |n(\underline{r}) \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = B_{lm}^{l'm'} \quad (41)$$

A $B_{lm}^{l'm'}$ tehát bizonyos szempontból függ $\underline{r}$ -től, mivel minden felületi elemre elő kell állítani. Ha a $B_{lm}^{l'm'}$ kifejezésekből előállítunk egy mátrixot a lehetséges $lm-l'm'$ párosításokra vonatkozóan, szintén szimmetrikus mátrixot kapunk.

A fenti (37) - (41) egyenleteket kihasználva eljuthatunk az időfüggetlen izotróp forrásos páros paritású P_N egyenletekre. Egy kiválasztott l rendre és m momentumra vonatkozóan ez az alábbi (42) egyenlet szerint alakul.

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} B_{lm}^{l'm'} \int_{\delta V} w(\underline{r}) \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \underline{A}_{lm}^{l'm'} \int_V \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \nabla \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \\ + \int_V w(\underline{r}) \Sigma_t(\underline{r}) \varphi_{lm}^+(\underline{r}) d\underline{r} = \int_V w(\underline{r}) \Sigma_s(\underline{r}) \varphi_{00}^+(\underline{r}) \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r} \end{aligned} \quad (42)$$

Szemléletesebb és áttekinthetőbb azonban az egyenlet, ha a peremfeltétel alkalmazása nélkül írjuk fel az egyenletet, és a (14) páros paritású egyenletre közvetlenül alkalmazzuk a Galerkin-módszert $\underline{\Omega}$ szerint. Ekkor a következő alakban kapjuk meg a páros paritású P_N egyenleteket:

$$\begin{aligned} - \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) \underline{A}_{\alpha\beta}^{l'm'} + \Sigma_t(\underline{r}) \varphi_{lm}^+(\underline{r}) = \\ = \Sigma_s(\underline{r}) \varphi_{00}^+(\underline{r}) \delta_{l=0} \delta_{m=0} + \frac{S(\underline{r})}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0}, \end{aligned} \quad (43)$$

ahol a kifolyási tag már egy irány szerint is szétírt formában jelenik meg.

Ha tüzetesebben megvizsgáljuk a fenti egyenletet, látható, hogy a páros paritású P_N egyenlet valójában egyenértékű a diffúzióegyenlettel, amennyiben a kifejtési rendnek $N = 1$ -et választjuk. Ekkor egyetlen egyenletünk van, amely a $Y_0^0(\underline{\Omega})$ fluxuskomponensre vonatkozik. Ez a fluxuskomponens a normálizációtól eltekintve maga a skalárfluxus, ha pedig a két bázis közötti átváltást elvégezzük, egzaktul visszaadja azt.

Vissza kell térnünk végül a peremfeltételek témakörére, mivel eddig csupán a vákuum peremfeltétel került bemutatásra, a reflektív perem viszont nem. A reflektív perem a páros paritású P_N módszerben egy ún. esszenciális peremfeltétel [10]. Ez azt jelenti, hogy a szimmetriaperem jelen esetben nem felületi integrálokban vagy éppen ezek hiányában valósul meg, hanem magára az alkalmazott tesztfüggvényre írjuk elő a megfogalmazott feltételeket. A reflektív peremen lévő $\underline{r}$ pontban elvárjuk, hogy a fluxus azonos legyen az $\underline{\Omega}$ és annak reflektált $\underline{\Omega}'$ irányára. Ha a páros paritású P_N formalizmusban akarjuk ezt megfogalmazni, akkor a következőre jutunk [1]:

$$\underline{\varphi}^+(\underline{r}) \underline{Y}^T(\underline{\Omega}) = \underline{\varphi}^+(\underline{r}) \underline{Y}^T(\underline{\Omega}'), \quad (44)$$

ahol $\underline{r}$ a szimmetriaperem egy pontja, $\varphi^+(\underline{r})$ a fluxuskomponensek helyfüggő együtthatóiból képzett vektor, $\underline{Y}^T(\underline{\Omega})$ pedig az adott kifejtéshez felhasznált gömbharmonikusok vektora. Ebből a feltételből az adott pontra vonatkozóan felállíthatunk egy ún. megszorítási mátrixot, amely előírja, hogy az egyes fluxuskomponensek között milyen viszonyoknak kell teljesülnie ahhoz, hogy a (44) összefüggés igaz legyen [36].

A páros paritású P_N egyenlet megoldásával foglalkozunk tehát a továbbiakban, ami egyenértékű azzal, hogy egy válaszott L kifejtési rendhez felírunk minden lehetséges lm párosításra egy (43) típusú egyenletet, majd az ezekből álló egyenletrendszeret oldjuk meg tetszőleges térbeli diszkretizációval. A páros paritású P_N transzportszámítási módszer előnyeiről és hátrányairól, alkalmazhatóságának korlátairól már átfogóan beszéltünk a 2.1. alfejezetben. A dolgozat során azonban elő fognak kerülni olyan numerikus kihívások is, amelyekkel a páros paritású P_N egyenletek konkrét reaktorfizikai kódba való implementálásakor találkozhatunk.

2.3. Energiafüggés

A transzportegyenlet energiafüggését nem explicit módon kezeljük, szinte minden esetben többszoport módszert alkalmaznak az energiaváltozó kezelésére. A módszer lényegét röviden, a hatáskeresztmetszet-feldolgozás gyakorlati részletei nélkül, az energiaváltozóra fókuszálva mutatjuk be. Tudjuk, hogy nem csak a neutronfluxus, de maguk a hatáskeresztmetszetek is energiafüggő mennyiségek, értékük jellegzetesen a $0 - 20\text{MeV}$ teljes energiatartományon változhat. Az első lépésben ezt az energiatartományt osztjuk fel G számú kisebb intervallumra a következőképpen:

$$(0\text{MeV} =)E_G < E_{G-1} < \dots < E_1 < E_0 (= 20\text{MeV}), \quad (45)$$

ahol a g . energiacsoport alatt a $E_g < E < E_{g-1}$ energiájú neutronokat értjük. Meghatározhatunk minden energiaintervallumra egy ún. csoportfluxust, illetve a hatáskeresztmetszetek az egyes csoportokban kvázi mint súlyozott átlagok állíthatók elő [12].

$$\varphi^g(\underline{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(\underline{r}, E) dE \quad (46)$$

$$\Sigma_x^g(\underline{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_x(\underline{r}, E) \varphi(\underline{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(\underline{r}, E) dE} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_x(\underline{r}, E) \varphi(\underline{r}, E) dE}{\varphi^g(\underline{r})} \quad (47)$$

A fenti (47) egyenletben a $\Sigma_x(\underline{r}, E)$ kifejezés egy tetszőleges reakcióra vonatkozó hatáskeresztmetszetet jelöl. Vagyis minden energiacsoportra előállíthatunk az adott intervallumon konstansnak tekinthető hatáskeresztmetszeteket, ezeket nevezzük csoportállandóknak. Megállapítható, hogy a származtatási mód, amelyet leírtunk a csoportállandókra, általánosságban igaz csak, bizonyos esetekben ezek ettől eltérő módon számíthatók. Jó példa erre a szórás mátrix elemeinek származtatása.

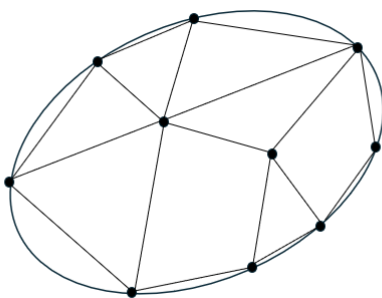
A többszoport módszer veleje, hogy egy energiafüggő egyenlet helyett több energiafüggetlen egyenlet rendszerét oldjuk meg, amelyek bizonyos módon csatolva vannak egymáshoz. Az energiacsoportokra vonatkozó egyenletek a szórás és a hasadáson keresztül csatolódnak. Az energiaváltozó kezelése a DEEP-END kódrendszerben is többszoport módszerrel történik.

2.4. Helyfüggés

A neutrontranszport-egyenlet térfüggésének kezelésére számos különböző, jól kidolgozott módszer közül választhatunk. Különböző nodális, végesdifferencia- és végeelem-módszerek állnak

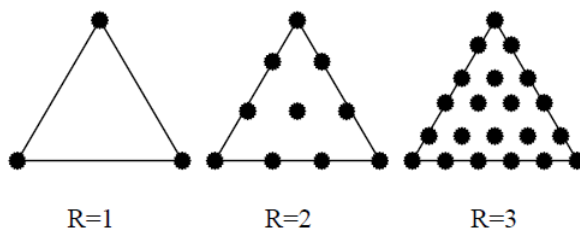
rendelkezésünkre, amelyek nem csak a neutrontranszport számítások és a reaktorfizika területén elterjedtek, hanem a számítógépes fizika teljes világában bevett módszereknek számítanak. Mi azonban most speciálisan a végelelem-módszerrel fogunk foglalkozni, mivel a felállított kódrendszer ezt alkalmazza térbeli diszkretizációként.

A végelelem-módszer kiindulási pontja, hogy a kiválasztott egyenlet megoldását nem a vizsgált térrészre vonatkozóan egyetlen függvényként keresi [11], hanem a teljes geometriát kisebb tartományokra, ún. végelelemekre bontja ((1) ábra).



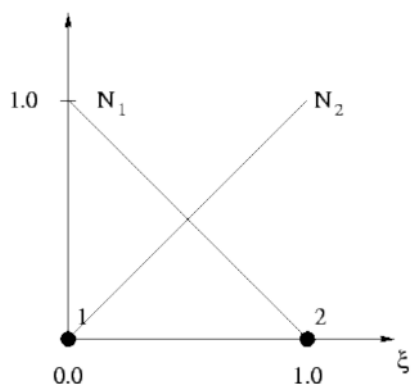
1. ábra. Vizsgált térfogat felosztása végelelemekre

Ezek az elemek belül pedig úgy keressük a megoldásfüggvényt, hogy azt az elemek egyes kitüntetett pontjaiban vett függvényértékeivel közelítjük. Ezeket a kitüntetett pontokat nódusoknak hívjuk. Általában sokszögeket alkalmazunk végelelemként, így célszerű a nódusokat a csúcsokban, élek találkozásánál definiálni, de ez nem törvényszerű. Amennyiben csak a találkozási pontokban vannak nódusok, úgy elsőrendű elemekről beszélünk. Meghatározhatunk viszont csúcsokat akár az éleken is, vagy az elem térfogatán belül bizonyos pontokban; ezek már magasabb rendű végelelemek. Jól szemlélteti a különböző rendű végelelemeket a (2) ábra.



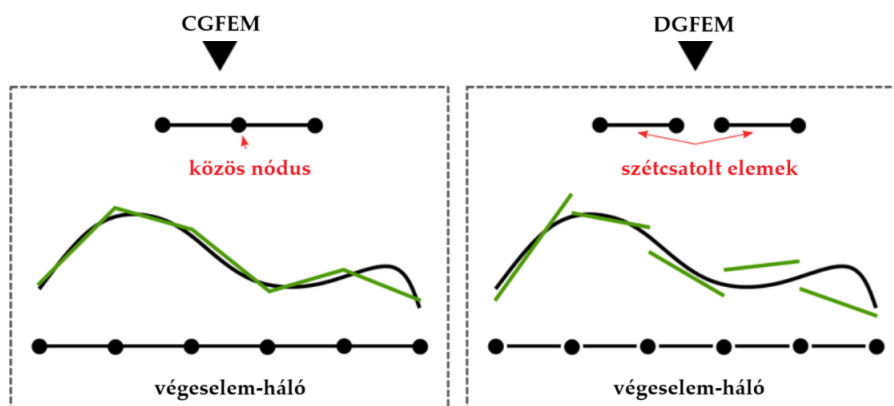
2. ábra. Első- és magasabb rendű háromszögelemek [29]

A végelelemen belül is többféle módon közelíthetjük a megoldásfüggvényt, de jellemzően ez a nódusbeli függvényértékek valamilyen interpolációjaként számítható. Az interpolációs függvények közül itt egyet emelünk ki, mivel az elkészített reaktorfizikai kódba is ez került implementálásra. A kód elsőrendű elemekkel dolgozik, az elemeken belül pedig Lagrange-bázist alkalmaz. Ez a bázisfüggvény-készlet olyan tulajdonságú, hogy minden nódushoz definiál egy interpolációs függvényt, amelynek az értéke az adott nódusban 1, minden más nódusban pedig zérus [10], szemléltetésére a (3) ábra szolgál.



3. ábra. Lagrange-bázis szemléltetése egy elsőrendű vonalelemre

Fontos kiemelni, hogy egy nódus több elemet is határolhat. Ha azt írjuk elő, hogy az elemek közötti nódus függvényértéke meg kell egyezzen minden azzal kapcsolatban lévő elemre, akkor folytonos végelem-módszerről (CGFEM) beszélünk. Ha ez az eltérés megengedett, és minden elem különböző függvényértéket definiálhat az adott nódusban, akkor szakadáson végelem-módszerről (DGFEM) beszélünk [11]. A kettő közötti különbséget hivatott bemutatni a (4) ábra. A dolgozat keretein belül készített reaktorfizikai kódok folytonos végelem-módszerrel dolgoznak.



4. ábra. A CGFEM és a DGFEM szemléltetése egydimenziós példán

Nagyon fontos továbbá, hogy amikor az egyes végelemekre vonatkozóan végzünk számításokat, nem a valós, hanem egy ún. referenciatérben dolgozunk, az eredményeket pedig vissza-transzformáljuk a valós térbe. A két tér közötti transzformációt szintén a választott bázisfüggvények segítségével írhatjuk fel [11].

A megoldani kívánt diffúzióegyenlet, illetve páros paritású P_N transzportegyenlet megoldásánál célunk, hogy gyenge egyenleteket állítsunk elő. Úgy hozhatjuk ezeket gyenge alakra, hogy a vizsgált változót kifejtjük bizonyos bázisfüggvények szerint, majd az egyenlet egy tesztfüggvényeszeresét integráljuk a számunkra releváns tartományon. Az tesztfüggvény-készlet esetünkben megegyezik a bázisfüggvények készletével. A 2.2. alfejezetben valójában már elvégeztünk egy Galerkin-módszert nem csak a szög-, de az r változó szerint is a páros paritású P_N egyenlet

peremfeltételeinek tárgyalásakor, amely előállította számunkra a kívánt gyenge egyenletet.

$$\begin{aligned} \int_V w(\underline{r}) \underline{\Omega} \nabla \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \underline{\Omega} \nabla \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} + \int_V \Sigma_t(\underline{r}) \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}) d\underline{r} = \\ = \int_V \frac{\Sigma_s(\underline{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \varphi^+(\underline{r}, \underline{\Omega}') d\underline{\Omega}' d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{4\pi} d\underline{r} \end{aligned} \quad (48)$$

A (48) egyenlet felületi integrált már tartalmazó, szögben diszkrétizált alakját használjuk fel a végeselemes formalizmus bemutatására. Tehát a kiinduló egyenletünk az alábbi:

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} B_{lm'}^{l'm'} \int_{\delta V} w(\underline{r}) \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \underline{A}_{lm'}^{l'm'} \int_V \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \nabla \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \\ + \int_V w(\underline{r}) \Sigma_t(\underline{r}) \varphi_{lm}^+(\underline{r}) d\underline{r} = \int_V w(\underline{r}) \Sigma_s(\underline{r}) \varphi_{00}^+(\underline{r}) \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r} + \int_V \frac{S(\underline{r})}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r}. \end{aligned} \quad (49)$$

Ez az egyenlet a teljes geometriára van integrálva, utóbbi viszont előállítható az egyes végeselemek térfogatainak összegeként: $V = \sum_e V_e$. Ennek értelmében a kapott gyenge egyenleteket nem a teljes térfogaton integrálva oldjuk meg, hanem ahogyan már említettük, végeselem-módszerrel keressük a megoldásfüggvényt.

$$\begin{aligned} \sum_e \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} B_{lm'}^{l'm'} \int_{\delta V_e} w(\underline{r}) \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \\ + \sum_e \sum_{\substack{l'=0 \\ even}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \underline{A}_{lm'}^{l'm'} \int_{V_e} \nabla w(\underline{r}) \frac{1}{\Sigma_t(\underline{r})} \nabla \varphi_{l'm'}^+(\underline{r}) d\underline{r} + \sum_e \int_{V_e} w(\underline{r}) \Sigma_t(\underline{r}) \varphi_{lm}^+(\underline{r}) d\underline{r} = \\ = \sum_e \int_{V_e} w(\underline{r}) \Sigma_s(\underline{r}) \varphi_{00}^+(\underline{r}) \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r} + \sum_e \int_{V_e} \frac{S(\underline{r})}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} d\underline{r} \end{aligned} \quad (50)$$

Ezután hajtjuk végre a páros paritású fluxus kifejtését egy válaszott bázisfüggvény-készletre:

$$\varphi^+(\underline{r}) = \sum_j \varphi_j^+ a_j(\underline{r}), \quad (51)$$

ahol a j index végigmegy a globális nódusokon, a j globális nódushoz tartozó bázisfüggvényt pedig $a_j(\underline{r})$ -ként jelöltük. Fontos tulajdonsága ezeknek a globális bázisfüggvényeknek, hogy csak az adott nódussal szomszédos elemekben vesznek fel nem-nulla értéket, emiatt ezeket sátorfüggvényekként is említik. A globális bázisfüggvények ugyanakkor felírhatók az egyes végeselemek bázisfüggvényeinek segítségével is, pontosabban az összes végeselem összes bázisfüggvényének lineáris kombinációjaként az alábbi módon:

$$a_j(\underline{r}) = \sum_e \sum_{n \in N_j^e} h_e^n(\underline{r}), \quad (52)$$

ahol az n index végigfut az adott elem azon nódusain, amik a j indexű globális bázisfüggvényhez hozzájárulást okozhatnak [11]. Az (51) és (52) visszahelyettesítésével, majd az egyenlet

átrendezésével eljuthatunk a páros paritású P_N egyenlet térben diszkrétizált, végeselemes formalizmusnak megfelelő alakjára.

$$\begin{aligned}
& \sum_e \sum_{f \in \hat{F}_e} \sum_{e'} \sum_{n' \in N_i^{e'}} \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{1}{\Sigma_t^e} \sum_j \varphi_{l'm'}^{+j} \sum_{e''} \sum_{n'' \in N_j^{e''}} B_f^{l'm'} \int_{\delta V_e} h_{e'}^{n'}(\underline{r}) h_{e''}^{n''}(\underline{r}) d\underline{r} + \\
& + \sum_e \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \sum_{e'} \sum_{n' \in N_i^{e'}} \sum_{\substack{l'=0 \\ \text{even}}}^{L'} \frac{1}{\Sigma_t^e} \sum_j \varphi_{l'm'}^{+j} \sum_{e''} \sum_{n'' \in N_j^{e''}} \underline{A}^{l'm'} \int_{V_e} \nabla h_{e'}^{n'}(\underline{r}) \nabla h_{e''}^{n''}(\underline{r}) d\underline{r} + \\
& + \sum_e \sum_{e'} \sum_{n' \in N_i^{e'}} \Sigma_t^e \sum_j \varphi_{lm}^{+j} \sum_{e''} \sum_{n'' \in N_j^{e''}} \int_{V_e} h_{e'}^{n'}(\underline{r}) h_{e''}^{n''}(\underline{r}) d\underline{r} = \quad (53) \\
& = \sum_e \sum_{e'} \sum_{n' \in N_i^{e'}} \Sigma_s^e \sum_j \psi_{00}^{+j} \sum_{e''} \sum_{n'' \in N_j^{e''}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} \int_{V_e} h_{e'}^{n'}(\underline{r}) h_{e''}^{n''}(\underline{r}) d\underline{r} + \\
& + \sum_e \sum_{e'} \sum_{n' \in N_i^{e'}} \frac{S^e}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} \int_{V_e} h_{e'}^{n'}(\underline{r}) d\underline{r}
\end{aligned}$$

A (53) egyenletben megjelenő f index végig fut az adott elemnek azon felületein, amelyek a rendszer peremén helyezkednek el. Vegyük észre, hogy az egyes végeselemeken belül az anyagi paramétereket, csoportállandókat konstansnak tekintjük, tehát minden elemet hozzárendelünk egy bizonyos anyagi régióhoz. A szögváltozó kezeléséhez hasonlóan itt is olyan integrálokhoz juthatunk el, amelyek már tisztán helyfüggők. Ezeknek az integráloknak az értéke a végeselem-programokban előre kiszámítandó, és később az eltárolt integrálok segítségével állíthatjuk fel az egyenlet globális operátorait.

