Modern Módszerek a Reaktorfizikában

Makai Mihály

May 8, 2018

1 Model A valóság egy ésszerű leírása. A modell változói között megerősített összefüggések állnak fenn, ezeket egzakt vagy közelítő módszerekkel lehet meghatározni.
A fizika eszköztárában a modellek az építőmester szerszámainak, eszközeinek szerepét játszák.
Az előadás tárgya: algebrai eszközök bemutatása és alkalmazása a reaktorfizika területén. Vázlat:

1. Periódikus struktúrák vizsgálata
2. Aperiódikus struktúrák vizsgálata
3. Néhány algebrai alapfogalom

2 Periodikus struktúrák

A probléma:

$$\mathcal{A}\Phi(\mathbf{x}) = 0; \mathbf{x} \in V \tag{1}$$

$\mathcal{A}$ lineáris operátor. Legyen $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}; \tag{2}$$

$\mathcal{A}$ a megoldandó egyenlet) és a peremen:

$$\mathbf{B}\Phi(\mathbf{x}) = 0; \mathcal{P}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathcal{P} \;\; \mathbf{x} \in \partial V. \tag{3}$$

Ha van ilyen $\mathcal{P}$, akkor az a **vizsgált feladat szimmetriája**.
$(\mathcal{A}, \mathbf{B}, V)$: egy peremérték-feladat.
Ha $\mathcal{P}_1\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}_1$ és $\mathcal{P}_2\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}_2$, akkor $(\mathcal{P}_1\mathcal{P}_2)\mathcal{A} = \mathcal{A}(\mathcal{P}_1\mathcal{P}_2)$. Ez definiál egy műveletet (szorzás), a lehetséges szimmetriák **csoport** nevű struktúrát alkotnak.

3 Csoport tulajdonságok G véges csoport, elemei $g_1, g_2, \ldots, g_N$.

- G-nek van egységeleme, amit e-vel jelölünk: $ge = eg = g$.
- minden $g \in G$ elemnek van inverze, jele g^{-1} amire $gg^{-1} = g^{-1}g = e$.
- G felbontható közös elemet nem tartalmazó **konjugált osztályok**ra. Az $a \in G$ elemhez tartozó konjugált osztály a gag^{-1} elemekből áll.
- G ábrázolható N mátrixszal. A mátrix spúrját **karakter**nek nevezik. Egy osztály mátrixainak spúrja azonos.
- A karakterek négyzetalakú mátrixba rendezhetőek. Az oszlopok a konjugált osztályokat mutatják, a sorok az irreducibilis altereket.
- A karaktertábla i-ik sorának j-ik eleme megadja az i-ik altérhez tartozó j altér mátrixainak karakterét (spurját).

4 Csoporthatás függvényen $\rightarrow$ koordinátatranszformáció $f(\mathbf{x})$ függvény egy $\mathcal{P}$ operátor alatt transzformálódik:

$$\mathcal{P}f(\mathbf{x}) \equiv f(O^{-1}\mathbf{x}) \tag{4}$$

Itt O: $\mathcal{P}$ operátor hatása az $\mathbf{x}$ helykoordiná tákra. Ezzel a szimmetriákat izomorfiába hoztuk a koordináta transzformációkat leíró mátrixokkal. Ez adja az alábbi definíciókat:

- A $\mathcal{P}$ operátor a V térfogat szimmetriája, ha $\mathcal{P}$ a V térfogatot önmagába képezi le.
- Orbitnak nevezzük egy adott $\mathbf{x}$ pont transzformációival kapott $\mathbf{x}_i$ pontok halmazát.
- V/G-vel jelöljük az orbitok halmazát, ami egy ekvivalencia relációt definiál V pontjai között: az x és y pontok ekvivalensek, ha a G csoport azonos orbitjának elemei.

- Legyen az $O_1, O_2, \ldots, O_n$ mátrixok halmaza zárt a mátrixszorzás műveletére nézve. A $O_1, O_2, \ldots, O_n$ mátrixok a G csoport egy reprezentációját adják, ha a G csoport elemei előállíthatóak az O mátrixok segítségével az alábbi módon: $O_i O_j O_i^{-1}$.
- Egy reprezentációt (ábrázolást) reducibilisnek nevezünk, ha minden O_i mátrix előállítható

$$O_i = \begin{pmatrix} A_i & B_i \\ 0 & C_i \end{pmatrix}$$

alakban. Ellenkező esetben az ábrázolás irreducibilis.
- Minden csoporthoz hozzárendelhető egy karaktertábla, ami négyzet alakú, sorainak és oszlopainak száma n, ami a csoport konjugált elemosztályainak száma.
- A karaktertábla segítségével kivetíthető egy adott vektorból annak minden irreducibilis komponense.
- Az irreducibilis komponensek ortogonálisak egymásra.