Első látásra indokolatlannak tűnhet, hogy egy ilyen komplex, szigorú formalitásokat követő egyenletet közöljünk a dolgozatban, de mivel ez alkotja a felállított kódrendszer működésének alapját, szükséges bemutatni, hogy a kód működéséről szóló fejezetet megfelelően tudjuk értelmezni.

2.5. Időfüggés

A 2. fejezetben többször elhangzott egyenletek levezetésénél, hogy az időfüggéssel nem foglalkozunk. Ez az alfejezet rávilágít arra, pontosan hogyan tehető meg az időváltozó elhagyása az egyes egyenletekből. A transzportegyenlet időfüggését általában annak valamilyen sajátérték-egyenletére vezetjük vissza [32]; most ezek közül az ún. sztatikus sajátérték-egyenlet kerül bemutatásra, hiszen a kifejlesztett diffúziós és transzportkód is ezt alkalmazza reaktorfizikai, azon belül pedig hasadási feladatok számításakor. Fix forrásos feladatoknál az időfüggőség kezelése máshogy alakul, az időbeli derivált és az időváltozó egyszerűen elhagyható az (1) egyenletből. Fontos továbbá megjegyezni, hogy a páros paritású egyenletekben a páratlan fluxuskomponensek időderiváltjait el kell hanyagolnunk, amely a modellben egyfajta közelítést jelent.

Tehát induljunk ki egy hasadási problémából. Az egyszerűség és a szemléletesség kedvéért most a diffúzióegyenletre mutatom be a sztatikus sajátérték-egyenlet származtatását. Az időfüggő diffúzióegyenletet a (54) egyenlet mutatja.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\underline{r}, E, t)}{\partial t} = \nabla D(\underline{r}, E) \nabla \Phi(\underline{r}, E, t) - \Sigma_t(\underline{r}, E) \Phi(\underline{r}, E, t) + \\
& + \int_0^\infty \Sigma_s(\underline{r}, E' \rightarrow E) \Phi(\underline{r}, E', t) dE' + \chi(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\underline{r}, E') \Phi(\underline{r}, E', t) dE' \quad (54)
\end{aligned}$$

Ezt az időfüggő egyenletet úgy alakíthatjuk sztatikus sajátérték-egyenletté, hogy a produkciós operátort, tehát a hasadási tagot leosztom egy k számmal. Ez a k szám korrigálja a neutronok keletkezését olyan módon, hogy mindig teljesüljön a destrukció és a produkció közötti egyenlőség. A k paraméter az egyenlet sztatikus sajátértéke, és beiktatásával mind az időderiváltat, mind az időváltozót elhagyhatjuk az egyenletünkben. A diffúzióra vonatkozó sztatikus sajátérték-egyenlet az alábbi:

$$0 = \nabla D(\underline{r}, E) \nabla \Phi(\underline{r}, E, t) - \Sigma_t(\underline{r}, E) \Phi(\underline{r}, E, t) + \int_0^\infty \Sigma_s(\underline{r}, E' \rightarrow E) \Phi(\underline{r}, E', t) dE' + \frac{\chi(E)}{k} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\underline{r}, E') \Phi(\underline{r}, E', t) dE'. \quad (55)$$

Ezekből a k sajátértékekből végtelen sok van, ám létezik egy maximális k_{max} sajátérték, amelyre $k_{max} > k$ minden k -ra [32]. Ezt az értéket nevezzük a sztatikus alaplómódnak, vagy effektív sokszorozási tényezőnek, amely nem csak a reaktorfizika világában, de a teljes atomenergetika területén is gyakran használt mennyiség.

3. Diffúziós reaktorfizikai kód fejlesztése

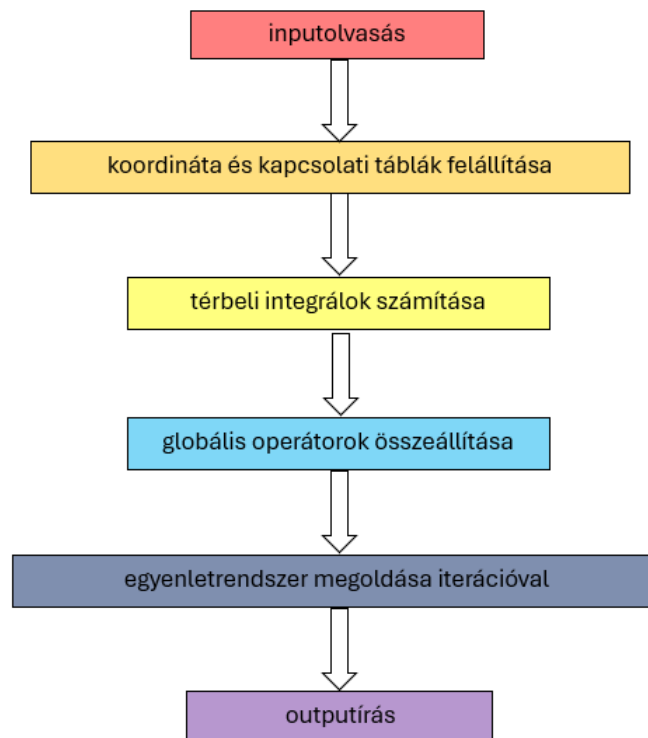
A dolgozat során már többször hangsúlyoztuk, hogy a páros paritású P_N transzportszámítási módszer diffúziószerű egyenletek rendszerének megoldására vezet, így kézenfekvő volt először egy diffúziós reaktorfizikai kód megalkotásával kezdeni a munkát, mivel nem rendelkezem előzetes tapasztalattal és gyakorlattal a reaktorfizika numerikus módszereinek terén. Másfelől egy külön diffúziós modul elkészítése azért is volt nagyon kedvező, mert az egyenletek hasonló szerkezete miatt a diffúziós kódban megírt bizonyos rutinok teljes egészében vagy minimális módosításokkal átemelhetők voltak a transzportkódba. Ez a programozás feladatát egyértelműen meggyorsította. Ilyen módon a diffúziót és a páros paritású P_1 közelítést is lehetőségünk nyílt közvetlenül összevetni egymással. Ez nem csak az eredmények kiértékelésekor, de a kódfejlesztés során a hibakereséskor is nagy előnyt jelentett.

Az elkészített diffúziós program egy végeselem-módszeren alapuló reaktorfizikai kód, amely az időfüggetlen többszoport diffúzióegyenlet megoldására szolgál, egy-, két-, illetve háromdimenziós problémák megoldására is alkalmas. Ez a kód (ahogyan a későbbiekben bemutatásra kerülő páros paritású P_N transzportkód is) FORTRAN nyelven íródott [8]. Ez a fejezet részletesen tárgyalja majd a kód felépítését és működését, a következő pedig bemutatja azokat a választott tesztproblémákat, amelyek a helyes működését hivatottak alátámasztani. A kódban megvalósuló számítások elméleti hátterének nagy részét lefedi az előző 2. fejezet, viszont a következőkben sokkal részletgazdagabb leírást adunk arról, pontosan hogyan realizálódnak a megírt reaktorfizikai programban azok a módszerek és alapvetések, amelyeket korábban bemutattunk.

3.1. Kód felépítése

A kód működését előbb röviden összegezzük, majd a fő számítási egységeket külön-külön is kifejtjük. A program elsőként beolvassa a számítások elvégzéséhez szükséges input fájlokat, nevezetesen a vezérlő inputot, a probléma csoportállandóit és végeselem-hálóját. Ezután megkezdődik a végeselemek koordináta- és kapcsolati tábláinak felállítása, amely arra szolgál, hogy a végeselem-hálót a program számára kedvező módon tároljuk. Ezt követi a gyenge egyenletből és a végeselem-diszkretizációból adódó térbeli integrálok kiértékelése minden végeselemre

vonatkozóan; ezekből a nyersintegrálokból állíthatjuk később elő az egyes elemmátrixokat. Az integrálás után a program az egyes elemeken végighaladva előállítja a globális operátorokat azok elemmátrixaiból, fix forrásos probléma esetén a destrukciós operátort, illetve az egyenletrendszer jobb oldalát, míg hasadási problémánál a destrukciós és a produkciós operátort is. Amennyiben többszoport feladatról van szó, szintén összeállításra kerül a szórás operátor. Miután elkészült a megoldandó lineáris algebrai egyenletrendszer, ezt a program megoldja iterációs módszer segítségével. Végül az outputírás következik. Az egyik kibocsátott output fájl tartalmazza a számítás fő paramétereit és kritikussági feladat esetén a forrásiteráció egyes lépéseit, valamint az effektív sokszorozási tényezőt. A másik típusú inputfájl a számítás eredményeit rendeli hozzá a megadott végelelem-háléhoz, amelyet később modellező programban beolvassva ábrázolhatunk is. Az (5) folyamatábra szintén a program működését szemlélteti.



5. ábra. A diffúziós kód működésének folyamatábrája

3.1.1. Inputolvasás

A modul meghívásakor az említett input fájlok beolvasása és adataiknak eltárolása történik meg. A kód futtatásához tehát három input fájl szükséges, ezek az alábbiak:

- vezérlő input fájl (*.inp kiterjesztésű),
- csoportállandó input fájl (*.gci kiterjesztésű), illetve
- végelelem-háló fájl (*.msh kiterjesztésű).

Vezérlő input fájl: Arra szolgál, hogy a felhasználó megadja a probléma és a reaktorfizikai számítás általános paramétereit, illetve a további két input fájl nevét és elérési útját. A vezérlő

input azért is fontos, mert a program az ebben megadott paraméterek szerint ellenőrzi a további két input fájlt, és jelzi a felhasználónak, ha eltérést észlel. A következő információkat szükséges megadni a fő input fájlban:

- a probléma típusát (fix forrásos/kritikussági),
- az energiacsoportok számát,
- a homogén anyagi régiók számát,
- az alkalmazott peremfeltételek számát,
- a térbeli integrálásnál használt kvadrátúra rendjét,
- a csoportállandó fájl elérési útvonalával együtt,
- a végeelem-háló fájlját elérési útvonalával együtt,
- a homogén anyagi régiók és peremek azonosítóit,
- az iteráció konvergenciakritériumait, illetve
- az iterációs lépések maximális számát.

Az input összeállítására vonatkozó konvenciókat az (1) és a (2) táblázat tartalmazza. A felhasználó választhat a térbeli integráláshoz első-, harmad-, ötöd- vagy hetedrendű kvadrátúrát.

Probléma típusa	Azonosító
Fix forrásos	1
Hasadási	2

1. táblázat. *Probléma típusa*

Peremfeltétel típusa	Azonosító
Relfektált perem	1
Vákuum perem	4

2. táblázat. *Peremfeltétel típusa*

Csoportállandó input fájl: Tartalmazza a probléma csoportállandóit; a csoportállandókat ebben az input fájlban szükséges megadni minden anyagi régióra és minden energiacsoportra vonatkozóan. Ezek többnyire makroszkopikus hatáskeresztmetszet jellegű mennyiségek, amelyeket $[\frac{1}{cm}]$ mértékegységben értelmezzük. A szükséges csoportállandók listája egy adott anyagban a g . energiacsoportra vonatkozóan a következő:

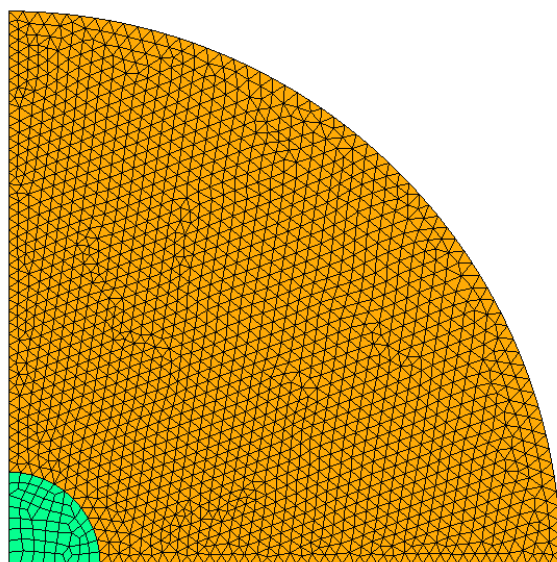
- $D^g[cm]$ - diffúziós állandó,
- $\Sigma_a^g[\frac{1}{cm}]$ - abszorpció hatáskeresztmetszet,
- $\chi^g[-]$ - hasadási spektrum,
- $\nu\Sigma_f^g[\frac{1}{cm}]$ - a neutronhozam és a hasadási hatáskeresztmetszet szorzata,
- $\Sigma_s^{g \rightarrow g'}[\frac{1}{cm}](g' = 1...G)$ - szórás hatáskeresztmetszet az összes energiacsoportba való szóródásra vonatkozóan, valamint
- $S^g[\frac{1}{cm^3s}]$ - külső forráserősség,

ahol a g index végigmegy az összes energiacsoporton ($g = 1 \dots G$) - G itt a csoportok számát jelöli. *Végeselem-háló fájl:* A végeselem-háló fájl tartalmazza a probléma térbeli diszkretizációját. A program ASCII formátumú végeselem-hálóval dolgozik, valamint fontos, hogy a geometriai modell méretei, amelyből a hálót generáljuk, [cm] mértékegységben legyenek értelmezve a csoportállandók mértékegységével való egyezés miatt.

A végeselem-hálók készítéséhez a Gmsh nevű háromdimenziós modellező programot használtam [15]. A programban létrehozhatunk geometriai modellt szkript formájában vagy akár a felhasználói felületen keresztül is; ezek közül az előbbi a megbízhatóbb és hatékonyabb megoldás. Az elkészített geometriai modellben meghatározhatunk ún. fizikai tartományokat is, az azonos fizikai tartományba sorolt térrészeket a program egyedi azonosítóval látja el. Ezt a módszert használjuk fel a különböző anyagi régiók és peremek megjelölésére a geometriai modellben. Az említett azonosítókat a modell alapján a program által generált végeselem-hálók is tartalmazzák, így lehetséges a reaktorfizikai kódban adott térfogati elemre a megfelelő csoportállandók és adott felületi elemre a megfelelő peremfeltétel kiválasztása.

Hálógenerálás terén a program számos különböző opcióval rendelkezik, van lehetőség egy-, két-, és háromdimenziós hálók készítésére, valamint választhatunk strukturált, illetve strukturálatlan hálótípust is. Ezen kívül a geometria behálózására alkalmazott végeselem-típusokat is be lehet állítani, valamint egyedi igényeknek megfelelően is alakítható az elkészített térbeli diszkretizáció, előírhatunk például magasabb hálósűrűséget lokálisan olyan tartományban, amely számunkra kiemelten fontos. A Gmsh számítási eredmények kiértékelésére is alkalmas [15].

Mind a diffúziós, mind a páros paritású P_N transzportkód alkalmas strukturálatlan végeselem-hálók kezelésére is. Az implementált elemtípusok a következők: pont, vonal, háromszög, négyszög, tetraéder, hexaéder, ék és piramis - ezeknek is az elsőrendű változatai. A (6) ábra a DEEP-END transzportkód ellenőrzésére felhasznált egyik tesztprobléma végeselem-hálóját mutatja szemléltetésként.



6. ábra. A DEEP-END tesztelésére használt végeselem-háló

A végeselem-háló tulajdonságai (pl. hálót felépítő elemek típusai, azok rendje, háló sűrűsége stb.) jelentősen befolyásolhatják egy reaktorfizikai számítás eredményeit. Legfontosabb paraméterként kiemelhetjük a háló sűrűségét, mivel általánosságban véve sűrűbb háló alkalmazásánál, tehát finomabb térbeli diszkretizációt alkalmazva megbízhatóbb, a transzportegyenlet közvetlen megoldásához közelebbi eredményt kaphatunk. Ez a valóságban nem igaz ilyen egzakt

módon. Egy bizonyos pontig a háló sűrűségének függvényében változik a számítás kimenete is, de megfigyelhető, hogy a különböző térbeli diszkretizációkkal kapott eredmények tartanak egy bizonyos érték felé. Az említett ponton túl viszont már nem állapítható meg lényeges változás a számítási eredményekben, így ezt a probléma hálófüggetlen megoldásának nevezzük.

Mind a diffúziós, mind pedig a páros paritású P_N kód esetében kiválasztottunk olyan tesztfeladatokat, amelyek demonstrálják egy adott referenciához viszonyítva az elkészített program helyes működését. Minden tesztfeladat esetében több különböző felbontású végelelem-hálóra futtatunk eredményeket, ezzel egyfelől vizsgáltuk az adott probléma hálóérzékenységet, illetve kísérletet tettünk az említett hálófüggetlen megoldások megállapítására is.

3.1.2. Koordináta- és kapcsolati táblák felállítása

Amint azt a 3. fejezet elején is megjegyeztük, a végelelem-hálót olyan formában kell eltárolni, amelyet a program hatékonyan tud kezelni. Ezért állítunk fel a végelelem-háló fájl alapján ún. koordináta- és kapcsolati táblázatokat [11].

- *Koordinátatáblázat*: tartalmazza minden nódus sorszámát, egyedi azonosítóját és a három dimenzió szerinti koordinátáit
- *Kapcsolati táblázat*: a háló minden elemének eltárolja a sorszámát, egyedi azonosítóját és azon nódusok sorszámát, amelyek az adott elemet határolják

Megemlíthető, hogy ezekben a táblázatokban a sorszámot a kód rendeli az egyes nódusokhoz és elemekhez, míg az egyedi azonosító a *.msh fájlból származik. Azért van szükség a megkülönböztetésükre, mert a modellező program, amely a hálót generálja, általában egytől kezdve növekvő sorrendben rendel hozzá egyedi azonosítókat az egyes elemekhez és nódusokhoz, de ez nem törvényszerű.

Praktikus okok miatt külön kapcsolati táblát készít a kód az ún. "térfogati" és "felületi" elemekre, ahol ezek dimenzió szerint értendők. Tehát pl. egydimenziós probléma esetén a térfogati elemek a háló egydimenziós elemeit jelölik, vagyis a vonalelemeket, míg a felületi elemek nulldimenziósak, vagyis pontok.

3.1.3. Térbeli integrálok számítása

A végelelem módszer értelmében minden elemen belül annak bázisfüggvényei segítségével fejezzük ki a fluxust. Ahogy a 2.4. alfejezetben részletesen is tárgyaltuk, a végelelem-módszer szerint térben diszkretizált egyenletben tisztán helyfüggő integrálok jelennek meg. Ezeket az integrálokat minden elemre ki kell értékelni; adott elemre vonatkozóan az integrálok csak az elem bázis- és tesztfüggvényeit tartalmazzák. Ha az adott elem bázisfüggvényeit egy $\underline{h}_e$ vektorba rendezzük, - jelen esetben a vektor hosszúsága az adott elem nódusszáma - akkor az (53) egyenlet integráljait mátrixos, illetve vektoros formában is felírhatjuk.

A térfogati elemekre:

$$\int_{V_e} \nabla \underline{h}_e(\underline{r}) \nabla \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r} \quad (56)$$

$$\int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r} \quad (57)$$

$$\int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) d\underline{r} \quad (58)$$

A felületi elemekre:

$$\int_{\delta V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r} \quad (59)$$

A program minden felületi és térfogati elemre kiszámítja a fenti integrálok értékét, majd ezeket a nyersintegrálokat tömbökben eltárolja. Az (56) - (59) egyenletekben megjelenő kifejezéseket numerikus integrálással értékeljük ki. Az integrálást a referenciatérben végezzük el minden elemre vonatkozóan, majd a referenciából a valós térbe történő transzformáció segítségével kapjuk meg az integrál valós értékét [11]. Ezt a folyamatot szemlélteti a (60) egyenlet egy egyváltozós példán keresztül, amely egy tetszőleges $\gamma(x)$ függvény V_v tartományon való integrálására vonatkozik:

$$\int_{V_v} \gamma(x) dx = \int_{V_r} \gamma(\xi) |\underline{J}(\xi)| d\xi = \sum_{i=1}^I w_i \gamma(\xi_i) |\underline{J}(\xi_i)|, \quad (60)$$

ahol V_v a valós és V_r a referenciatér, $|\underline{J}|$ pedig a kettő közötti transzformációt leíró mátrix Jacobi-determinánsa. Az i a numerikus kvadrátúra pontjait indexeli. A numerikus integráláshoz a programban első-, harmad-, ötöd- és hetedrendű kvadrátúra áll rendelkezésünkre [11] [19] [20] [37].