6 Numerikus módszerek

A feladat:

$$\mathcal{A}\Phi(\mathbf{r}) = \lambda\Phi(\mathbf{r}) \ \ \mathbf{r} \in V; \quad \mathbf{B}\Phi(\mathbf{r}) = 0; \ \ \mathbf{r} \in \partial V \tag{5}$$

Iteráció:

$$\mathcal{A}\Phi_{k+1} = \lambda\Phi_k(\mathbf{r}) \ \ \mathbf{r} \in V + perem \ \ k = 0, 1, 2, \ldots \tag{6}$$

Megoldás: $\Phi_k = \sum_{c_j} \Psi_{kj}, \ j = 1, 2, \ldots n_c$ és ha $(\Psi_{kj_1}; \Psi_{kj_2}) = 0, \ \text{ha} \ j_1 \neq j_2$, akkor az iteráció minden altérben külön konvergál (PÁRHUZAMOSÍTÁS!).

7 A szervezés

- A keresett $\Phi(\mathbf{x})$ függvényt felbontjuk irreducibilis komponensekre a karaktertábla segítségével.
- Egy adott iterációs lépést végrehajtunk minden irreducibilis altéren.
- A kapott függvényekből előállítjuk $\Phi(\mathbf{x})$-t, kiszámoljuk az eltérést az előző lépés eredményétől.
- Meghatározzuk az egyéb paramétereket (k_{eff}).
- Ellenőrizzük az iteráció konvergenciáját.

8 Atomreaktor zónája A "removal" operátor (szórás+ elnyelés):

$$\mathcal{A} = \Sigma(\mathbf{x}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\mathbf{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{x}; E', \mathbf{\Omega}' \to E, \mathbf{\Omega}) * \qquad (7)$$

A hasadás és a kifolyás, belőlük a neutronmérleg:

$$\mathcal{F} = \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\mathbf{x}, E') \int_{4\pi} d\mathbf{\Omega}' * \qquad (8)$$

$$\mathcal{L} = \mathbf{\Omega} \nabla * \qquad (9)$$

$$\left[\mathcal{L} + \mathcal{A} - \frac{1}{k}\mathcal{F}\right] \psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) = 0, \qquad (10)$$

A k állandót úgy kell megválasztani, hogy legyen nem azonosan nulla megoldás. A (10) egyenlet megoldása:

$$f_{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) = e^{i\mathbf{Bx}} U_{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) \qquad (11)$$

Bloch-függvény: teljes ortonormált rendszert alkotnak. Fejtsük ki $\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega})$-t:

$$\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) = \int_{R_{as}} W_{as}(\mathbf{B}) e^{i\mathbf{Bx}} U_{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{B} + \int_{R_{tr}} W_{tr}(\mathbf{B}) e^{i\mathbf{Bx}} U_{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{B}, \tag{12}$$

Itt az R_{as} halmaz valós $\mathbf{B}$ vektorokat, a R_{tr} halmaz complex $\mathbf{B}$ vektorokat tartalmaz. $\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega})$ felbontható két energiatartományra:

$$\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) = f_2(\mathbf{x}) U_0(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) \text{ ha } 0 \leq E \leq E^* \tag{13}$$

és

$$\psi(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) = f_1(\mathbf{x}) U_0(\mathbf{x}, E, \mathbf{\Omega}) \text{ ha } E^* \leq E \leq +\infty. \tag{14}$$

Bevezetjük a két energiatartomány makrofluxusát:

$$\phi_M^{(1)}(\mathbf{x}) = C_{1as}\phi_{as}(\mathbf{x}) + C_{1tr}\phi_{tr}(\mathbf{x}) \quad 0 \leq E \leq E^* \tag{15}$$

$$\phi_M^{(2)}(\mathbf{x}) = C_{2as}\phi_{as}(x) + C_{2tr}\phi_{tr}(\mathbf{x}) \quad E^* \leq E \leq +\infty. \tag{16}$$

A makrofluxusok kielégítik a kétcsoport-diffúzió egyenletet:

$$\begin{aligned}
\sum_j -D_{1j}\frac{\partial^2\phi_M^{(1)}(\mathbf{x})}{\partial x_j{}^2} + \Sigma_{a1}\phi_M^{(1)}(\mathbf{x}) &= \frac{\nu\Sigma_{f2}}{k}\phi_M{}^2(\mathbf{x}) \\
-D_{2j}\frac{\partial^2\phi_M^{(2)}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_j{}^2} + \Sigma_{a2}\phi_M^{(2)}(\mathbf{x}) &= \Sigma_{1\to 2}\phi_M^{(1)}(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

D, Σ_a lineáris U_0, U_1-ben és normálva van U_0, U_1 kifejezéseivel.