3.1.4. Globális operátorok összeállítása

Ez a számítási egység előállítja minden energiacsoportra vonatkozóan a globális operátorokat. A globális együtthatómátrixot, illetve az egyenlet jobb oldalát a korábban számolt nyersintegrálokból képzett elemmátrixok felhasználásával építi fel a diffúziós kód. Tehát a rutin során minden energiacsoportra elkészítjük a következőket:

- a destrukciós operátort,
- a produkciós operátorokat hasadási probléma esetén,
- a szórás operátorokat,
- az egyenletrendszer jobboldalát fix forrásos probléma esetén.

Az operátorok előállítása úgy történik, hogy egy ciklus végigmegy minden térfogati és felületi elemen, mindegyikhez meghatározza az adott elem elemmátrixait és -vektorát, majd ezeket betölti a globális együtthatómátrix és a jobboldal megfelelő helyeihez.

Destrukciós operátor: A destrukciós operátor az egyenlet kifolyási tagjának térfogati részéből, az abszorpciós tagjából, illetve a kifolyási tagjának felületi részéből épül fel; utóbbit csak vákuum perem esetén szükséges hozzáadni az operátorhoz. Ez alapján a következő típusú elemmátrixokat kell előállítani, majd betölteni az operátorba:

$$\underline{\underline{K}}_e^g = D_e^g \int_{V_e} \nabla \underline{h}_e(\underline{r}) \nabla \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}, \quad (61)$$

$$\underline{\underline{A}}_e^g = \Sigma_{a,e}^g \int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}, \quad (62)$$

$$\underline{\underline{M}}_e^g = 0.5 \int_{\delta V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}. \quad (63)$$

Az (63) elemmátrix 0.5 szorzója a diffúzióelméletben használt Robin-féle peremfeltételből származik [32]:

$$\Phi(\underline{r}) + 2D(\underline{r}) \frac{\partial \Phi(\underline{r})}{\partial n(\underline{r})} = 0, \quad (64)$$

ahol $\underline{n}(\underline{r})$ a vákuumperem adott $\underline{r}$ pontjában vett kifelé mutató felületi normális. A destrukciós operátor valójában egy $J \times J$ méretű mátrix, ahol J a nódusok számát jelöli; gyakran globális együtthatómátrixként hivatkoznak rá.

Produkciós operátor: A produkciós operátorok kritikussági feladatok esetén képződnek az egyenlet hasadási tagjából. Minden energiacsoport esetén tekinteni kell az összes energiacsoportból az adott csoportba való hasadást; tehát, ha az összes energiacsoportok száma G , akkor minden egyes csoporthoz G számú produkciós operátort kell előállítani. A tetszőleges g' csoportból a tekintett g -be való hasadás operátorába a következő elemmátrixokat kell betölteni:

$$\underline{\underline{X}}_e^{g' \rightarrow g} = \chi^g \nu \Sigma_{f,e}^{g'} \int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}; \quad (65)$$

ezekből a destrukciós operátorhoz hasonlóan egy $J \times J$ méretű mátrix képződik. Mivel az összes lehetséges hasadást le kell tudnunk írni, így a produkciós operátorokból képletes értelemben felépíthető egy $G \times G$ méretű hipermátrix, amelyet a (7) ábra szemléltet.

	g'=1	g'=2		
g=1	$\underline{P}_{11}$	$\underline{P}_{12}$		g=1...G
g=2	$\underline{P}_{21}$	$\underline{P}_{22}$	...	g'=1...G

7. ábra. A produkciós operátorokból felépülő hipermátrix sematikus ábrája

Szórási operátorok: A szórási operátorokat a produkciós operátorokhoz hasonlóan minden lehetséges g - g' párosításra elő kell állítanunk. Elemei az diffúzióegyenlet szórási tagjából származnak, és minden egyes g csoport esetén az összes energiacsoportból meg kell határozni a g -be való szórás operátorát. Ez alapján tetszőleges g' csoportból a tekintett g -be való szórás operátorába a következő elemmátrixokat kell betölteni:

$$\underline{\underline{SC}}_e^{g' \rightarrow g} = \Sigma_{s,e}^{g' \rightarrow g} \int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}. \quad (66)$$

A szórási operátorokból a produkciós esethez hasonlóan felépíthető egy $G \times G$ méretű hipermátrix, ennek bejegyzései pedig az egyes szórási folyamatokhoz tartozó $J \times J$ szórási operátorok.

	g'=1	g'=2		
g=1	$\underline{S}_{11}$	$\underline{S}_{12}$		g=1...G
g=2	$\underline{S}_{21}$	$\underline{S}_{22}$	...	g'=1...G

8. ábra. A szórási operátorokból felépülő hipermátrix sematikus ábrája

Egyenletrendszer jobboldala: Az egyenletrendszer jobb oldalát akkor szükséges meghatározunk, ha fix forrásos problémára szeretnénk számításokat futtatni. Ez a J hosszú vektor az egyenlet külső forrástagjából állítható elő, és az alábbi formájú elemi vektorokat kell beletölteni:

$$\underline{S}_e^g = S_e^g \int_{V_e} h_e(\underline{r}) d\underline{r}. \quad (67)$$

Fontos kiemelni, hogy numerikus módszerek esetén a megoldandó egyenletrendszer jellemzően nagy méretű ritka mátrixos formát ölt, amelynek közvetlen tárolása, és az így tárolt alakkal műveletek végzése hatalmas számítástechnikai kapacitást igényelne [28]. Gyakorlatban tehát nem ezt alkalmazzuk, hanem a mátrixokat egy ritka mátrixok tárolására kidolgozott módszer szerint CSR-formátumban (compressed sparse row format) állítjuk elő és kezeljük.

3.1.5. Egyenletrendszer megoldása iterációval

Jelen számítási egység oldja meg az előzőekben előállított lineáris algebrai egyenletrendszert. Külön megoldó algoritmus lett implementálva fix forrásos és kritikussági problémákra, utóbbiban egy plusz iterációs szint is megjelenik. Fontos, hogy a program jelenleg csak olyan eseteket tud megoldani, ahol az energiacsoportok között nincsen jelen felfelé szórás. Megjegyezzük, hogy a felfelé szórás kezeléséhez egy újabb iterációt kéne beépíteni az energiacsoportok között való szórásra vonatkozóan.

Fix forrásos probléma esetén, ahol az egyenletrendszer jobb oldala adott, a megoldás magától értetődő, elsőként a legnagyobb energiájú csoport egyenletrendszerét oldjuk meg, ebből szórási forrást számolunk a következő csoportokra, megoldjuk a következőt, így haladunk a gyors tartományból a termikus energiák felé. Az egyes egyenletrendszerek megoldását jelenleg egy konjugált gradiens módszerrel működő iteráció végzi a destruktív operátorra és egy adott jobboldalra vonatkozóan [28] - esetünkben ez adódik a külső forrásból. Az iteráció akkor ér véget, ha a reziduális kettes normája eleget tesz a konvergenciakritériumnak: $|\underline{r}|_2 < CC$. A konjugált gradiens módszer általános algoritmusát foglalja össze az alábbi (9) ábra.

Konjugált gradiens-módszer, első változat.
 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitív definit mátrix, $\bar{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^n$ adott.

```

 $k := 0, \bar{\mathbf{r}}_0 := \bar{\mathbf{b}}, \bar{\mathbf{x}}_0 := \mathbf{0}, \bar{\mathbf{p}}_1 = \bar{\mathbf{r}}_0$ 
while  $\bar{\mathbf{r}}_k \neq \mathbf{0}$  do
   $k := k + 1$ 
   $\alpha_k := \bar{\mathbf{p}}_k^T \bar{\mathbf{r}}_{k-1} / (\bar{\mathbf{p}}_k^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{p}}_k)$ 
   $\bar{\mathbf{x}}_k := \bar{\mathbf{x}}_{k-1} + \alpha_k \bar{\mathbf{p}}_k$ 
   $\bar{\mathbf{r}}_k := \bar{\mathbf{r}}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{A} \bar{\mathbf{p}}_k$ 
   $\beta_k := \bar{\mathbf{p}}_k^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{r}}_k / (\bar{\mathbf{p}}_k^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{p}}_k)$ 
   $\bar{\mathbf{p}}_{k+1} := \bar{\mathbf{r}}_k - \beta_k \bar{\mathbf{p}}_k$ 
end while

```

9. ábra. A konjugált gradiens módszer algoritmusát [13]

Hasadási problémák esetén is nagyon hasonló a megoldás menete, de a leírt algoritmust kiegészíti egy külső, ún. forrásiteráció, hiszen az egyenlet jobb oldala nem adott egzakt formában. A következőképpen járhatunk el. A fluxusra kezdeti értéket választunk, majd megszorozzuk a produkciós operátorral, így áll elő az egyenletrendszer első jobboldala. Minden belső iteráció után újraszámoljuk a jobboldalt, és ezt folytatjuk, amíg a kívánt konvergenciakritériumok nem teljesülnek. A probléma sajátértéke pedig nem más ekkor, mint a jobboldal maximum normája

[10]. A forrásiteráció egyes ciklusainál kiszámítjuk a fluxus abszolút hibáját az előző ciklushoz képest, ezt szintén alávetjük egy konvergenciavizsgálatnak, majd a meghatározott érték a fő output fájlba is kiíródik.

3.1.6. Outputírás

A kód két típusú output fájlt produkál a futtatás során, egy fő output fájlt, illetve a fluxuselosztást *.msh formátumban minden energiacsoportra vonatkozóan.

Fő output fájl: Tartalmazza a fő inputban megadott információkat, továbbá forrásos esetben a fluxusnak a forrásiteráció lépéseihez tartozó abszolút hibáját, a probléma sajátértékét, illetve az elvégzett iterációs lépések számát.

Fluxuselosztások: Ez lényegében a végeelem-háló másolata, amelyhez hozzá van csatolva a fluxus egyes nódusokra vonatkozó értéke, tehát maga a térbeli fluxuselosztás. Minden energiacsoporthoz előállít a program egy-egy fluxuselosztást tartalmazó fájlt. Ezek a *.msh formátumú fájlok később a végeelem-háló készítésekor alkalmazott modellező programmal megnyithatók, - esetünkben a Gmsh segítségével - így az egyes energiacsoportok térbeli fluxuselosztásai vizuálisan is megtekinthetővé válnak, illetve a kapott elosztásokat tetszőlegesen fel is dolgozhatjuk a programban.

A következő fejezet a munka során fejlesztett páros paritású P_N kódot mutatja be, nagy mértékben támaszkodva ennek a diffúziós kódról szóló fejezetnek a tartalmára.

4. Páros paritású P_N reaktorfizikai kód fejlesztése

A dolgozat elsődleges célja a páros paritású P_N transzportszámítási módszer vizsgálata, amelyhez hozzátartozik a módszer reaktorfizikai kód szintjén való megvalósítása is. A felépített páros paritású P_N kód működésével, felépítésének áttekintésével foglalkozik ez a fejezet, az adott transzportszámításra jellemző specifikus összefüggések és eljárások részletes bemutatásával. A diffúzió és a páros paritású P_N transzportközelítés hasonlóságait már több helyen tárgyaltuk, így ez a fejezet is nagyban támaszkodik az előzőre, amely a megírt diffúziós végeelem-kódot mutatta be. Valóban igaz az a korábban tett állítás, hogy a diffúziós kód rutinjainak egy része egy az egyben átemelhető a transzportkódba, másképpen fogalmazva a diffúzióegyenlet megoldására felállított kód páros paritású P_N transzportkóddá bővíthető. Értelemszerűen tehát mindkét kód azonos nyelven, FORTRAN-ban íródott [8].

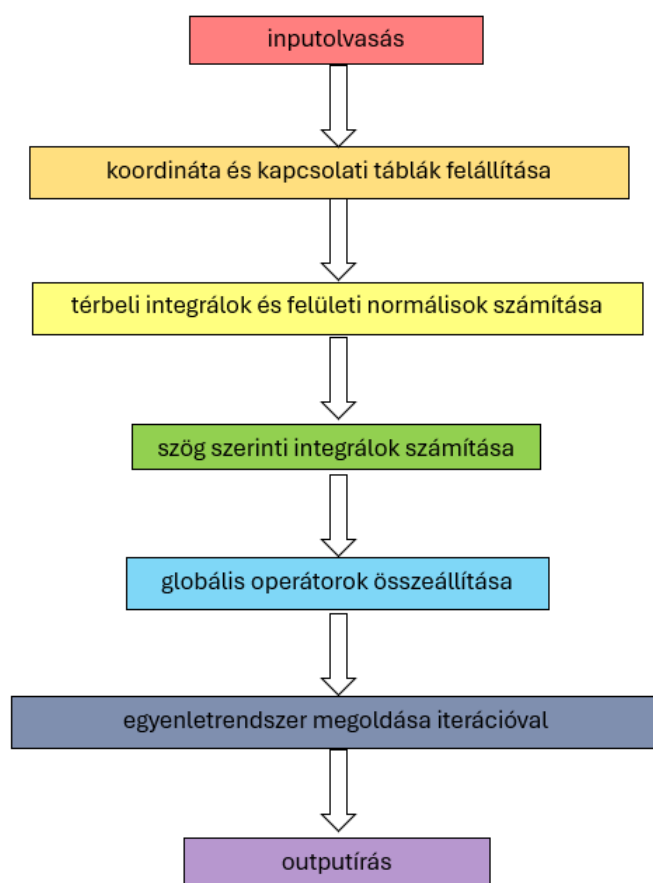
Ezt a fejezetet is a tárgyalt reaktorfizikai program rövid jellemzésével kezdjük. A megalkotott páros paritású P_N transzportkód végeelem-módszerrel oldja meg az időfüggetlen páros paritású P_N egyenletet, pontosabban ennek az egyenletnek a többcsoport módszer szerinti megfogalmazását tetszőleges dimenziójú problémára (1D/2D/3D). A kód alkalmazható mind fix forrásos, mind pedig kritikussági probléma megoldására. Itt logikus bevezetnünk az elnevezést, amelyet az elkészített transzportprogram kapott, hiszen a név a kód által alkalmazott transzportközelítésből alkotott betűszó. A páros paritású P_N transzportszámítási módszer nyomán a program a DEEP-END nevet kapta, amely az angol *Demonstrative EvEn Parity P_N coDe* kifejezést rövidíti.

4.1. Kód felépítése

Elsőként a kód működésének egy rövid, tömör megfogalmazásával indul az alfejezet, majd kitérünk a kód egyes egységeinek tárgyalására is. Ennek során kihasználjuk, hogy azok a páros paritású P_N kódban használt módszerek és rutinok, amelyek már a 3. diffúziós programot leíró

fejezetben előkerültek, nem lesznek részletesen kifejtve, az esetleges különbségeket azonban minden esetben bemutatjuk.

A program működése az input fájlok beolvasásával kezdődik, majd a koordináta- és kapcsolati táblák felállításával folytatódik. Ezt követően az (53) egyenletben megjelenő tisztán helyfüggő integrálok kiértékelése történik meg minden végelemre vonatkozóan. A következő lépésben a szögváltozó P_N diszkretizációjából eredő irányfüggő integrálokat számítja ki a program; a felületi elemekre vonatkozó integrálok esetén a hatékonyság érdekében egy a valós értékű gömbharmonikusok forgatására alapozott módszer segítségével. Ezek után kerül sor a globális operátorok, tehát a megoldandó egyenletrendszer felállítására, az így előállt blokkmátrixot pedig egy iterációs solver oldja meg. Ezután megíródnak az output fájlok, melyek ugyanolyan szerkezetűek, mint a diffúziós program esetében, de a felhasználó kérésére nem csak a skalárfluxus, hanem a többi fluxuskomponens térbeli eloszlása is kiíratható. A kód működésének folyamatábráját tartalmazza a (10) kép.



10. ábra. A páros paritású P_N kód működésének folyamatábrája

Látható, hogy a diffúziós transzportközelítéshez képest egy új számítási egység került beépítésre a térbeli integrálás és a globális operátorok összeállítása közé, ez a lépés valósítja meg a szögváltozóbeli diszkretizációt. Fontos továbbá, hogy a térbeli integrálok kiértékelésekor szükségessé válik a felületi elemekre vonatkozó normálisvektorok meghatározása is, mivel ezek felhasználásra kerülnek a szög szerinti integrálásnál. Itt leszögezzük, hogy a dolgozat során minden esetben, ahol a felületi normális fogalma előkerül, kifelé mutató felületi normálisra gondolunk.

A fluxuskomponensek indexelését a (14) ábrán már egy egyszerűbb alakban írtuk fel; eszerint a komponenseket nem rendjük és momentumuk szerint indexeljük, hanem ezeket növekvő sorrendbe téve l rend, majd m momentum szerint egyszerűen indexelhetjük őket $n = 1$ -től $n = N_c$ -ig. Az n és n' fluxuskomponensek közötti destrukciós operátor az egyenlet kifolyási tagjának felületi és térfogati részéből, az $\underline{A}$ és $\underline{B}$ mátrixok megfelelő bejegyzéseinek segítségével írható fel. Az alábbi típusú elemmátrixokat szükséges betölteni egy tekintett g energiacsoportban az operátorba:

$$\underline{\underline{K}}_e^g = \underline{\underline{A}}^{nn'} \frac{1}{\Sigma_{t,e}^g} \int_{V_e} \nabla \underline{h}_e(\underline{r}) \nabla \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}, \quad (68)$$

$$\underline{\underline{M}}_e^g = \underline{\underline{B}}_f^{nn'} \int_{\delta V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r}. \quad (69)$$

Amennyiben az $n = n'$, vagyis az említett hipermátrix diagonálisában vagyunk, hozzá kell még adnunk az n - n' párra vonatkozó destrukciós operátorhoz az egyenlet reakciótagjából származó elemmátrixokat is.

$$\underline{\underline{A}}_e^g = \Sigma_{t,e}^g \int_{V_e} \underline{h}_e(\underline{r}) \underline{h}_e^T(\underline{r}) d\underline{r} \quad (70)$$

Egyenletrendszer megoldása iterációval

A globális együtthatómátrix bemutatása után látható, hogy a megoldandó egyenletrendszer nem egy darab ritka mátrixként, hanem egy ritka mátrixokat tartalmazó hipermátrixként írható le adott g energiacsoportra vonatkozóan. Az egyenletrendszer fix forrásos esetben és hasadásos problémára is ugyanazon elvek mentén kerül megoldásra, mint ahogyan azt a diffúziós fejezetben tárgyaltuk. Az egyetlen különbség, hogy a globális együtthatómátrixot egy adott jobb oldalra nem egyetlen iterációs modullal oldjuk meg, hanem blokk szinten Gauss-Seidel módszerrel, mátrix szinten pedig prekondicionált konjugált gradiens módszerrel dolgozunk [28].

Outputírás

A fő output fájl szerkezete a diffúziós kódéhoz képest változatlan, viszont a vezérlő inputban megadott paraméter függvényében minden energiacsoportra vonatkozóan megkaphatjuk nem csak a skalárfluxus, de az összes többi fluxuskomponens térbeli eloszlását is.

4.1.1. Szög szerinti integrálok kiszámítása

A kódban megvalósított szög szerinti diszkretizáció a páros paritású P_N egyenlet származtatásakor kapott (40) és (41) integrálok kiértékelését követeli meg. Ezeket a teljes 4π tartományon vett integrálokat numerikus integrálással számítjuk. Ehhez az adott N kifejtési rendet figyelembe véve előállítunk egy S_{N_k} kvadraturát, - N_k a kvadratura rendje - mégpedig speciálisan Legendre-Chebyshev kvadraturát generálunk a [16] cikkben leírt eljárás szerint. Valójában ezzel az algoritmussal bármilyen $0 - 1$ tartományba eső kvadraturát gyárthatunk, nem csak az általunk választott kvadratura pontjainak és súlyainak generálására szolgál. Megjegyzendő, hogy az említett Legendre-Chebyshev kvadratura származtatására természetesen nem ez az egyetlen megoldás, általánosabb képet kaphatunk erről az S_N kvadraturatípusról a speciálisan reaktorfizikai számításokról szóló [27] könyv, vagy például Gianluca Longoni doktori disszertációja [22] alapján.

Az általunk alkalmazott eljárás alapja, hogy fel kell állítani az ún. Wilf-mátrix szimmetrizált alakját, amely mátrix bejegyzéseit az integráláshoz használni kívánt ortogonális polinomrendszer rekurziós relációiból határozhatjuk meg. A mátrix sajátértékeinek és sajátvektorainak meghatározása szükséges; előbbiek lesznek a kvadratura pontjai, míg a súlyok az első sajátvektorból

számítandók. A kvadrátúrának ilyen módon való származtatása azért előnyös, mert sok kvadráturapontig stabil az eljárás (nem jelennek meg negatív súlyok) [16].

Egy S_{N_k} , vagyis N_k rendű kvadratura $(2N_k - 1)$ -ed fokú polinomig pontosan integrál, így az $\underline{A}^{l'm}$ mátrix elemeinek számításánál ($N_k = 2N + 1$)-ed rendű kvadrátúrát alkalmaztunk. A teljes térszögtartományon való numerikus integrálás módszerét mutatja be egy tetszőleges $\gamma(\underline{\Omega}) = \gamma(\mu, \phi)$ függényre a következő (73) egyenlet [27]:

$$\int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \gamma(\mu, \phi) d\phi d\mu = \sum_i^I w_i \gamma(\mu_i, \phi_i). \quad (71)$$

A felületi $B^{l'm'}$ mátrix kiértékelése már korántsem ilyen egyértelmű, ugyanis a (41) egyenlet esetében nem egy tisztán polinomiális, hanem egy abszolútértékes kifejezést szükséges integrálni a 4π tartományon. Elsőként megpróbálkoztunk ezeket az integrálokat egy kellően magas rendű S_{N_k} kvadrátúrával a (71) egyenletben leírtak szerint számítani, azonban ez az eljárás alacsony rendű gömbfüggvények többszázad rendű kvadrátúrával való integrálásakor sem adott kellően pontos eredményt. Hogy egy példát hozzunk az említett pontatlanságra, P_3 közelítés esetén a kvadratura rendjének megnövelése 200-ról 500-ra az integrálok értékének első 5 tizedesjegybeli változását okozta. A pontatlanság mellett a futási időre is nagyon kedvezőtlenül hatott ilyen magas rendű kvadrátúrák alkalmazása. A számítandó $B^{l'm'}$ kifejezést adott f felületi elemre vonatkozóan ismét megjelenítjük:

$$\int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) |\underline{n}_f \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = B_f^{l'm'}. \quad (72)$$

Annak érdekében, hogy ezt a numerikusan nehezen kezelhető kifejezést hatékonyabban és megbízhatóbb módon tudjuk integrálni, egy trükköt alkalmazunk. Látható, hogy ennek a (72) integrálnak az alakja egyszerűsödik, ha az adott felület normálisa a z -tengely irányába mutat [10].

$$B_f^{l'm'} = \int_{4\pi} Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) |\underline{n}_f \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = 2 \int_{\underline{\Omega} \cdot \underline{n}_f < 0} Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) |\underline{n}_f \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} \quad (73)$$

$$B_z^{l'm'} = 2 \int_{\underline{\Omega} \cdot \underline{k} < 0} Y_{l'}^{m'}(\underline{\Omega}) |\underline{k} \cdot \underline{\Omega}| Y_l^m(\underline{\Omega}) d\underline{\Omega} = 2 \int_0^1 \int_0^{2\pi} Y_{l'}^{m'}(\mu', \phi') \mu Y_l^m(\mu, \phi) d\mu d\phi \quad (74)$$

A (74) egyenletben $\underline{k}$ a z -tengely egységvektora. Tehát egyfelől a teljes térszögtartományon való integrálást felírhatjuk az $\underline{\Omega} \cdot \underline{n}_f < 0$ feltételre vett integrál kétszereseként, - emlékezzünk, hogy a vákuum peremfeltétel a bejövő irányokra jelent korlátozást - másfelől pedig $\underline{k}$ -val párhuzamos felületi normális esetén a kifejezésből eltűnik az abszolútérték jel, így az integrál már kvadrátúrával való integrálás szempontjából sokkal kedvezőbben viselkedik. Itt meg kell jegyeznünk, hogy $B_z^{l'm'}$ kiértékelése is megfelelően magas, $N_k = (2N + 1)$ -nél jóval magasabb rendű kvadrátúrát igényel.

Annak érdekében, hogy ennek a speciális esetnek az előnyeit kihasználjuk, a következőt végezzük el a felületi elemek $B_f^{l'm'}$ bejegyzéseiből álló $\underline{B}_f$ szög szerinti mátrixok számításakor. Elsőként megfelelő pontossággal kiértékeljük a $\underline{B}_f$ mátrixot, majd képezzük az adott P_N közelítéshez a valós értékű gömbfüggvények egy $\underline{R}_f^z$ forgatási mátrixát [10]. Ez a forgatási mátrix olyan tulajdonságú tetszőleges irányítottságú felület esetén, hogy a koordinátatengelyt elforgatja úgy, hogy az új z' -tengely a felületi normális irányával essen egybe. Ekkor a tetszőleges

irányítottságú felületi normálisra az alábbi módon számíthatjuk a $\underline{\underline{B}}_f$ mátrixot:

$$\underline{\underline{B}}_f = \underline{\underline{R}}_f^T \underline{\underline{B}} \underline{\underline{R}}_f. \quad (75)$$

A valós gömbfüggvényekre vonatkozó forgatási mátrixokat a komplex gömbharmonikusok forgatási mátrixaiból származtatjuk [9] [10]. A z -ből z' -be történő koordinátatranszformációt az Euler-szögek (α, β, γ) segítségével fejezhetjük ki, majd ezekből felépíthetők az ún. kis $\underline{\underline{d}}$ Wigner-mátrixok - az Euler-szögek meghatározásánál a zyz' konvenciót követtük. A $\underline{\underline{d}}$ mátrix elemei a (76) egyenlet szerint alakulnak adott l rendű komplex gömbfüggvények forgatása esetében [5]:

$$d_{m'm}^l(\beta) = (-1)^\lambda \sqrt{\frac{k!(2l-k)!}{(k+\mu)!(k+\nu)!}} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^\mu \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^\nu P_k^{\mu,\nu}(\cos\beta), \quad (76)$$

ahol a k, μ, ν és λ paraméterek értelmezése a következő (4) táblázat szerint foglalható össze. $P_k^{\mu,\nu}(\cos\beta)$ pedig a Jacobi-polinom értéke a k, μ, ν és $\cos\beta$ megadott bemenetekre. Ezekből egy $l \times l$ méretű mátrix épül fel, tehát $m' = -l \dots l$ és $m = -l \dots l$.

k	μ	ν	λ
$l+m$	$m'-m$	$-m'-m$	$m'-m$
$l-m$	$m-m'$	$m'+m$	0
$l+m'$	$m-m'$	$-m'-m$	0
$l-m'$	$m'-m$	$m'+m$	$m'-m$

4. táblázat. A $\underline{\underline{d}}$ elemeinek számításához szükséges paraméterek

A $\underline{\underline{d}}$ mátrix segítségével ezután előállíthatjuk a kívánt l rendre vonatkozó $\underline{\underline{R}}_l$ forgatási mátrixot az alábbi egyenletek szerint [25].

$$R_{-m',-m}^l = d_{-m',-m}^l \cos(m'\alpha + m\gamma) - (-1)^{m'} d_{m',-m}^l \cos(m'\alpha - m\gamma) \quad (77a)$$

$$R_{-m',0}^l = \sqrt{2} d_{0,m'}^l \sin(m'\alpha) \quad (77b)$$

$$R_{-m',m}^l = d_{-m',-m}^l \sin(m'\alpha + m\gamma) + (-1)^{m'} d_{m',-m}^l \sin(m'\alpha - m\gamma) \quad (77c)$$

$$R_{0,-m}^l = -\sqrt{2} d_{m,0}^l \sin(m\gamma) \quad (77d)$$

$$R_{0,0}^l = d_{0,0}^l \quad (77e)$$

$$R_{0,m}^l = \sqrt{2} d_{m,0}^l \cos(m\gamma) \quad (77f)$$

$$R_{m',-m}^l = -d_{-m',-m}^l \sin(m'\alpha + m\gamma) + (-1)^{m'} d_{m',-m}^l \sin(m'\alpha - m\gamma) \quad (77g)$$

$$R_{m',0}^l = \sqrt{2} d_{0,m'}^l \cos(m'\alpha) \quad (77h)$$

$$R_{m',m}^l = d_{-m',-m}^l \cos(m'\alpha + m\gamma) + (-1)^{m'} d_{m',-m}^l \cos(m'\alpha - m\gamma) \quad (77i)$$

A (77) egyenletekben $m' > 0$, illetve $m > 0$. A szögváltozó gömbharmonikusokkal való kifejtésének értelmében minden egyes l rendhez, tehát az adott l rendhez tartozó $(2l+1)$ függvényre elkészítjük ezt az $\underline{\underline{R}}_l$ ortogonális forgatási mátrixot. Végül ezeket egyetlen $\underline{\underline{R}}$ mátrixba töltjük bele, mégpedig úgy, hogy az adott l rendekhez tartozó $\underline{\underline{R}}_l$ mátrixok ennek diagonálisában helyezkednek el. A mátrix többi eleme nulla. Ezt ábrázolja az alábbi (12) kép.

$$\mathbf{R} = \left[\begin{array}{c|cccc|cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \mathbf{X} & \dots \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cccc} 1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}^1 & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{R}^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right]$$

12. ábra. Az $\underline{\underline{R}}$ forgatási mátrix szerkezete [18]

A transzportkód ezzel a módszerrel, a valós értékű harmonikus gömbfüggvények forgatásának felhasználásával számítja ki a $\underline{\underline{B}}_f$ mátrix értékét. Ezzel egyfelől az eredmények pontossága is növelhető, másfelől nagyon jelentős mértékű futási időt spórolhatunk meg. Ez magától értetődő, hiszen csak egyetlen $N_c \times N_c$ méretű mátrixot szükséges kellő pontossággal numerikusan kiintegrálni, majd ezt az adott felületi elem normálisának megfelelően transzformálva megkaphatjuk $\underline{\underline{B}}_f$ értékét a tekintett f felületi elemre. A $\underline{\underline{B}}_z$ mátrix forgatásának műveletszáma pedig jelentősen kisebb, mint az egyes $\underline{\underline{B}}_f$ mátrixok közvetlen numerikus integrálása az elvárt pontossággal. A még gyorsabb működés érdekében a program észleli, ha olyan felületi normális következik, amely a korábbi forgatások során már előfordult, és ekkor nem értékeli ki újból a mátrixot.

4.1.2. Numerikus nehézségek

A (72) egyenletben megjelenő abszolútértékes integrálhoz hasonló kifejezés egyéb másodrendű módszerek, pl. a páratlan paritású P_N transzportszámítási módszer esetében is előkerül [6]. Így azt mondhatjuk, hogy az ennek számításából fakadó numerikus nehézségek a másodrendű módszerek közös jellemzői, így indokolt és egyéb alkalmazásokban is hasznos, ha ennek minél hatékonyabb megoldását dolgozzuk ki.

Tovább gyorsítaná az integrálás menetét, ha a kifejezést nem mindkét változója szerint integrálnánk numerikusan. A (72) egyenlet ϕ változója szerint valójában lehetséges a kifejezést analitikus úton integrálni [10], ebben az esetben már csak a $z \geq 0$ féltéren való μ -függő részt szükséges S_{N_k} kvadraturával számítani. Ez a trükk szintén műveletszámot, így számítási időt is megspórol számunkra, hiszen elegendő egyetlen egydimenziós Legendre-kvadraturát előállítani és ezzel a μ változó szerint numerikusan integrálni.

Esetleges megoldásként felvetjük, hogy létezhet a kifejezésnek mindkét változó szerint analitikusan integrálható formája, de általánosságban a gömbharmonikusok nem a féltéren, hanem a teljes 4π szögtartományon rendelkeznek kedvező tulajdonságokkal, így ez a munkám során csak teoretikus értelemben vetült fel.

Izgalmas kérdés, hogy mi történik, ha magát a peremfeltételt fogalmazzuk meg másképp. Jelen munka távlati célja, hogy a páros paritású P_N transzportszámítási módszer esetében megvizsgálja egy elsőrendű egyenletekre kidolgozott ún. Riemann-módszer alkalmazhatóságát peremfeltételek megfogalmazására. A Riemann-módszer már szögben diszkrétizált elsőrendű egyenletek esetében használatos; arra szolgál, hogy egy vizsgált mennyiségről eldöntsük, hogy az az adott felületen kimenő vagy bemenő jellegű, olyan térbeli diszkrétizáció esetén, ahol nincsenek ki-

tüntetett irányok - ilyen a P_N közelítés is. A kimenő vagy bemenő jelleg megállapítása a felületi kifolyási tag szögben diszkretizált együttható mátrixának sajátértékei alapján történik [7].

5. Kódok tesztelése

Ebben a fejezetben a diffúziós és a páros paritású P_N kódokra elvégzett tesztfeladatok és azok eredményei kerülnek bemutatásra, illetve elemzésre. Minden tesztfeladat esetében feltüntetjük a konvergencia- vagy hálózérsékenységi vizsgálat eredményeit mind táblázatos, mind pedig grafikonon való ábrázolás formájában. Utóbbi a közölt adatok szemléltetését, ezek értelmezését nagyban elősegíti. Az egyes tesztfeladatok esetében a kapott eredményeket diszkutáljuk, és a kódok helyes működésére vonatkozóan következtetéseket vonunk le.

Elsőként bemutatjuk a diffúziós program működésének ellenőrzésére választott analitikus tesztfeladatot és annak eredményeit. Ezután rátérünk a páros paritású P_N transzportkód tesztfeladatokra vonatkozó megoldásainak elemzésére is. Ismertetjük a kétdimenziós homogén, illetve heterogén tesztproblémákat és megoldásaikat, és értékeljük ezeket a referenciamegoldások fényében. Ezt követően kitérünk a Godiva benchmarkra, zárásként pedig a Hébert benchmark-probléma diffúziós és P_1 számításokkal kapott eredményeit vetjük össze a választott referencia-eredménnyel, valamint ezeket a számításokat egymáshoz is hasonlítjuk annak érdekében, hogy demonstráljuk a diffúzió és a P_1 transzportközelítés kapcsolatát.

5.1. Diffúziós kód tesztelése

Természetesen az elkészített diffúziós reaktorfizikai kód helyes működését valamilyen módon alá szükséges támasztani. A tesztproblémák tárháza majdhogynem végtelen; bizonyos speciális esetekben például analitikusan megoldható feladat megoldásfüggvényéhez viszonyítjuk a kapott eredményt, máskor pedig egyéb, már valamilyen módon validált kódok számításaival vetjük össze saját számításainkat. Meg kell jegyeznünk, hogy ebből a szempontból egy program legerősebb tesztje valamilyen analitikusan kiértékelhető feladat megoldása és az analitikus megoldással való egyezés kimutatása. Azonban a való életben számítandó példák bonyolult szerkezetük miatt általános esetben analitikus megoldással nem rendelkeznek, így a tesztfeladatok másik csoportjának is megvan a maga előnye és helye a reaktorfizika gyakorlatában. Más kódok eredményeihez való viszonyításkor kihasználhatjuk, hogy a Monte Carlo módszerek bizonyos értelemben alkalmasak a neutrontranszport-egyenlet közvetlen megoldására, így nagyon gyakran használt és egyben kedvező megoldás egy Monte Carlo transzportkód eredményeit választani referenciaként.

5.1.1. Tesztfeladatok

Analitikus tesztprobléma

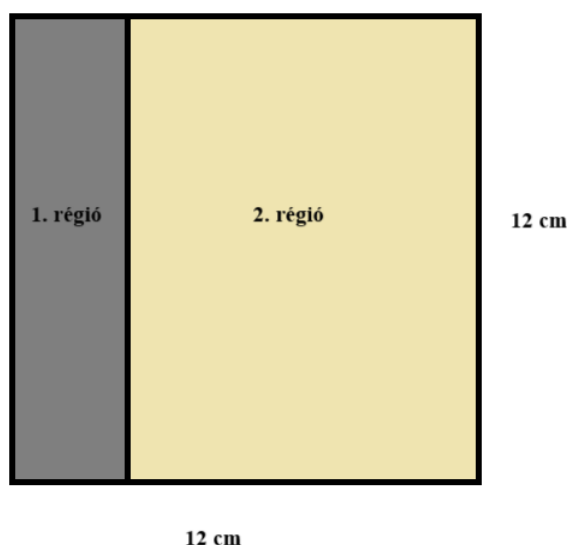
A diffúziós program működésének tesztelésére egy analitikusan kiértékelhető feladatot választottunk, mivel a csupán helytől függő egycsoport diffúzióegyenletnek létezik analitikus megoldása bizonyos geometriákra. A választott egydimenziós probléma valójában egy másik, későbbiekben majd a páros paritású P_N transzportkód tesztelésére felhasznált kétdimenziós feladat aleseteként adódik. Ezt a kétdimenziós feladatot célszerű itt bemutatni, a következő alfejezetben pedig csak hivatkozni rá.

A tesztprobléma egy fix forrásos egycsoportfeladat. Geometriája egyszerű felépítésű, egy $12\text{ cm} \times 12\text{ cm}$ méretekkkel rendelkező négyzet, amelyben két anyagi régiót definiáltunk azonos csoportállandó-készlettel. A geometria határán vákuum peremfeltételt írunk elő. A probléma

csoportállandó-készletét a (5) táblázat foglalja össze, míg geometriai modelljét a (13) ábra szemlélteti.

Csoportállandó	
$\Sigma_t[\frac{1}{cm}]$	5.0
$\Sigma_a[\frac{1}{cm}]$	0.5
$\chi[-]$	0.0
$\nu\Sigma_f[\frac{1}{cm}]$	0.0
$\Sigma_s[\frac{1}{cm}]$	4.5
$S[\frac{1}{cm^3s}]$	1.0

5. táblázat. A kétdimenziós homogén tesztfeladat csoportállandói



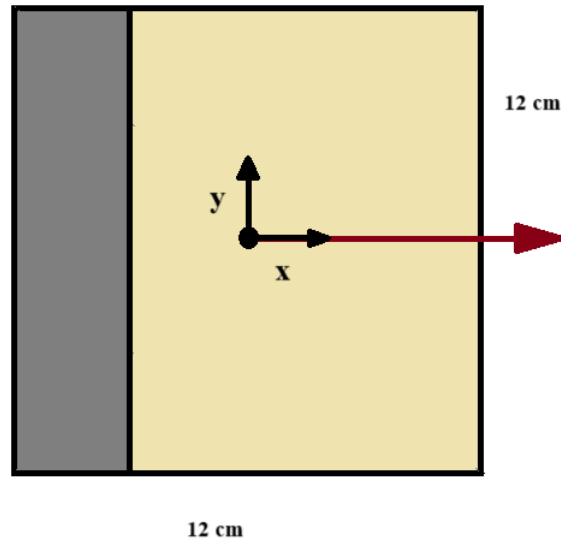
13. ábra. A kétdimenziós homogén tesztfeladat geometriája

A geometria és a végelem-háló fájlok létrehozása a már korábban bemutatott Gmsh program segítségével történt. Mivel a számítások térbeli diszretizációtól való függését is vizsgáltuk, 6 db különböző finomságú hálót hoztunk létre a tesztproblémára. Ezek a felhasznált végelem-hálók mind strukturált hálók, amelyek térfogati elemekként négyszög típusú elemeket, felületi elemként pedig vonalelemeket alkalmaznak. A tesztfeladat számítása során használt hálók fő paramétereit - nódus-, illetve elemszámait - a (6) táblázat foglalja össze.