11 Periodikus struktúrák

Vizsgáljuk meg a $\mathcal{A}\Phi(\mathbf{x}) = 0$ homogén egyenletet (ahol $\mathcal{A}$ lineáris operátor) egy V térfogatban! Amennyiben létezik olyan $\mathcal{P}$ operátor, amely felcserélhető $\mathcal{A}$-val, azaz $\mathcal{PA} = \mathcal{AP}$, a V térfogat ∂V peremén előírt $\mathbf{B}\Phi(\mathbf{x}) = 0$ peremértékben szereplő $\mathbf{B}$ lineáris operátor is felcserélhető $\mathcal{P}$-val: $\mathcal{PA} = \mathcal{AP}$, akkor a $\mathcal{P}$ operátort a szóbanforgó **peremérték-feladat szimmetriájának** nevezzük.
$(\mathcal{A}, \mathbf{B}, V)$ meghatároz egy peremérték-feladatot, a peremérték-feladat szimmetriái csoportot alkotnak, a csoportművelet az egymás után történő alkalmazás. A csoportot G-vel fogjuk jelölni. A csoport tulajdonságait ki fogjuk használni a peremérték-feladat vizsgálata során.
Az

$$\mathcal{A}f(\mathbf{x}) = 0 \tag{17}$$

lineáris egyenlet megoldása egy periódikus struktúrában kifejezhető

12 Csoportelméleti eszközök

1. Megoldandó a következő homogén peremérték probléma:

$$\mathcal{A}(p)\Psi(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in V \tag{19}$$

$$\mathbf{B}\Psi(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial V, \tag{20}$$

   ahol $\mathcal{A}$ és $\mathbf{B}$ lineáris operátorok. A fenti probléma homogén. Az $\mathcal{A}$ operátorban szereplő p paramétert úgy kell megválasztani, hogy a homogén feladatnak legyen nemtriviális megoldása.
2. Ha léteznek olyan $\mathcal{P}$ operátorok, amelyekre fennáll

$$\mathcal{P}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P} \text{ és } \mathcal{P}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathcal{P} \text{ valamint } \mathcal{P}V = V, \tag{21}$$

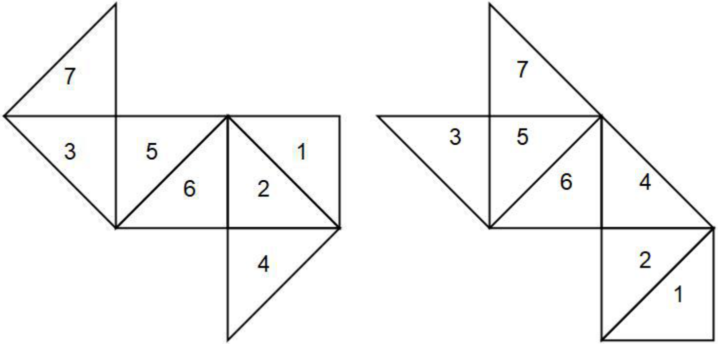
   akkor a $\mathcal{P}$ operátorok csoportot alkotnak.
3. A csoporthoz tartozó karaktertábla segítségével bármely $\Psi(\mathbf{x}), x \in V$ függvény felbontható ortogonális irreducibilis

13 Aperiodikus struktúrák

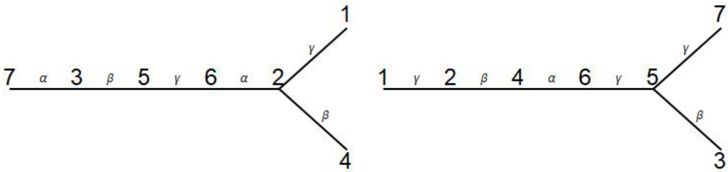
T. Sunada felvetette, hogy csoport előállítására felhasznált eszközöket tágabban is lehet értelmezni: a csoport objektumok egy halmaza, amelyek közül bármelyik kettőt össze lehet kapcsolni egy művelettel. Egy objektum szimmetrikus, ha úgy transzformálható, hogy közben az objektum nem változik. Robert Brooks három elemből hozott létre egy hét elemű objektumot, jelölje ezt G. Legyenek G alkotóelemei α, β és γ, a csoport elemei pedig álljanak a három elem szorzataiból. A csoport elemeit azzal írjuk le, hogyan hatnak az alábbi hét elemű halmazra: $X = [1, 2, \ldots, 7]$. Jelölje g egy elemét G-nek és g hatása G-re legyen G elemeinek egy permutációja. G hatását az X halmazon egy gráffal lehet leírni (Cayley gráf). C. Gordon és D. Webb javasolta a G csoport leírására az alábbi "ragasztás" technikát:

1. Az alapelem legyen egy poligon, annyi oldallal, ahány alkotóelemet használunk a G felépítéséhez (esetünkben három). A poligon oldalait jelöljük az alkotóelemeknek megfelelően α, β és γ-val.
2. A gráf álljon annyi elemből, ahány eleme van az X halmaznak. Két adott elemnek egy közös oldala lehet, a közös oldal kizárólag a két érintkező háromszög azonos oldala lehet: α, β vagy γ.
3. Belső oldal: két háromszög közös oldala. Külső oldal: nincs háromszög, amelynek lenne közös oldala az adott határon. Egy háromszögnek legfeljebb három belső oldala lehet, az 1. ábrán egyetlen ilyen van.

7 háromszögből felépített alakzat (Cayley-gráf) Egy lehetséges Cayley-gráfot mutat az 1. ábra. Az ábra nevezetessége, hogy vannak olyan 7 háromszögből álló rajzok (gráf), amelyeken a Laplace operátor sajátértékei mind megegyeznek.



7 háromszög Cayley-gráfja (második változat)



A Cayley-gráf ismeretében a felső ábrához lehet rendelni egy csoportot, némi munkával meg lehet találni a projektorokat, amelyekkel az ortogonális komponenseket ki lehet vetíteni. Ezek segítségével a numerikus módszerek hatékonyabbá tehetőek.
Kuriózum: lehet konstruálni olyan, egymással nem ekvivalens alakzatokat, amelyeken a

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{x}) = \lambda\mathbf{x} \tag{23}$$

egyenlet minden λ sajátértéke azonos.
A szabályos rácsok leírhatóak a Bloch-függvények segítségével egy periodikus mikrofluxus és egy lassan változó makrofluxus szorzataiként.

18 Konvergencia gondok

Az alábbi problémával Elmer Lewis (NW Univ.) keresett meg az ANL-ban. Új, hatékony zónaszámító kódot készítettek, a kód a következő sémát követte:

1. Felvettek a vizsgált V térfogatban egy kezdeti eloszlást. Ebből indult az iteráció, melynek célja a Boltzmann-féle transzportegyenlet numerikus megoldása.
2. A megoldandó egyenlet:

$$[\mathbf{\Omega}\nabla + \sigma(\mathbf{r})]\,\Psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}) = \int d\mathbf{\Omega}'\sigma_s(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}') + S(\mathbf{r}) \tag{24}$$

3. A megoldás: az $\mathbf{\Omega}$ változó szerinti páros és páratlan komponenekre bontását használták. A páros komponens $\psi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$, a páratlan $\chi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$.

19 Iterációra épülő megoldás

Egy V térfogatban keresték az

$$\mathcal{A}\Phi(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in V \tag{25}$$

egyenlet megoldását adott peremértékek mellett. Itt $\mathcal{A}$ lineáris operátor. A V térfogat ∂V határán egy lineáris peremfeltételt írtak elő a Φ fluxus és a J áram segítségével. Az iterációban felhasználták az alábbi mennyiségeket:

- Bejövő parciális áram:

$$J^{+} = \frac{1}{4}\left[\Phi + 2J\right] \tag{26}$$

- Kimenő parciális áram:

$$J^{-} = \frac{1}{4}\left[\Phi - 2J\right] \tag{27}$$

ahol Φ-neutronfluxus; J-neutronáram normális komponense.

Legyen minden V_i térfogatnak n_F határa. Ekkor V_i minden határán az alábbi mennyiségeket kell meghatározni:

$$J = (J_1, \ldots, J_{n_F}); J^+ = (J_1^+, \ldots, J_{n_F}^+); J^- = (J_1^1, \ldots, J_{n_F}^-)$$

A fluxusok:

$$\Phi = (\Phi_1, \ldots, \Phi_n).$$

A neutrongáz leírására lineáris modell szolgál, ezért

$$\mathbf{J} = \mathbf{R\Phi} \tag{29}$$

vagy a parciális áramok segítségével felírva:

$$I^+ = \mathbf{T} I^- = (1 + 2\mathbf{R})(1 - 2\mathbf{R})^{-1} I^-. \tag{30}$$

Ha létezik olyan $\mathbf{M}$ mátrix, amelyre fennáll $\mathbf{MR} = \mathbf{RM}$, akkor az $\mathbf{M}$ e_i sajátvektorai szerint kifejthető a fluxus is és az áram is.