Azonosító	Nódusszám [-]	Elemszám [-]
1	110	128
2	196	221
3	441	480
4	1681	1760
5	4489	4620
6	40401	40800

6. táblázat. A kétdimenziós homogén tesztfeladatra generált végelem-hálók paramétereit

A diffúziós esetben csak az 1–5. hálókcal dolgoztunk. A következőkben megnézzük, hogy a bemutatott kétdimenziós tesztproblémából hogyan származtatható egy a diffúziós kód helyes működésének demonstrálására hivatott egydimenziós, analitikus megoldással rendelkező feladat. A (10) ábrán látható tesztfeladatot megoldjuk a diffúziós kóddal, és a fluxus térbeli eloszlását kiértékeljük az alábbi (14) ábrán szemléltetett módon az $(x > 0; y = 0)$ egyenes mentén.



14. ábra. A diffúziós kódra alkalmazott 1D tesztfeladat származtatása

Ekkor valójában a diffúzióegyenlet megoldását kapjuk az adott egyenes mentén, mivel a kétdimenziós tesztfeladat méretei és csoportállandói miatt a keresztirányú kifolyás elhanyagolhatónak tekinthető. A Robin-peremfeltétel egydimenziós diffúzióegyenletre való alkalmazásával annak analitikus megoldását állíthatjuk elő:

$$D \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) - \Sigma_a \Phi(x) + S = 0. \quad (78)$$

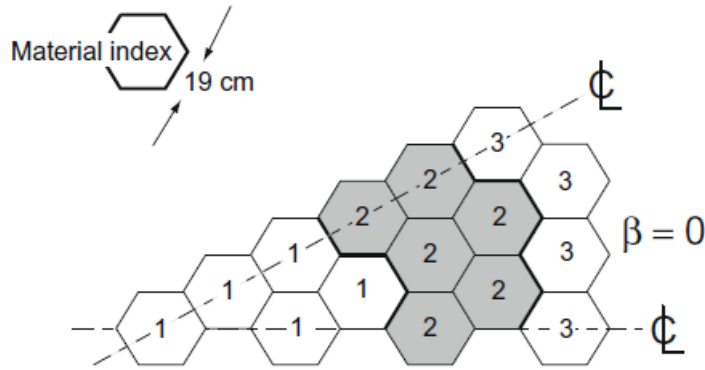
A megoldást a $\Phi(x) = C_1 + C_2 e^{-\frac{x}{L}}$ alakban keressük, ahol $L = \sqrt{\frac{D}{\Sigma_a}}$ az ún. diffúziós hossz [32]. A peremfeltételt kihasználva az alábbi (79) egyenlet szolgál a probléma analitikus megoldásaként:

$$\Phi(x) = 2 - 1.465 e^{-\frac{x}{0.3651}}. \quad (79)$$

A tesztproblémánál meghatározandó tehát a skalárfluxus eloszlása az adott egyenes mentén, illetve a geometria határán a skalárfluxus konkrét értéke. Ennek az egydimenziós feladatnak a kiértékelésével még foglalkozunk a fejezet során.

Hébert benchmarkprobléma

A készített diffúziós kód hasadási esetekre való alkalmazhatóságát egy kétdimenziós benchmarkproblémán keresztül mutatjuk be. Ez egy VVER típusú reaktor zónáját modellező feladat [17], amelyet nem csak a diffúziós, hanem a páros paritású kód P_1 közelítésével is megoldunk, ezen keresztül rávilágítva, hogy ezek a módszerek egymással egyenértékűek. Valójában a benchmarkprobléma nem egy valós zónát reprezentál, de a VVER típusú reaktorokhoz hasonlóan hatszöges elrendezésben tartalmaz kazettákat. A probléma geometriáját és felépítését mutatja számunkra a (15) ábra. A választott benchmarkprobléma szintén egycsoportfeladat, csoportállandóit az alábbi (7) táblázat tartalmazza.



15. ábra. A kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma modellje

Csoportállandó	1. régió	2. régió	3. régió
$D[cm]$	13.3333333333	17.54385964912	4.444444444445
$\Sigma_a[\frac{1}{cm}]$	0.0120	0.0010	0.0750
$\chi[-]$	1.0000	0.0000	0.0000
$\nu\Sigma_f[\frac{1}{cm}]$	0.0155	0.0000	0.0000
$\Sigma_s[\frac{1}{cm}]$	0.0130	0.0180	0.0000

7. táblázat. A kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma csoportállandói

Az előző tesztfeladathoz hasonlóan itt is vizsgáljuk a számítások hálózérékenységet, ezért 5 db különböző felbontású, háromszögelemből álló végelem-hálót állítottunk össze. Ezek nódus-, illetve elemszámai megtalálhatók az alábbi (8) táblázatban.

Azonosító	Nódusszám $[-]$	Elemzészám $[-]$
1	403	804
2	1531	3060
3	3385	6768
4	5965	11928
5	9721	18540

8. táblázat. A kétdimenziós Hébert benchmarkra generált végelem-hálók paraméterei

A feladatot a számolt effektív sokszorozási tényező tekintetében hasonlítjuk egy referenciamegoldáshoz. A referenciamegoldást egy Raviart–Thomas végelem-módszert alkalmazó SP_N kód SP_1 számítása szolgáltatja [17], amely egyenértékűnek tekinthető a diffúzióval. Ezen felül a diffúziós és a P_1 megoldásokat a skalárfluxusra kapott térbeli eloszlások tekintetében is összehasonlítjuk.

5.1.2. Számítási eredmények

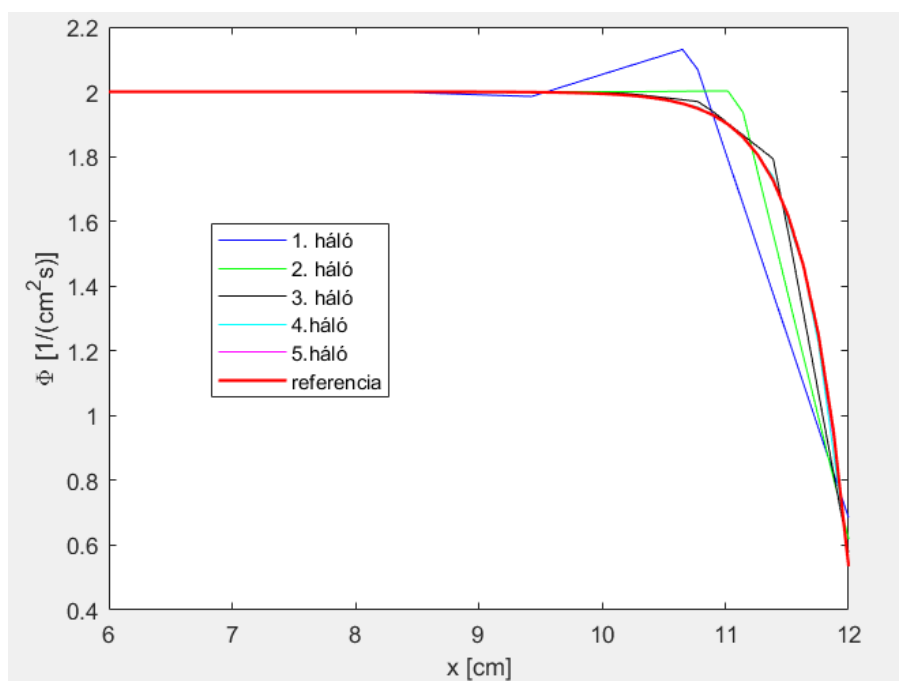
Analitikus tesztfeladat

A diffúziós kódot tehát futattuk a páros paritású P_N kód esetében is alkalmazott kétdimenziós heterogén tesztfeladatra. Számításokat végeztünk több különböző sűrűségű strukturált hálózakkal, amely hálók fő paramétereit már korábban, a tesztfeladat bemutatásánál ismertettük. Itt ismét megjegyezzük, hogy csak az 1 – 5. azonosítójú végelem-hálókat használtuk fel ennél

a tesztproblémánál. A diffúziós számítások futtatása után az eredményként kapott skalárfluxus-eloszlásokat a hálók generálására is alkalmazott Gmsh programban értékeltük ki. A programban a skalárfluxus-eloszlások utólagos feldolgozásával kiértékeljük a kívánt egyenes mentén vett függvényértékeket 50 pontban a tekintett 6 cm-es tartományon.

Az analitikus referenciamegoldás előállításánál kiszámoltuk a (79) egyenletben megadott függvény értékeit ugyanezekben a pontokban. Az eredmények referenciához való viszonyítását két módon végeztük el. Egyfelől összenéztük az egydimenziós feladatra kapott konkrét fluxuseloszlásokat az analitikus görbe menetével. Másfelől pedig összehasonlítottuk az egyes függvényértékeket a geometria határpontjában, vagyis az $x = 6 \text{ cm}$ helyen. Ezt táblázatos formában feltüntetjük az alábbiakban, de egy másik, ennél szemléletesebb módon is közöljük az eredményeket. Ez az ábrázolási mód a számított megoldás és a referencia különbségének abszolútértékét a háló δ_{elem} karakterisztikus méretének függvényében log-log skálán tünteti fel.

A különböző végelelem-hálók esetében számított egydimenziós skalárfluxus-eloszlásokat, valamint a referenciaként szolgáló analitikus módon származtatott görbét tartalmazza az alábbi (16) grafikon.



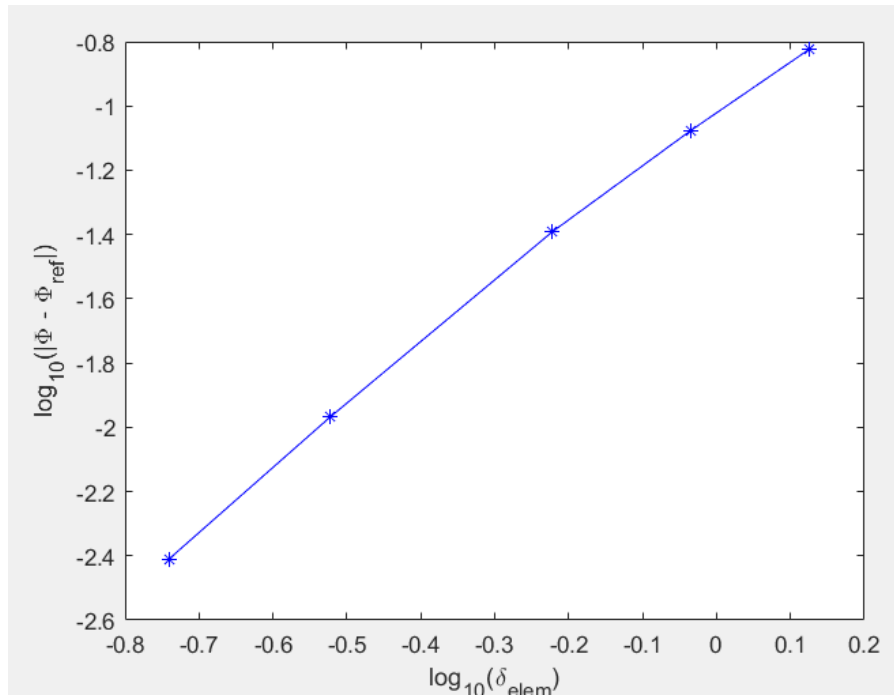
16. ábra. Az skalárfluxus eloszlása különböző végelelem-hálókra

A (16) ábrát tekintve megállapíthatjuk, hogy az 1 – 2. hálók esetében a megoldások nem tudják megfelelően lekövetni az analitikus görbe menetét a határfelület közelében. Viszont bizonyos hálósűrűség után azt tapasztaljuk, hogy az eredményként kapott fluxuseloszlások szinte tökéletes átfedésben vannak a referenciamegoldással (4 – 5. hálók). Ez alapján azt mondhatjuk, hogy a diffúziós reaktorfizikai kód megfelelően működik, a diffúzióegyenletet helyesen oldja meg kellően finom térbeli diszkretizáció esetén.

A kód eredményeinek elemzésére felhasznált másik módszer a skalárfluxus adott pontban vett értékeinek referenciához való viszonyítása; mi ezt a határponton ($x = 6 \text{ cm}$) végeztük el. Táblázatos formában összefoglaltuk és a már említett logaritmikus grafikonon is ábrázoltuk ennek eredményeit.

Megoldás	Skalárfluxus ($\Phi[\frac{1}{cm^2s}]$)	Relatív hiba [%]
1. háló	0.684919	28.02
2. háló	0.618917	15.69
3. háló	0.575646	7.59
4. háló	0.545748	2.01
5. háló	0.538895	0.73
analitikus	0.535000	-

9. táblázat. A skalárfluxus értéke az $x = 6$ cm pontban különböző végelelem-hálókra



17. ábra. A referenciától való eltérés a háló karakterisztikus méretének függvényében

Amennyiben helyes az egydimenziós diffúzióegyenlet reaktorfizikai kóddal való számítása, a (17) grafikonon egy négyzetesen javuló tendenciát kell visszakapnunk. Az említett diagramon valóban egy kettes meredekségű, egyenesnek tekinthető görbét látunk megjeleníteni, így ismét alátámasztást nyer az a következtetés, hogy a felállított diffúziós kód helyesen működik. A (9) táblázatban feltüntetett relatív hibaértékek hálósűrítéssel való csökkenése szintén erősíti ezt a konklúziót; látható, hogy az 5. hálónál a relatív hiba 1% alá csökken.

Hébert benchmarkprobléma

A Hébert benchmarkprobléma vizsgálatakor a feladat k_{eff} effektív sokszorozási tényezőjét volt szükséges meghatározni, ezt a paramétert választottuk a saját számításaink referenciához való viszonyítására. Ahogyan már említettük, a diffúziós kóddal nem csupán egyetlen kiválasztott végelelem-háló esetében végeztünk számításokat, hanem 5 db különböző felbontású hálóra készítettünk megoldásokat, annak érdekében, hogy az eredmények térbeli diszkretizációjától való függést, azaz a számítások ún. hálóérzékenységét megvizsgáljuk.

Referenciaként egy a végelelem-módszer egyik speciális típusát alkalmazó SP_N kód ugyanerre a benchmarkra készített, [17] cikkben közölt eredményei szolgálnak. Ezek közül is a referenciaként választott kód legfinomabb térbeli diszkretizációjához tartozó SP_1 eredményeket tekintettük. A diffúziós kód által számított k_{eff} értékeket tünteti fel az alábbi (10) táblázat a

referenciamegoldással és az ettől számított abszolút eltérésekkel együtt - utóbbit $[pcm]$ mértékegységben adjuk meg.

Megoldás	Effektív sokszorozási tényező, $k_{eff}[-]$	k_{eff} abszolút eltérése $[pcm]$
1. háló	0.966838	-561.94
2. háló	0.970623	-183.37
3. háló	0.971542	-91.82
4. háló	0.971905	-55.22
5. háló	0.972081	-37.57
referencia	0.972457	-

10. táblázat. Az effektív sokszorozási tényező értéke diffúziós esetben

A (10) táblázat adatai alapján azt mondhatjuk, hogy a diffúziós számítások a választott referenciát jól közelítik, a végelem-háló sűrűségének növelésével a számított k_{eff} értékek a referenciaértékhez látszanak konvergálni. A legfinomabb háló esetében a referencia k_{eff} értéktől csak -37.66 pcm -el tér el a kód által számított eredmény. Kiemeljük, hogy az elvégzett benchmarkfeladat esetében ugyan vizsgáltuk az eredmények hálósűrűségtől való függését bizonyos mértékig, de a probléma hálófüggetlen megoldását nem kerestük meg. A különböző térbeli diszkretizációk esetében tapasztalt tendencia azonban arra enged következtetni, hogy a hálófüggetlen érték a referenciával még szorosabb egyezést mutatna. Összeségében tehát azt mondhatjuk, hogy a választott hasadásos feladatra készített diffúziós megoldások ismét a kód helyes működését igazolják.

5.2. Páros paritású P_N kód tesztelése

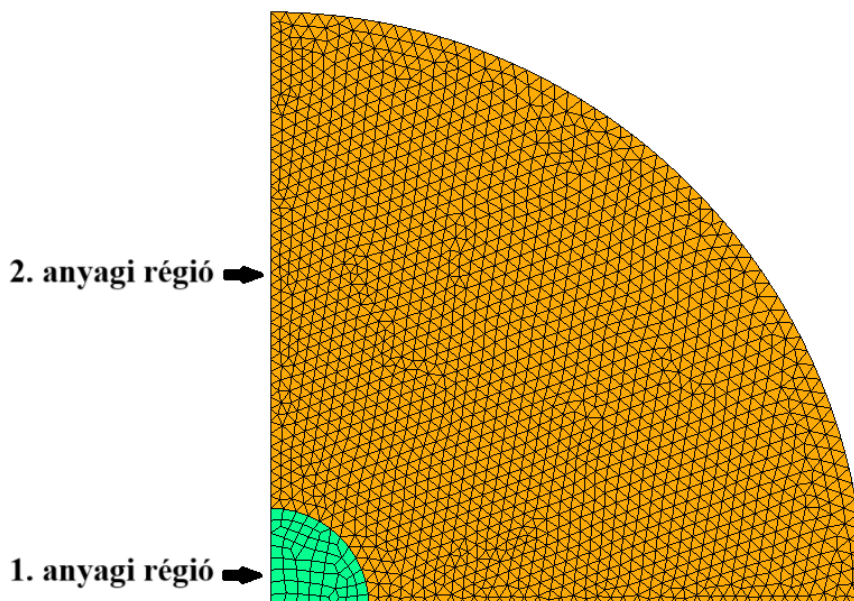
5.2.1. Tesztfeladatok

Az elkészült páros paritású P_N transzportkód helyes működésének igazolására ennek széleskörű tesztelése szükséges. Mi jelen dolgozat keretein belül a helyes működés bemutatására négy darab tesztfeladatot választottuk, ezekből kettőt már korábban, az előző alfejezetben ismertettünk. Ezeken felül egy heterogén anyagi összetételű fix forrásos problémát is választottunk, amelyre struktrálatlan hálón végeztünk számításokat, valamint megoldottuk az elkészült kóddal a Godiva benchmarkproblémát, amely már egy háromdimenziós probléma. Mindkét fix forrásos tesztfeladat referenciájaként egy szakadásos végelem-módszeren alapuló S_N transzportkód számítási eredményei szolgáltak; ezek a referenciamegoldások tehát egy diszkrét ordináták módszerét alkalmazó elsőrendű transzportkód futtatásából származnak. A Godiva benchmark referenciamegoldása pedig az XSDRN egydimenziós diszkrét ordinátás transzportkód eredménye. A következőkben az említett heterogén anyagi összetételű tesztfeladatot mutatjuk be.

Kétdimenziós heterogén tesztfeladat

A másik fix forrásos feladathoz hasonlóan ez is kétdimenziós egycsoport probléma, azonban itt már nem egy homogén rendszer megoldását keressük, hanem ennél komplexebb modellel foglalkozunk. A feladat geometriai modellje lényegében két egymással koncentrikus henger kétdimenziós metszetének 90° -os cikkelye; ezt a (18) ábrán látható végelem-háló, amely a probléma megoldásához készült, jól szemlélteti.

Mint már említettük, ez egy fix forrásos probléma, külső forrás viszont csak az 1. anyagi régióban, tehát a belső hengerben van előírva. A rendszer teljes határán vákuumperemfeltétel van értelmezve. A két anyagi tartomány csoportállandói is eltérnek, az anyagokra vonatkozó csoportállandókat a (11) táblázatban adtuk meg.



18. ábra. A kétdimenziós heterogén tesztfeladat geometriája

Csoportállandó	1. régió	2. régió
$D[cm]$	0.6666666666667	0.3333333333333
$\Sigma_a[\frac{1}{cm}]$	0.05	0.05
$\Sigma_s[\frac{1}{cm}]$	0.45	0.95
$S[\frac{1}{cm^3s}]$	1.00	0.00

11. táblázat. A kétdimenziós heterogén tesztfeladat csoportállandói

Egy ilyen tesztfeladat alkalmazása azért szükséges és egyben nagyon szemléletes, mert ellenőrzi a kód helyes működését erősebb transzportjellegű, ún. mély behatolásos problémákra is. A teljes rendszer határán értelmezett vákuum peremfeltétel is azt a célt szolgálja, hogy minél térfüggetlenebb legyen a feladat, és ne legyen a modellnek olyan belső régiója, ahol a perem hatása már elhanyagolhatónak minősül. Fontos kiemelni továbbá, hogy ez a feladat lehetőséget nyújt a kód strukturálatlan hálón való működésének ellenőrzésére is. Ez azért lényeges, mert strukturálatlan hálóval általánosságban sokkal jobban lekövethető a vizsgált rendszer geometriája, jobban megőrződik a számítások során például a rendszerben megadott anyagi régiók térfogatainak aránya, így a számítani kívánt probléma pontosabb eredményeket szolgáltat.

A feladat során a skalárfluxusnak a külső, 2. anyagi tartományon vett integrálját szükséges kiszámítani, ezt vetjük össze az alfejezet elején már megemlített S_N szakadásos végelelem-kód által számított referenciaértékkel. A többi tesztfeladathoz hasonlóan erre a geometriára is több különböző finomságú végelelem-hálót generáltunk, és használtunk fel a számítások során, annak érdekében, hogy az eredmények hálózérkenységét, térbeli diszkretizációtól való függését megvizsgáljuk. A készített hálók paramétereit az alábbi táblázat tartalmazza.

Azonosító	Nódusszám [–]	Elemszám [–]
1	37	52
2	781	860
3	3061	3220
4	75301	76100
5	300601	302200

12. táblázat. *A kétdimenziós heterogén tesztfeladatra generált végelem-hálók paraméterei*

A választott fix forrásos tesztfeladatok megoldásakor konvergenciavizsgálatot végeztünk, minden végelem-hálót futtattuk különböző N rendű transzportközelítésekre. Megoldások készültek P_1 , P_3 , P_5 , P_7 , illetve P_9 közelítésekre, így az eredmények szög szerinti diszkretizációját is tanulmányozhattuk - erre természetesen alapvetően is szükség van a P_N vagy más transzportközelítések reaktorfizikai kódba való implementálásakor.

Godiva benchmarkprobléma

Végül egy háromdimenziós benchmarkproblémát is kiválasztottunk a kód tesztelésére; ez az ún. Godiva benchmarkprobléma [26], amelyet kétcsoport energiaszerkezettel oldottunk meg. A probléma valójában egy homogén magas dúsítású fémurán gömb határán vákuum peremfeltétellel. A gömb sugara 8.7407 cm , izotópösszetételét az alábbi (13) táblázat tartalmazza.

Izotóp	Magsűrűség [$\frac{1}{\text{cm}^3}$]
^{234}U	4.9184E-04
^{235}U	4.4994E-02
^{238}U	2.4984E-03

13. táblázat. *A Godiva benchmarkprobléma izotópösszetétele*

A energiacsoportok határait pedig az alábbi táblázat foglalja össze.

	1. csoport	2. csoport
$E_{fels} [\text{eV}]$	$2 \cdot 10^7$	$9 \cdot 10^5$
$E_{als} [\text{eV}]$	$9 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^{-5}$

14. táblázat. *A Godiva benchmarkproblémára alkalmazott energiaszerkezet*

Figyeljük meg, hogy a csoportok határai eltérnek a zónaszámításoknál megszokott értékektől (termikus és gyors csoport határa kb. 0.625 eV). Ez annak köszönhető, hogy jelen esetben nem termikus rendszert vizsgálunk, így a gyors energiákra fókuszálva vesszük fel a csoportok határait.

A kiértékelés során a rendszer effektív sokszorozási tényezőjét viszonyítjuk egy referenciamegoldás k_{eff} -jéhez. A felhasznált referenciamegoldás az XSDRN egydimenziós diszkrét ordinátás transzportkóddal készült, továbbá nagyon fontos, hogy a referencia S_{32} megoldás az én számításaimhoz hasonlóan csak izotróp szórást vett figyelembe. Az így kapott referencia effektív sokszorozási tényező értéke 1.108181. Itt megjegyezzük, hogy eredetileg a Godiva kritikus rendszer lévén $k_{eff} = 1$ értékkel rendelkezik, viszont az anizotrópiát mellőzve ennél magasabb sokszorozási tényezőt kapunk.

Mint minden eddigi tesztfeladatnál, úgy itt is tanulmányoztuk a probléma térbeli és szögbeli diszkretizációtól való függését; konvergenciavizsgálatot végeztünk. Megoldottuk a feladatot P_1 - P_9 közelítésekkel, az alkalmazott végelem-hálók paraméterei pedig a következők.

Azonosító	Nódusszám [–]	Elemsszám [–]
1	199	953
2	467	2423
3	2812	15956
4	3720	21280
5	5216	30222

15. táblázat. *A Godiva benchmarkra generált végelemek-háló paraméterei*

Azért bír nagy jelentőséggel ez a tesztfeladat, mivel egyfelől az elkészült páros paritású P_N kód háromdimenziós működését is vizsgálhatjuk ezen keresztül, másfelől pedig ellenőrizhetjük az implementált többszórt modul helyességét.

A tesztfeladatok eredményeit a következő szakaszban mutatjuk be, ahol ezek diszkussziójára is sor kerül.

5.2.2. Számítási eredmények

Kétdimenziós homogén tesztfeladat

A páros paritású P_N kód tesztelésére választott feladatok közül először az egyszerűbb felépítésű fix forrásos problémát mutatjuk be. A kétdimenziós homogén tesztfeladat bemutatásánál már meghatároztuk azt a szempontot, amely mentén a kapott eredményeket referenciához hasonlítjuk, értékeljük, ez pedig a skalárfluxus teljes felületen vett integrálja. A referenciát egy szakadásos S_N végelemek-kód ugyanezen problémára végzett S_{32} számítási eredményei adják. A referenciaszámítások a (6) táblázat legfinomabb felbontású hálóján készültek. A probléma tehát futtatva lett a DEEP-END páros paritású P_N transzportkóddal több különböző finomságú végelemek-hálóra P_1 - P_9 közelítésekkel, vagyis az iránybeli és a térbeli diszkretizációt is vizsgáltuk.

A tesztprobléma meghatározandó mennyiségét nem a Gmsh modellező program segítségével értékeltem ki a számított skalárfluxus-eloszlás alapján, hanem magában a programban hoztam létre egy rutint, amely közvetlenül szolgáltatja a keresett integrál értékét. Megjegyezhetjük, hogy a reaktorfizika gyakorlatában, amikor ún. benchmarkproblémákat oldunk meg, nagyon gyakran integrális jellegű mennyiségek számítása a feladat. Az integrálás programban való megvalósítására egyébként a végelemekes technika nagyon kedvező.

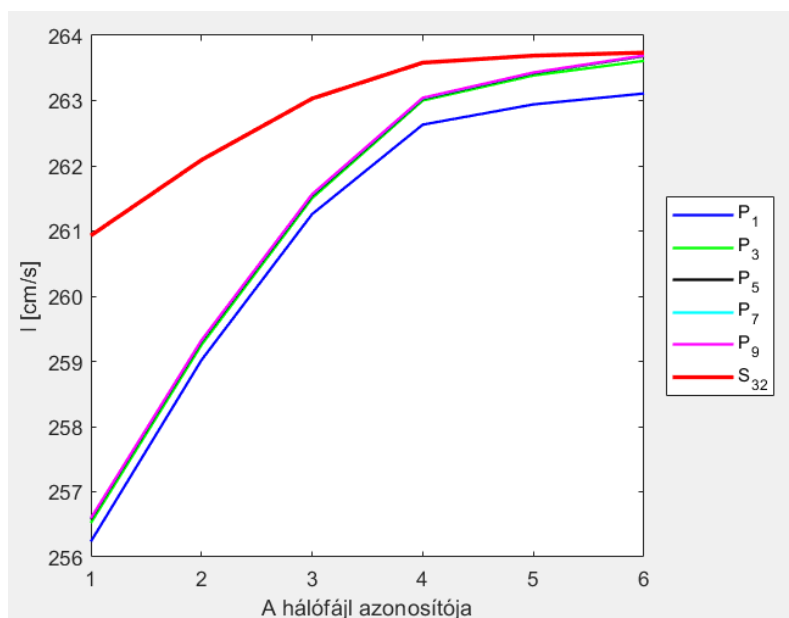
A tesztfeladatot tehát megoldottuk különböző térbeli diszkretizációk esetén többféle P_N közelítéssel is, tehát elvégeztük az adott problémára a számítások konvergenciavizsgálatát. A konvergenciavizsgálat eredményeit táblázatos formában közöljük, majd az adatok elemzésénél ábrákon is szemléltetjük a fontos tendenciákat.

$I[cm/s]$	P_1	P_3	P_5	P_7	P_9	S_{32}
1. háló	256.2360	256.5216	256.5770	256.5913	256.5963	260.9300
2. háló	259.0202	259.2259	259.3033	259.3192	259.3251	262.0890
3. háló	261.2581	261.3521	261.5407	261.5532	261.5635	263.0310
4. háló	262.6306	263.0007	263.0251	263.0358	263.0462	263.5810
5. háló	262.9412	263.3849	263.4185	263.4266	263.4310	263.6890
6. háló	263.1085	263.4089	263.6827	263.6891	263.6920	263.7350

16. táblázat. *A kétdimenziós homogén tesztfeladat konvergenciavizsgálatának eredményei*

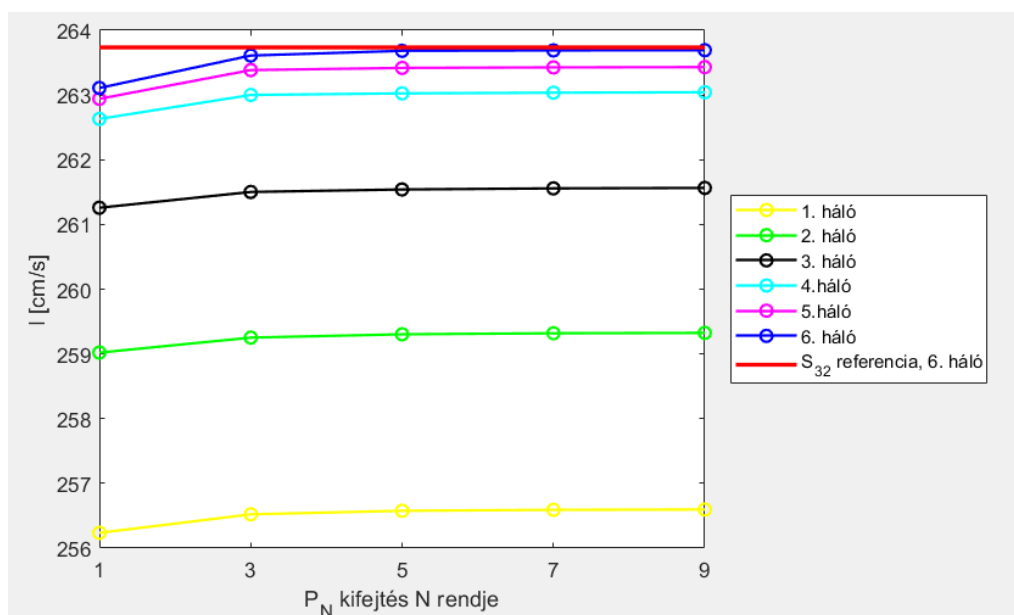
A (16) táblázatban közölt értékeket vizsgálva megfigyelhetünk két általános tendenciát. Ahogy

már a diffúziós kód eredményeinél is tárgyaltuk, részletesebb térbeli felbontás esetén általános-ságban véve pontosabb eredményt kapunk - ez természetesen a probléma hálófüggetlen meg-oldásának megtalálásáig bezárólag igaz. Ezt a jól ismert és sokat tapasztalt tendenciát mutatják számunkra a tesztfeladat DEEP-END transzportkóddal végzett számítási eredményei is. Hogy szemléletesebbé tegyük a fenti táblázat adatait, megmutatjuk a (19) ábrán az integrál értékét az alkalmazott végeselem-hálók függvényében különböző N kifejtési rendekre.



19. ábra. Az integrál értéke különböző hálók esetén (hom.)

Ezen a diagramon látható, ahogy a háló sűrítésével egyre közelebb jutunk a referenciamegoldás-hoz minden N kifejtési rend esetében. Az is megállapítható, hogy a kifejtési rend növelésével is egyre közelebb juthatunk az S_{32} számítás eredményeihez. Ennek bemutatására ábráztuk a keresett integrál N kifejtési rendtől való függését az egyes végeselem-hálókra ((20) ábra).



20. ábra. Az integrál értéke a kifejtési rend függvényében (hom.)

Az ábrázolt görbék menete minden hálósűrűség esetében ugyanaz, a szög szerinti diszkretizáció finomítása esetén az eredmények a referenciaértékhez lassulva konvergálnak - ez a transzport-számítási programok esetében egy gyakran észlelt tendencia. Az is jobban kivehető ezen az ábrán, hogy a hálósűrűség növelésekor csökken az eredményekben tapasztalt változás két egymást követő hálósűrűség között.

Végül az alkalmazott megmagasabb kifejtési rend ($N = 9$) esetében megmutatjuk az eredmények referenciától vett relatív eltérését is, ezt követően pedig a felsorolt eredményeket diszku-
táljuk.

$I \left[\frac{cm}{s} \right]$	P_9	S_{32}	Relatív hiba [%]
1. háló	256.5963	260.9300	1.66
2. háló	259.3251	262.0890	1.05
3. háló	261.5635	263.0310	0.56
4. háló	263.0462	263.5810	0.20
5. háló	263.4310	263.6890	0.10
6. háló	263.6920	263.7350	0.02

17. táblázat. $A P_9$ számítások eredményei a referenciához viszonyítva

Az elvégzett konvergenciavizsgálat eredményeit tekintve a felállított páros paritású P_N kód helyes működését feltételezhetjük. Mind a térbeli, mind pedig a szögbeli diszkretizáció finomításánál megfigyelt tendenciákból erre következtethetünk, másfelől a (17) táblázatban foglalt konkrét értékek referenciával való összevetése esetén is. A legfinomabb hálón végzett P_9 számítás a referenciakód ugyanezen hálón végzett S_{32} számításától mindössze 0.02%-ban tér el; ez a nagymértékű egyezés is a páros paritású P_N transzportkód megbízható működését bizonyítja.

Kétdimenziós heterogén tesztfeladat

A homogén tesztprobléma kiértékelése után rátérünk az ugyancsak kétdimenziós fix forrásos, de már heterogén felépítésű tesztfeladat tárgyalására. A kiértékelést a skalárfluxus 2. anyagi régióon képzett integrálja mentén végezzük el; szintén ugyanazon S_N kóddal vetjük össze a DEEP-END számítási eredményeit az adott tesztproblémára vonatkozóan. Már most fontos kiemelni, hogy a referenciaként szolgáló S_{12} megoldások nem ugyanazokon a végeelem-hálókon készültek, mint a páros paritású P_N számítások. Az S_{12} referenciamegoldás különböző finomságú végeelem-hálóit jellemzi az alábbi táblázat.

Azonosító	Nódusszám [—]	Elemsszám [—]
1	42	51
2	139	158
3	482	520
4	1847	1923
5	7156	7311

18. táblázat. Az S_{12} referencia végeelem-hálóinak paraméterei

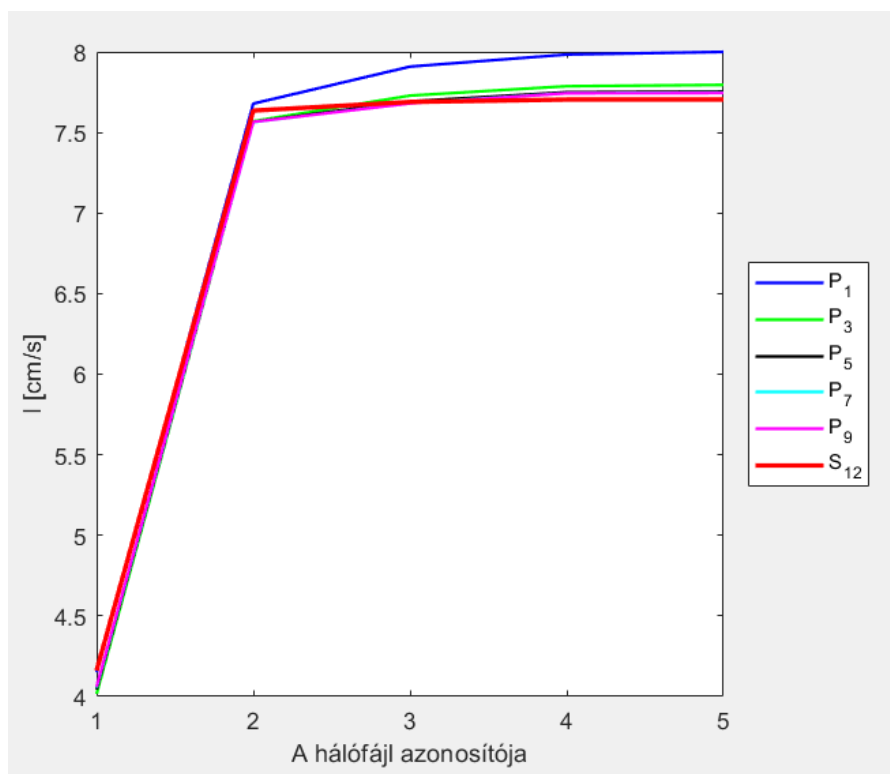
Az előző szakaszhoz hasonlóan a páros paritású P_N kód jelen tesztproblémára készített megoldásait is konvergenciavizsgálatnak vetjük alá a tesztfeladat teljeskörű vizsgálatának érdekében, vagyis vizsgáljuk az eredmények alakulását a szög- és térbeli diszkretizáció függvényében. A referenciával való összevetés alapját szolgáltató integrálérték ismét a transzportprogramon belül került kiszámításra, az egyes számítások eredményei nem igényeltek utólagos feldolgozást. Az alábbi (19) táblázat megadja az említett konvergenciavizsgálat során kapott adatokat a referenciaértékkel kiegészítve.

$I[cm/s]$	P_1	P_3	P_5	P_7	P_9	S_{12}
1. háló	4.149987	4.016277	4.042942	4.054847	4.06049	4.16098
2. háló	7.678924	7.569759	7.565334	7.564145	7.565462	7.63561
3. háló	7.908545	7.728711	7.692912	7.682833	7.679978	7.68932
4. háló	7.983073	7.783072	7.749582	7.744236	7.743038	7.70423
5. háló	7.999915	7.795217	7.753667	7.74684	7.744505	7.70469

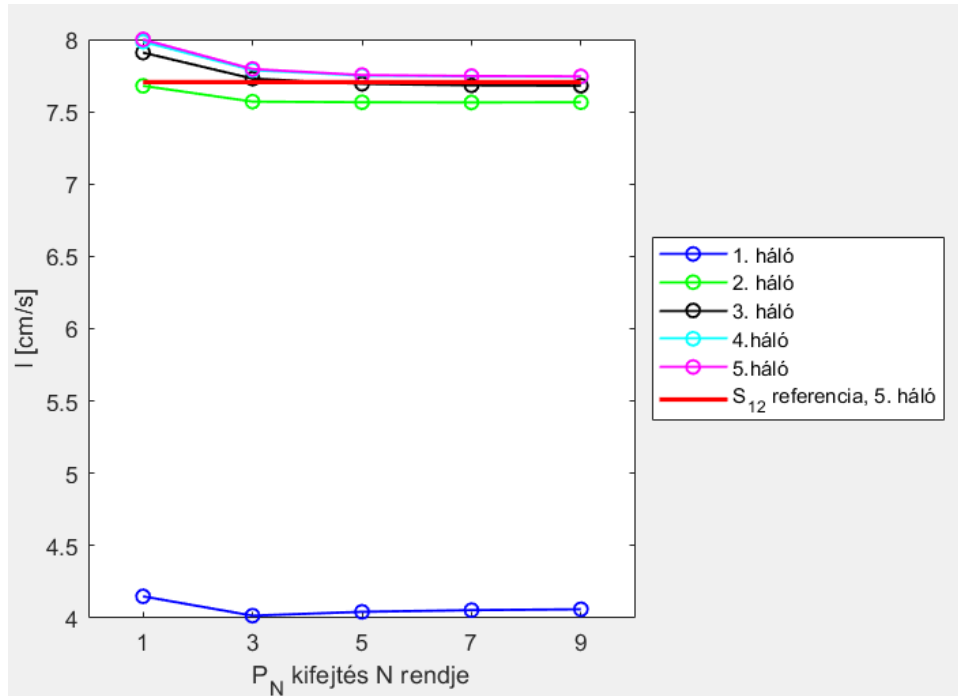
19. táblázat. *A kétdimenziós heterogén tesztfeladat konvergenciavizsgálatának eredményei*

Az adatok elemzéséből megállapíthatjuk, hogy finomabb tér- és szögbeli diszkretizáció esetén egyre közelítünk a számított referenciamegoldáshoz. Azonban az a tendencia, amelyet a homogén tesztfeladat esetében láttunk, miszerint minden egyes végeselem-hálót tekintve a kapott integrál értéke egyre közelebb jut a referenciához az N kifejtési rendet növelve, nem figyelhető meg. Esetünkben nem meglepő, hogy ezt a fajta tendenciát nem kaptuk vissza, hiszen míg az előző tesztfeladatnál ugyanazon a hálón dolgozott a tesztelésre szoruló és a referenciaként választott kód is, itt ez nem igaz; az S_N számítások 1 – 5. hálói sokkal sűrűbb felbontásúak, mint páros paritású P_N kód tesztelésre használt ugyanezen sorszámú hálók.