21 Alkalmazott szimmetriák

Bármely $\mathcal{A}$ operátor és bármely Φ függvény felbontható irreducibilis komponensekre:

$$\mathcal{A} = \sum_i \mathcal{A}_i, \quad \text{és } \Phi = \sum_i \Phi_i. \tag{31}$$

Ezzel (5) iteráció így írható fel:

$$\left(\sum_i \mathcal{A}_i\right)\left(\sum_j \Phi_j\right) = \lambda \left(\sum_j \Phi_j\right). \tag{32}$$

Mivel az irreducibilis komponensek ortogonálisak:

$$(\Phi_i; \Phi_j) = \delta_{ij}; \quad \text{és } (\mathcal{A}_i; \mathcal{A}_j) = \delta_{ij}. \tag{33}$$

Legyen

$$\mathcal{A}_i = \mathcal{P}_i \mathcal{A}; \quad \text{és } \Phi_i = \mathcal{P}_i \Phi. \tag{34}$$

22 Alkalmazott szimmetriák-2

(32)-ből következik:

$$\sum_{i,j} \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j \mathcal{A}_i \Phi_j = \lambda \sum_j \Phi_j. \tag{35}$$

Mivel $\mathcal{P}_i \mathcal{P}_j = 0$ ha $i \neq j$ és $\mathcal{P}_i = \mathcal{P}_i \mathcal{P}_j$, valamint $(\Phi_i; \Phi_j) = \delta_{ij}$,

$$\mathcal{P}_i \mathcal{A}_i \Phi_i = \lambda \Phi_i, \tag{36}$$

az iteráció során

$$\mathcal{A}_i \Phi_i = \lambda_0^n \Phi_i^0. \tag{37}$$

Ha valamely M indexre $\mathcal{A}_M = 0$ az iteráció kezdetekor, akkor a Φ_M tag nem fog csökkenni az iteráció során, **az iteráció nem konvergál**.

23 A numerikus megoldás főbb lépései

1. Felveszünk egy fizikailag értelmes kezdeti eloszlást minden V_i-ben.
2. Végigmegyünk a V-t alkotó V_i térfogatokon. Belső határokon: folytonosságból, külső határokon: peremfeltételekből meghatározzuk a bejövő áramokat V_i határain. V_i minden határán: áramokat, fluxusokat és belőlük (30) segítségével a parciális áramokat. A közös határon az utoljára meghatározott mennyiségeket használjuk.
3. Ha minden nódust sorra vettünk, számoljuk V térfogat egészére vonatkozó kritikussági paramétert, és meghatározzuk, mennyit változott.
4. A következő ciklusban már az utolsó ciklusban kapott áramokat, parciális áramokat és a kritikussági paramétert használjuk.

24 Példa

Table: Irreducibilis komponensek négyzetben

vektor/fok	0	1	2	3	4
e_1	...	...	(x^2+y^2)	...	$(x^4+y^4), x^2y^2$
e_2	...	...	...	...	(x^3y-xy^3)
e_3	...	...	(x^2-y^2)	...	(x^4-y^4)
e_4	...	...	xy	...	(x^3y+y^3x)
e_5	...	x	...	x^3	...
e_6	...	...	...	xy^2	...
e_7	...	...	...	x^2y	...
e_8	...	y	...	y^3	...

Az algoritmusból világos, hogy a fluxuseloszlást V-ben lineáris kifejezések adják meg. Az iteráció konvergenciája akkor lassú, ha vannak olyan lineárisan független alterek a megoldás kifejtésében, amelyek amplitudója valamilyen okból nem csökken.
A csoportelmélet lehetőséget ad a megoldás lineárisan független alterekre bontására és azt is meg lehet vizsgálni, hogyan csökken az iteráció során az egyes alterek súlya.
A vizsgálódásra a gyakran használt polinomokkal történő közelítést fogjuk használni, a csoport pedig a V térfogat szimmetriáiból álló véges csoport lesz. Figyelembe kell venni, hogy két alkalommal is polinomiális közelítést alkalmaz a közelítő módszer: az i-ik nódusban a fluxust V_i-ben polinommal közelítjük, és a ∂V_i peremen is, ez utóbbi általában alacsonyabb fokszámú polinomokat használ, hiszen a térfogat belseje fontosabb, mint a pereme (sic!).