Hasonlóan az előző feladathoz, most is kétféleképpen szemléltetjük a konvergenciavizsgálat eredményeit; egyfelől ábrázoljuk az integrál értékét a kifejtési rend függvényében az egyes hálókra ((22) ábra), másfelől pedig a hálósűrűség függvényeként adjuk meg a keresett integrált a felhasznált N rendekre ((21) ábra).



21. ábra. *Az integrál értéke különböző hálók esetén (het.)*

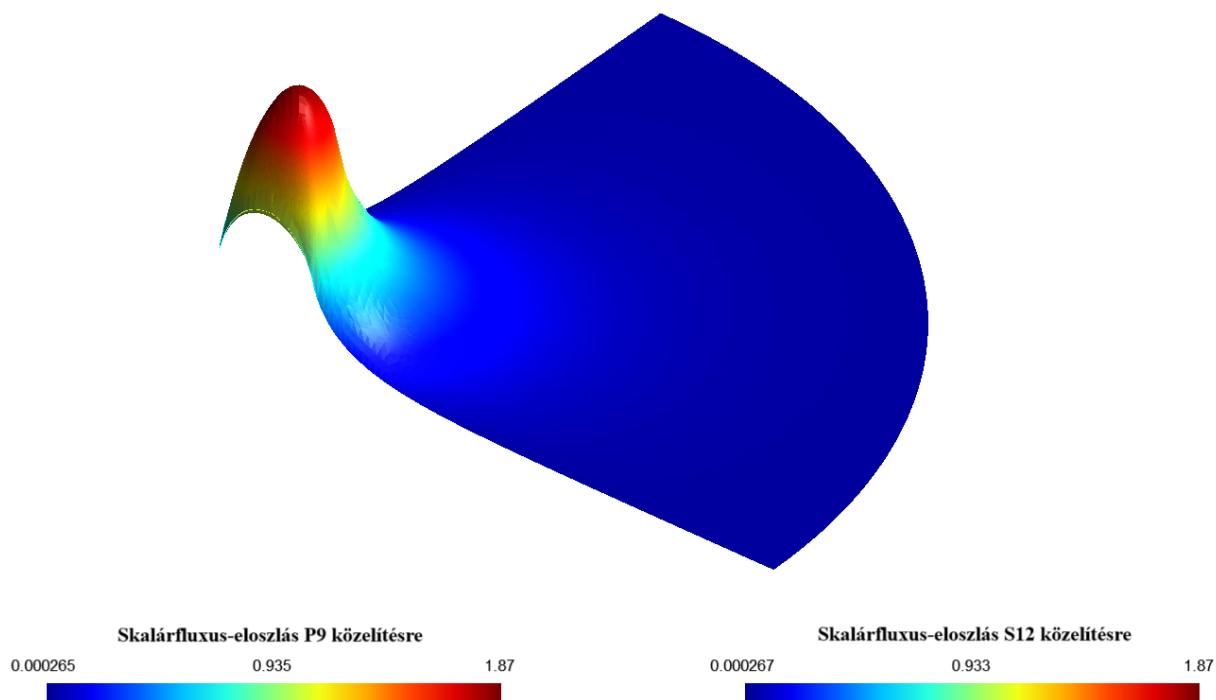


22. ábra. Az integrál értéke a kifejtési rend függvényében (het.)

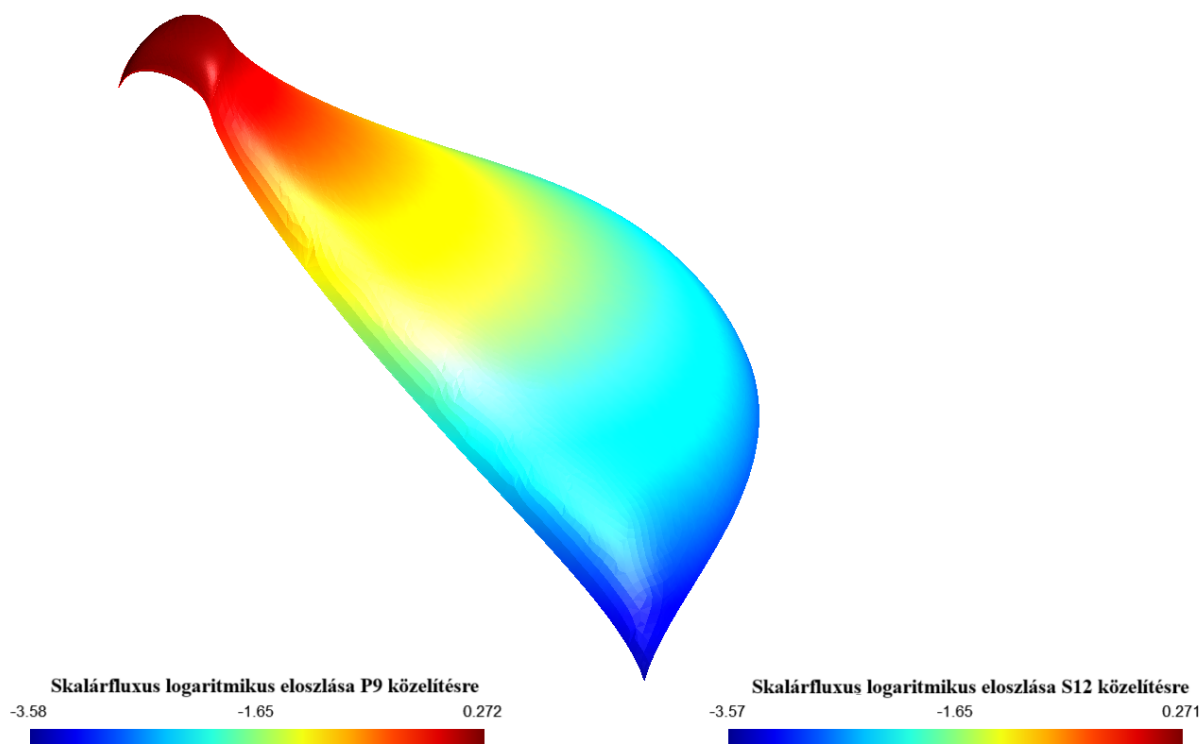
Összeségében tehát az mondhatjuk, hogy térben és az irányfüggés kezelésében együttesen egyre finomabb diszkretizációt alkalmazva valóban tartanak a páros paritású P_N kód számítási eredményei a választott referenciához. Hogy egyszerűen értelmezhető, számszerűsített példát is felsoroljunk, nézzük a legmagasabb kifejtési rend ($N = 9$) legfinomabb végeelem-hálón vett számítási eredményét a keresett integrálra. Ha az S_{12} megoldás legfinomabb térbeli diszkretizációja esetén kapott értékhez hasonlítjuk ezt, azt tapasztaljuk, hogy a páros paritású P_N kód eredményének referenciához viszonyított relatív hibája csupán 0.52%.

Az előbb példaként felhozott P_9 számítás eredményeként kapott skalárfluxus-eloszlást összevetjük az említett S_{12} megoldásával. A következő (23) kép a skalárfluxus-eloszlásokat ábrázolja a Gmsh programban megjelenítve, majd ugyanezen eloszlásokat tekinthetjük meg logaritmikus skálán is a (24) ábrán.

Az ábrákat diszkutálva elmondhatjuk, hogy a P_9 közelítés skalárfluxus-eloszlása szinte tökéletesen leköveti a referenciaeloszlást - ez logaritmikus ábrázolásnál is így van. Szabad szemmel a két eloszlás nem is különböztethető meg egymástól, ez a nagyon erős egyezés a korábban bemutatott konvergenciavizsgálat eredményeivel együtt pedig ismét alátámasztja a kód helyes működésének feltételezését. Kifejezetten fontos ez a tesztfeladat abból a szempontból, hogy nem csak diffúzív jellegű problémára, hanem mély behatolásos probléma esetén is igazolta az elkészített páros paritású P_N kód alkalmasságát reaktorfizikai problémák vizsgálatára, valamint a kód strukturálatlan hálón való megfelelő működését is bizonyította.



23. ábra. Skalárfluxus-eloszlás a P_9 és az S_{12} közelítésekre (5. háló)



24. ábra. Skalárfluxus-eloszlás logaritmikusan a P_9 és az S_{12} közelítésekre (5. háló)

Godiva benchmarkprobléma

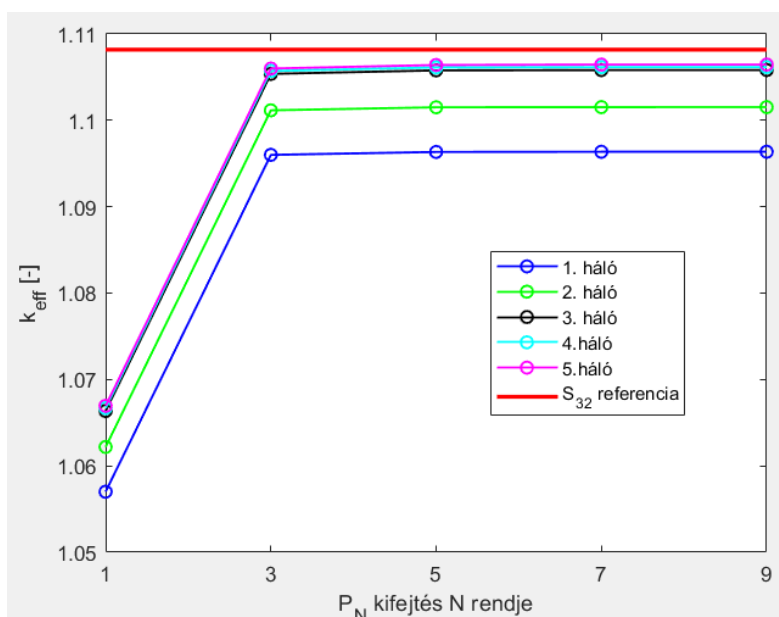
A kétdimenziós fix forrásos feladatok után rátérünk a Godiva benchmarkprobléma eredményeinek tárgyalására. A páros paritású P_N transzportkód eredményeit az effektív sokszorozási tényező tekintetében hasonlítjuk a választott referenciamegoldáshoz. Már előljáróban megje-

gyezzük, hogy a referenciaszámítás nem csak más transzportközelítéssel készült (S_{32}), de az XSDRN program a DEEP-END-től teljesen eltérő módszert alkalmaz térbeli diszkretizációként; végesdifferencia-módszerrel dolgozik, és egydimenziós számítást végez a rendszerre vonatkozóan.

A következőkben táblázatos ((20) táblázat) és grafikonos formában ((25) ábra) közöljük a konvergenciavizsgálat eredményeit. A (20) táblázat tartalmazza a P_1 - P_9 számítások effektív sokszorozási tényezőit mindegyik végeelem-háló esetében; a táblázat adatait diagramon is ábrázoljuk, vagyis felvesszük a k_{eff} értékének kifejtési rendtől való függését az egyes végeelem-hálókra.

k_{eff} [-]	P_1	P_3	P_5	P_7	P_9
1. háló	1.057004	1.096001	1.096339	1.096362	1.096365
2. háló	1.06219	1.101158	1.101510	1.101525	1.101530
3. háló	1.066351	1.105380	1.105781	1.105818	1.105818
4. háló	1.066675	1.106158	1.106158	1.106158	1.106161
5. háló	1.066950	1.105997	1.106406	1.106455	1.106456

20. táblázat. A Godiva benchmark konvergenciavizsgálatának eredményei



25. ábra. A k_{eff} értéke a kifejtési rend függvényében (Godiva)

Mind a térbeli, mind pedig a szögbeli diszkretizáció esetében azt a tendenciát tapasztaljuk, hogy a felbontás finomításával lassulva konvergál a számított effektív sokszorozási tényező a referenciához. Ismét kiemeljük, hogy ez a tendencia gyakran megfigyelhető transzportkódok esetében. Amennyiben a lefuttatott számítások közül a legmagasabb kifejtési rendűt tekintjük (P_9 megoldás), a legfinomabb hálón végzett megoldás effektív sokszorozási tényezője $-1181,6$ pcm-nyi abszolút eltérést mutat az 1.108181 referenciaértéktől, míg a legsűrűbb háló esetében ez csupán $-172,5$ pcm. Az utóbbi abszolút eltérés 0.16%-os relatív hibának felel meg.

Ez a konkrét számérték, illetve a konvergenciavizsgálat eredménye is arra enged következtetni, hogy erre a problémára is helytálló megoldást ad a kifejlesztett páros paritású P_N transzportkód. Ennek értelmében úgy tekintjük, hogy a kódba implementált többszoport számítási modul

helyesen működik, továbbá háromdimenziós problémák kezelésére is alkalmas a felállított reaktorfizikai kód.

Hébert benchmarkprobléma

A számítási eredményekről szóló fejezet zárásaként bemutatjuk a kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma DEEP-END kóddal készített P_1 megoldását. Ezt összevetjük mind a diffúzióanalízis alkalmazott referenciértékkel [17], mind pedig magával a diffúziós számítással, hogy megmutassuk, hogy a két számítási módszer tulajdonképpen egymással azonos. Ahogyan azt az 5.1.2. szakaszban is tettük, most is a probléma k_{eff} effektív sokszorozási tényezője szolgál a referenciával való összehasonlítás alapjául. A k_{eff} értékét hasadási feladatok esetében a kód a fő output fájlba kiírja.

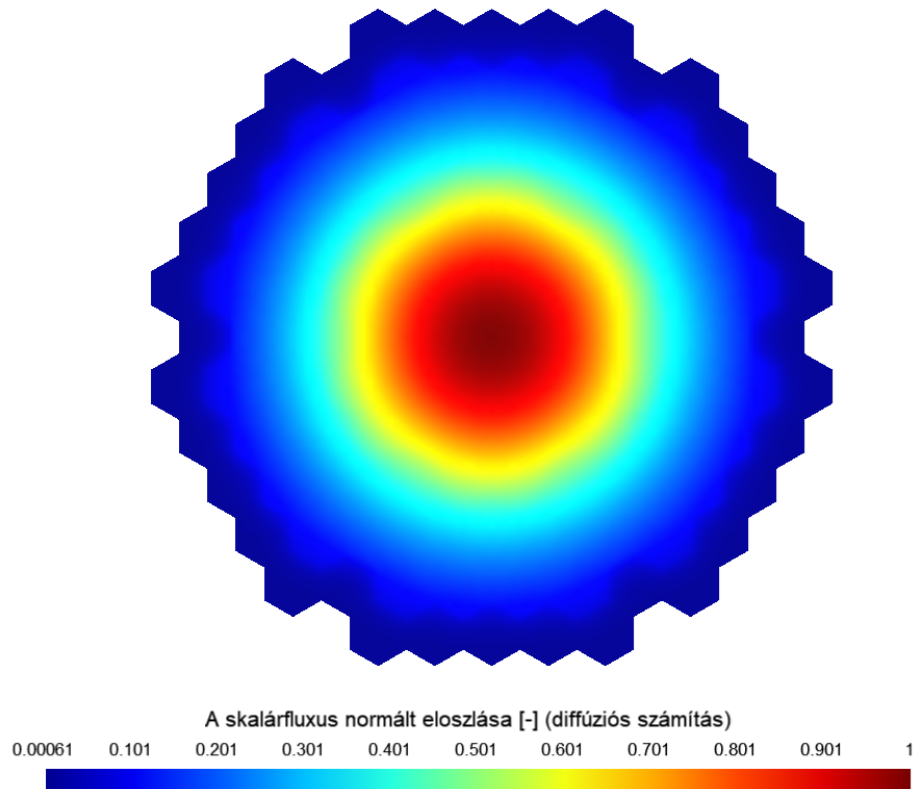
Ugyanazt a hálókészletet használtuk a számítás hálózékenysége vizsgálatára, mint amit a diffúziós kód esetében is alkalmaztunk. Elsőként tehát a referenciaként választott SP_1 megoldással vetjük össze a páros paritású P_N kód eredményeit különböző térbeli diszkrétizációk esetében. A (21) táblázat tartalmazza a számított effektív sokszorozási tényezőket és ezek referenciától vett abszolút eltéréseit P_1 közelítés esetén.

Megoldás	Effektív sokszorozási tényező $k_{eff}[-]$	k_{eff} abszolút eltérése [pcm]
1. háló	0.966838	-561.89
2. háló	0.970623	-183.40
3. háló	0.971542	-91.52
4. háló	0.971902	-55.48
5. háló	0.972080	-37.66
referencia	0.972457	-

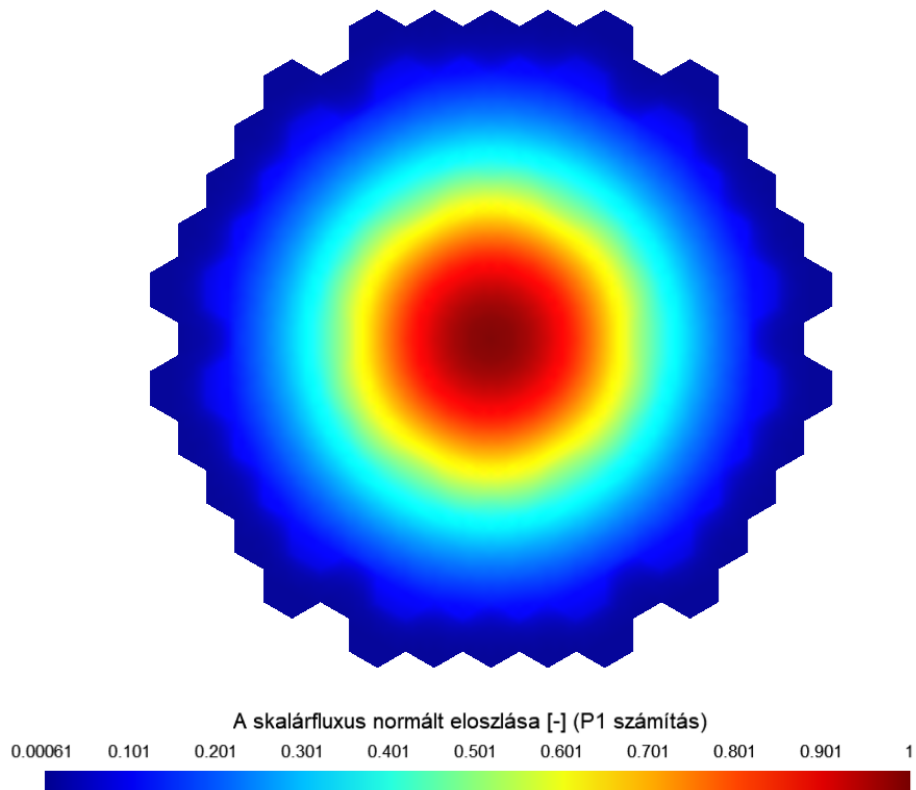
21. táblázat. Az effektív sokszorozási tényező értéke P_1 esetben

Megint csak azt tapasztalhatjuk, hogy a benchmarkprobléma egy diffúziós esetre vonatkozó referenciamegoldásával a páros paritású P_1 számítások a térbeli diszkrétizáció finomításával egyre szorosabb egyezést mutatnak. A legsűrűbb végelem-hálón elvégezve a feladatot, mindössze -37.66 pcm -nyire tér el a számított effektív sokszorozási tényező a referenciától. Bár az előző tesztproblémák transzport szempontjából erősebben tesztelték a kód helyes működését, fontosnak tartottuk heterogén geometriájú hasadási feladat esetén is megmutatni ezt. Másfelől pedig célunk az is, hogy megmutassuk, milyen nagyfokú egyezés található a munkám során fejlesztett diffúziós kód és páros paritású kód P_N ($N = 1$) számításai között; erre a célra bemutatjuk mindkét említett közelítés esetében az eredményként kapott normált skalárfluxus-eloszlást.

A (26) és (27) ábrák normált eloszlásait szemlélve megállapíthatjuk, hogy a két megoldási módszer során kapott térbeli skalárfluxus-eloszlások szinte egzaktul ugyanazok, az ábrázolt tizedesek esetében azonosnak tekinthetők. Mint már említettük a dolgozat során, P_1 esetben a DEEP-END páros paritású transzportkód lényegében a diffúzióegyenletet oldja meg, a skalárfluxusra vonatkozóan végez számításokat. A kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma esetében tehát a két közelítés közötti elméleti kapcsolatot konkrét reaktorfizikai számítások szintjén is meg tudtuk mutatni.



26. ábra. Normált skalárfluxus-eloszlás a 2D Hébert benchmarkproblémára (diffúzió)



27. ábra. Normált skalárfluxus-eloszlás a 2D Hébert benchmarkproblémára (P_1)

A következőkben a dolgozat tartalmának összegzése következik.

6. Összefoglalás

A dolgozat végén röviden összegezzük annak tartalmát. A dolgozat elsődlegesen a páros paritású P_N transzportközelítéssel foglalkozott, ezt mutatta be konkrét gyakorlatban való alkalmazásával, egy folytonos végeselem-módszeren alapuló reaktorfizikai kódva való implementálásával együtt.

Elsőként megfogalmaztuk a motivációt, amely munkánkat hajtotta - ez a másodrendű módszerek vizsgálata, numerikus tulajdonságaiknak felderítése volt egy válaszott másodrendű módszeren, a páros paritású P_N transzportszámítási módszeren keresztül. Ezt követően a témának egy részletgazdag elméleti háttérét tártam az olvasó elé. Esetünkben azért volt ilyen fontos az egyes módszerek és elméleti összefüggések részletes bemutatása, mert ezeknek közvetlen felhasználásával építettük fel a dolgozatban ismertetett diffúziós és páros paritású P_N végeselem-kódokat. Az elméleti szekció után rátértünk a gyakorlati vonatkozásokra is, mindkét reaktorfizikai program esetében bemutattuk a kódfejlesztés folyamatát, az elkészült kódok felépítését és működését. Külön figyelmet szenteltünk arra, hogy hangsúlyozzuk a két transzportközelítés közötti kapcsolatot, valamint hasonlóságait numerikus szempontból. Felhívtuk a figyelmet a páros paritású P_N módszer reaktorfizikai kódba való implementálásánál a másodrendű módszerek numerikus kihívásaira. Ezt a kihívást a felületi tag szög szerinti diszkretizációja jelenti, amelynek megfelelően pontos és hatékony numerikus számítása kulcskérdés a reaktorfizikai kód működésének szempontjából. Az elkészített páros paritású P_N , vagyis a DEEP-END kód esetében pedig felvetettünk konkrét javaslatokat arra vonatkozóan, hogy milyen lépések tehetők a kód hatékonyságának növelése és továbbfejlesztésének érdekében.

A programok tesztelésére változatos tesztfeladatokat oldottunk meg. A diffúziós kód helyes működését egy analitikus megoldással rendelkező egydimenziós tesztfeladat és a kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma esetén igazoltuk. A páros paritású P_N kódnál egy diffúzívabb jellegű és egy mélybehatolós problémára, valamint a Godiva benchmarkproblémára vonatkozóan mutattuk ki a helyes működést. Az egyes tesztfeladatokat és az ezek esetében kapott számítási eredményeket is részletesen bemutattuk a dolgozat során, az eredményeket pedig diszkutáltuk.

6.1. Kitekintés

A munka folytatásának a téma teljeskörű feldolgozására való igény számos jól meghatározott irányt szab. Elsődlegesen fontos lesz a DEEP-END kód további, széleskörű tesztelése erősen transzportjellegű problémák esetére is, valamint a hatékonyság növelésének és a futási idő csökkentésének érdekében szükséges a felületi szögmátrixok származtatására egy a jelenleginél hatékonyabb módszer kidolgozása is.

További célkitűzésként említhető, hogy a páros paritású P_N transzportszámítási módszer klasszikus származtatás szerinti peremfeltételét és az elsőrendű P_N transzportközelítés gyakorlatban alkalmazott peremfeltételeit egy keretrendszerbe foglaljuk, ezeknek egymással való kapcsolatait megvizsgáljuk. Távlati cél, hogy a numerikusan nehezen kezelhető alakban előálló peremfeltétel kiváltására megvizsgáljuk a dolgozat folyamán már említett Riemann-módszer alkalmazhatóságát.

Hivatkozások

- [1] Ackroyd, R. T. (1994): Foundations of finite element applications to neutron transport. Progress in Nuclear Energy 29: 43-56
- [2] Adams, M. L. (1991): Even-parity finite-element transport method in the diffusion limit. Progress in Nuclear Energy 25: 159-198
- [3] Azmy, Y. Y. - Sartori, E. (2010): Second-order neutron transport methods. Nuclear Computational Science, A Century in Review, Springer Science, Business Media, Chapter 2
- [4] Babcsányi Boglárka (2021): Development of a finite-element-based reactor physics code system for the solution of the simplified P_3 approximation to the neutron transport equation. Doktori disszertáció, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Nukleáris Technikai Intézet
- [5] Biedenharn, L. C. - Louck, J. D. (1981): Angular momentum in quantum physics. Addison-Wesley Publishing Company, Encyclopedia of Mathematics and its applications, Volume 8
- [6] Bielen, A. S. (2008): Spherical harmonics solution to second order forms of the Boltzmann transport equation using particle transport code SCEPTRE. Thesis in Nuclear Engineering, Pennsylvania State University, Graduate School, Department of Mechanical and Nuclear Engineering
- [7] Buchan, A. G. - Merton, S. R. - Pain, C. C. - Smedley-Stevenson, R. P. (2011): Riemann boundary conditions for the Boltzmann transport equation using arbitrary angular approximations. Annals of Nuclear Energy 38: 1186-1195
- [8] Chapman, S. J. (2018): Fortran for scientists and engineers. Fourth Edition, McGraw-Hill Education
- [9] Collado, J. R. A. - Rico, J. F. - Lopez, R. - Paniagua, M. - Ramirez, G. (1989): Rotation of real spherical harmonics. Computer Physics Communications 52: 323-331
- [10] de Oliveira C. R. E. (1987): Finite element techniques for multigroup neutron transport calculations with anisotropic scattering. Thesis for the degree of doctor of philosophy, Department of Nuclear Engineering, Queen Mary College, University of London
- [11] Dhatt, G. – Touzot, G. – Lefrançois, E. (2012): Finite element method. ISTE Ltd, London, John Wiley & Sons, INC.
- [12] Duderstadt, J. J. - Hamilton, L. J. (1976): Nuclear reactor analysis. John Wiley & Sons Ltd.
- [13] Faragó István - Horváth Róbert (2013): Numerikus módszerek. Egyetemi jegyzet, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Typotex
- [14] Gesh, C. J. (1999): Finite element methods for second order forms of the transport equation. Dissertation for the degree of doctor of philosophy, Texas A&M University
- [15] Geuzaine, C. - Remacle, J-F. (2023): The documentation for Gmsh 4.12.0 (development version). A finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. Gmsh Reference Manual

- [16] Golub, G. H. – Welsch, J. H. (1967): Calculation of gauss quadrature rules. Mathematics of computation, American Mathematical Society 94: 222-230
- [17] Hébert, A. (2010): Mixed-dual implementations of the simplified Pn method. Annals of Nuclear Energy 37: 498-511
- [18] Křivánek, J. - Konttinen, J. - Pattanaik, S. - Bouatouch, K. (2005) : Fast approximation to spherical harmonic rotation. Institut De Recherche En Informatique Et Systèmes Aléatoires, Campus Universitaire de Beaulieu, France
- [19] Kubatko, E. J. - Yeager, B. A. - Maggi A. L. (2013): New computationally efficient quadrature formulas for triangular prism elements. Computers & Fluids: 73, 187-201
- [20] Kubatko, E. J. - Yeager, B. A. - Maggi A. L. (2013): New computationally efficient quadrature formulas for pyramidal elements. Finite Elements in Analysis and Design 65: 63-75
- [21] Lewis, E. E. - Miller, W. F. Jr. (1984): Computational methods of neutron transport. John Wiley and Sons Ltd.
- [22] Longoni, G. (2004): Advanced quadrature sets, acceleration and preconditioning techniques for the discrete ordinates method in parallel computing environments. Dissertation for the degree of doctor of philosophy, University of Florida
- [23] Lux, I. - Koblinger, L. (1991): Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations. CRC Press
- [24] Mirza, A. M. - Iqbal, S. (2007): Finite element investigations for the construction of composite solutions of even-parity transport equation. Applied Sciences 9: 121-140
- [25] Nechaev, V. V. (1994): Calculation of rotation matrices for real spherical harmonics. Journal of Structural Chemistry 35: 115-117
- [26] O'Malley, B. - Kópházi, J. - Eaton, M. D. - Badalassi, V. - Warner, P. - Copestake, A. (2018): Discontinuous Galerkin spatial discretization of the neutron transport equation with pyramid finite elements and a discrete ordinate (S_N) angular approximation. Annals of Nuclear Energy 113: 526-535
- [27] Ronen, Y. (1986): Handbook of nuclear reactors calculations. CRC press, Volume 1
- [28] Saad, Y. (2003): Iterative methods for sparse linear systems. Society for Industrial and Applied Mathematics, Second Edition
- [29] Shemon, E. R. - Smith, M. A. - Lee, C. (2014): PROTEUS-SN methodology manual. Nuclear Engineering Division, Argonne National Laboratory (U.S. Department of Energy)
- [30] Stacey, W. M. (2001): Nuclear reactor physics. John Wiley & Sons Ltd.
- [31] Su, Z. – Coppens, P. (1994): Rotation of real spherical harmonics. Acta Cryst. A50: 636-643
- [32] Szatmáry Zoltán (2000): Bevezetés a reaktorfizikába, Egyetemi jegyzet, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Természettudományi Kar, Nukleáris Technikai Intézet

- [33] Szatmáry Zoltán (2010): Reaktorfizikai számítások, Egyetemi jegyzet, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Természettudományi Kar, Nukleáris Technikai Intézet
- [34] Welch, J. (2017): Isogeometric analysis for second-order forms of the neutron transport equation with applications to reactor physics. Thesis submitted for the degree of doctor of philosophy, Nuclear Engineering Group, Department of Mechanical Engineering, Imperial College London
- [35] Welch, J.- Kópházi, J. - Owens, A. R. – Eaton, M. D. (2017): A geometry preserving, conservative, mesh-to-mesh isogeometric interpolation algorithm for spatial adaptivity of the multigroup, second-order even-parity form of the neutron transport equation. Journal of Computational Physics 347: 129-146
- [36] Yousefi, M. - Zolfaghari, A. - Minuchehr, A. - Abbassi, M.R. (2017): Accurate reflective boundary condition in the P_N method, Annals of Nuclear Energy 109: 583-599
- [37] Zgainski, F-X. - Coulomb, J-L. - Maréchal, Y. (1996): A new family of finite elements: the pyramidal elements. Transactions On Magnetics 32: 1393-1396

Ábrák jegyzéke

1.	<i>Vizsgált térfogat felosztása végelemekre</i>	15
2.	<i>Első- és magasabb rendű háromszögelemek [29]</i>	15
3.	<i>Lagrange-bázis szemléltetése egy elsőrendű vonalelemre</i>	16
4.	<i>A CGFEM és a DGFEM szemléltetése egydimenziós példán</i>	16
5.	<i>A diffúziós kód működésének folyamatábrája</i>	20
6.	<i>A DEEP-END tesztelésére használt végeelem-háló</i>	22
7.	<i>A produkciós operátorokból felépülő hipermátrix sematikus ábrája</i>	25
8.	<i>A szórási operátorokból felépülő hipermátrix sematikus ábrája</i>	25
9.	<i>A konjugált gradiens módszer algoritmus [13]</i>	26
10.	<i>A páros paritású P_N kód működésének folyamatábrája</i>	28
11.	<i>A destruktív operátorokból felépülő hipermátrix sematikus ábrája</i>	29
12.	<i>Az $\underline{R}$ forgatási mátrix szerkezete [18]</i>	33
13.	<i>A kétdimenziós homogén tesztfeladat geometriája</i>	35
14.	<i>A diffúziós kódra alkalmazott 1D tesztfeladat származtatása</i>	36
15.	<i>A kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma modellje</i>	37
16.	<i>Az skalárfluxus eloszlása különböző végeelem-hálókra</i>	38
17.	<i>A referenciától való eltérés a háló karakterisztikus méretének függvényében</i>	39
18.	<i>A kétdimenziós heterogén tesztfeladat geometriája</i>	41
19.	<i>Az integrál értéke különböző hálók esetén (hom.)</i>	44
20.	<i>Az integrál értéke a kifejtési rend függvényében (hom.)</i>	44
21.	<i>Az integrál értéke különböző hálók esetén (het.)</i>	46
22.	<i>Az integrál értéke a kifejtési rend függvényében (het.)</i>	47
23.	<i>Skalárfluxus-eloszlás a P_9 és az S_{12} közelítésekre (5. háló)</i>	48
24.	<i>Skalárfluxus-eloszlás logaritmikusan a P_9 és az S_{12} közelítésekre (5. háló)</i>	48
25.	<i>A k_{eff} értéke a kifejtési rend függvényében (Godiva)</i>	49
26.	<i>Normált skalárfluxus-eloszlás a 2D Hébert benchmarkproblémára (diffúzió)</i>	51
27.	<i>Normált skalárfluxus-eloszlás a 2D Hébert benchmarkproblémára (P_1)</i>	51

Táblázatok jegyzéke

1.	<i>Probléma típusa</i>	21
2.	<i>Peremfeltétel típusa</i>	21
3.	<i>Outputíráásra vonatkozó paraméter</i>	29
4.	<i>A $\underline{d}$ elemeinek számításához szükséges paraméterek</i>	32
5.	<i>A $\bar{k}$ kétdimenziós homogén tesztfeladat csoportállandói</i>	35
6.	<i>A kétdimenziós homogén tesztfeladatra generált végeelem-hálók paraméterei</i>	35
7.	<i>A kétdimenziós Hébert benchmarkprobléma csoportállandói</i>	37
8.	<i>A kétdimenziós Hébert benchmarkra generált végeelem-hálók paraméterei</i>	37
9.	<i>A skalárfluxus értéke az $x = 6$ cm pontban különböző végeelem-hálókra</i>	39
10.	<i>Az effektív sokszorozási tényező értéke diffúziós esetben</i>	40
11.	<i>A kétdimenziós heterogén tesztfeladat csoportállandói</i>	41
12.	<i>A kétdimenziós heterogén tesztfeladatra generált végeelem-hálók paraméterei</i>	42
13.	<i>A Godiva benchmarkprobléma izotópösszetétele</i>	42
14.	<i>A Godiva benchmarkproblémára alkalmazott energiaszerkezet</i>	42
15.	<i>A Godiva benchmarkra generált végeelem-hálók paraméterei</i>	43
16.	<i>A kétdimenziós homogén tesztfeladat konvergenciavizsgálatának eredményei</i>	43
17.	<i>A P_9 számítások eredményei a referenciához viszonyítva</i>	45
18.	<i>Az S_{12} referencia végeelem-hálóinak paraméterei</i>	45
19.	<i>A kétdimenziós heterogén tesztfeladat konvergenciavizsgálatának eredményei</i>	46
20.	<i>A Godiva benchmark konvergenciavizsgálatának eredményei</i>	49
21.	<i>Az effektív sokszorozási tényező értéke P_1 esetben</i>	50

Jancsovcics Janka

A páros paritású P_N transzportszámítási módszer vizsgálata

A dolgozat kapcsán elvégzett munkák és eredmények:

- Megismerkedtem a másodrendű módszerekkel, a másodrendű formalizmussal. A munka során egy választott másodrendű módszeren, a páros paritású P_N közelítésen keresztül vizsgáltam a másodrendű módszereket, ezek elméleti levezetését és numerikus megvalósítását, továbbá alkalmazhatóságukat nem diffúzív, erősen transzportjellegű problémák esetére.
- Szakirodalmi kutatást végeztem a másodrendű módszerek, speciálisan pedig a páros paritású (P_N) módszer elméleti származtatását, klasszikus értelmezés szerinti peremfeltételeit és numerikus megvalósítását, reaktorfizikai kódba való implementálását illetően.
- Megismerkedtem a végeelem-módszerrel, illetve a diffúziós és a P_N transzportközelítésekkel, amelyeket munkám során közvetlenül felhasználtam, reaktorfizikai transzportkódok szintjén megvalósítottam.
- Elsajátítottam a modellezéshez, a végeelem-hálók generálásához és az utólagos feldolgozáshoz felhasznált háromdimenziós modellező program, a Gmsh használatát.
- Elkészítettem egy folytonos végeelem-módszeren alapuló, diffúziós transzportközelítést alkalmazó reaktorfizikai kódot, amely egy-, két-, illetve háromdimenziós problémák megoldását teszi lehetővé. A fejlesztett program mind fix forrásos, mind pedig hasadással feladatok megoldására alkalmas.
- Elkészítettem egy ugyanilyen jellemzőkkel rendelkező, de páros paritású P_N transzportközelítést alkalmazó reaktorfizikai kódot is.
- Tapasztalatot szereztem a reaktorfizika numerikus módszereinek terén, a mélyebb megértés érdekében szinte teljes mértékben rendelkezésre álló, előre elkészített könyvtárak nélkül dolgoztam, a működéshez szükséges algoritmusokat és rutinokat magam írtam meg. Én készítettem el pl. a rutint, amely legenerálja az iránygömbön való integráláshoz a Legendre-Chebyshev kvadratura pontjait és súlyait.
- A diffúziós és a páros paritású P_N kódok helyes működésének ellenőrzésére változatos tesztfeladatokat oldottam meg. A tesztfeladatok választásánál ügyeltem arra, hogy minél több aspektus tekintetében ellenőrizsem a kódok működését (fix forrásos/hasadással, 1D/2D/3D, egy- és többcsoporthoz, diffúzív és transzport jellegű feladatok).
- Az összes tesztfeladat esetében hálózati érzékenységi, vagy pedig konvergenciavizsgálatot végeztem. Az eredmények tekintetében következtettem a kifejlesztett kódok helyes működésére – az eredmények alapján a páros paritású P_N transzportkód mély behatolásos problémák esetében is megfelelő eredményeket szolgáltat.
- Elméleti szinten is megmutattam, majd pedig konkrét tesztfeladat szintjén is demonstráltam a diffúziós és a páros paritású P_1 közelítés kapcsolatát, azonosságukat.
- Megjelöltem a páros paritású módszer reaktorfizikai kódba való implementálása során felmerülő numerikus nehézségeket. A legfőbb numerikus kihívásra, a szögbeli diszkretizáció során számítandó felületi mátrixok hatékony kiértékelésére megoldásként alkalmazott módszert részletesen ismertettem. A numerikus megvalósítás tapasztalatait kiterjesztettem egyéb másodrendű módszerek esetére is.
- Javaslatokat tettem a kód hatékonyságának növelése érdekében. Megjelöltem a kutatás folytatásának irányát, javaslatokat tettem a továbbhaladást illetően.