Софийски университет „Св. Климент Охридски”
Физически факултет
катедра Ядрена техника и ядрена енергетика

Сребрин Колев

Нестационарна формулировка на нодалния метод HEXNEM3 за решаване на уравнението на неутронен пренос в дифузионно приближение

Дисертация за придобиване на образователната и научна степен „доктор”

научен консултант
доц. д-р Ивайло Христосков

София, април 2020 г.

Съдържание

i. Списък с означения и съкращения

ACMFD: **A**nalytical **C**oarse-**M**esh **F**inite-**D**ifference
BiCGSTAB: **BiC**onjugate **G**radient **STAB**ilized
FRCZ: **F**ine-mesh **R**adial **C**oarse-mesh **Z** (axial)
H3CM: HEXNEM**3** A**C**MFD **M**odal
HEXNEM: **HEX**agonal **N**odal **E**xpansion **M**ethod
RDF: **R**eference **D**iscontinuity **F**actor
ВВЕР: **В**одно-**В**оден **Е**нергиен **Р**еактор

В настоящата работа величините с **получерен шрифт** са векторни без значение дали са означени с главна или малка буква (например **r**, **J**); величините с **получерен шрифт**, които имат знака '^' отгоре, са матрици (например $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$, $\hat{\mathbf{R}}$); всички останали величини са скаларни (например *f*, Φ).

Скаларното умножение на вектори е означено с традиционния знак '$\cdot$' (например $\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}$); при умножението на матрици, както и на матрица по вектор, не е използван специален знак (например $\hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{B}}=\hat{\mathbf{R}}$, $\hat{\mathbf{Q}}\mathbf{A}=\mathbf{d}$).

Знакът '$^{-}$' върху дадена величина е означение за средна стойност (например $\overline{\Phi}$, $\overline{f}$). Всички останали индекси и означения върху величините в настоящата работа са специфични за контекста и са пояснени в изложението.

ii. Увод

Физиката на ядрените реактори е интердисциплинарна област от физическите и техническите науки, чийто предмет е изучаване на неутроннофизичните процеси в активната зона на реактора във връзка с проектирането и експлоатацията на ядрени реактори. Специфичен дял от реакторната физика е реакторният анализ, състоящ се в изчислително моделиране на неутроннофизичното поведение на ядрения реактор. Основна цел на реакторния анализ е пресмятане на разпределението на скоростите на неутронните реакции в активната зона. Средство за постигане на тази цел е решаването на уравнението на неутронния пренос.

Съществуват разнообразни методи за решаване на това уравнение, които осигуряват подходящо ниво на точност и бързина на пресмятанията според вида и изискванията на поставената задача. Общоприет подход в експлоатационния реакторен анализ е представянето на преносното уравнение в дифузионно приближение. То позволява сравнително бързо решаване на преносната задача в активната зона и при определени условия осигурява достатъчно добра точност.

Численото решаване на дифузионната задача, а и не само на нея, обикновено налага пространствена дискретизация и представяне на активната зона на реактора като мрежа от условно хомогенизирани обеми. При относително груба мрежа, което е нужно за постигане на приемлива изчислителна производителност, най-често се прилагат т.нар. нодални методи. Те се състоят във въвеждане на специална връзка между средните скаларни неутронни потоци в хомогенизираните обеми (нодове) и нетните неутронни токове през стените на тези обеми. Тази връзка се основава на предположение за пространственото разпределение на скаларния поток в нода.

HEXNEM е фамилия от нодални методи за решаване на уравнението на неутронен пренос в двугрупово дифузионно приближение. Дифузионната задача се решава за триъгълна решетка от шестостенни горивни касети, а скаларният неутронен поток се разлага по базови функции в рамките на всеки хомогенизиран нод (слой от касета). Оригиналният метод (HEXNEM1) е разработен от У. Грундман [Grundmann, 1999]. Методът показва достатъчно добра практическа точност за реакторите ВВЕР-440, където стъпката на решетката от горивни касети е сравнително малка (14.7 cm). HEXNEM1 е реализиран в развиваната в Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf програма DYN3D [Grundmann et al., 2005], с която могат да се извършват пресмятания както за стационарни състояния, така и за преходни процеси. За реактори от вида ВВЕР-1000 обаче, където стъпката на решетката е по-голяма (23.7 cm), точността на метода е незадоволителна. В това отношение значителен напредък демонстрира методът HEXNEM2 [Grundmann and Hollstein, 1999], който също е включен в DYN3D. За по-добро описване на вариацията на скаларния поток в обема на нода, неговото представяне е разширено чрез добавяне на шест допълнителни експоненциални функции по радиални оси (в равнината (x, y)) през върховете на шестостенния нод. Именно на това се дължат и по-добрите резултати спрямо HEXNEM1. От друга страна, такова представяне на потока изисква налагане на гранични условия в точка (в ъглите на касетите), което е с проблемна физична интерпретация и в частност може да затрудни прилагането на коефициенти на прекъсване на потока [Smith, 1986] за компенсиране на ефектите от хомогенизация.

HEXNEM3 [Christoskov and Petkov, 2013] на свой ред допринася за развитието на тази серия от методи като заменя използваните при HEXNEM2 експоненциални функции през върховете на нода с експоненти с линейно менящи се по стените на нода амплитуди. Добавени са и гранични условия за линейно претеглените по стените на нода скаларен поток и нетен ток. Това подобрява точността на решението и улеснява формулирането на физично обосновани вътрешни и външни гранични условия. Методът е разработен във връзка с програмния комплекс HELHEX [Петков и др., 2013; Петков, 2013; Христосков, 2013], който е представен например в [Kamenov et al., 2013]. Наскоро реализация на метода HEXNEM3 беше включена в програмата DYN3D [Bilodid et al., 2018].

Методите HEXNEM, включително и HEXNEM3, се основават на напречно интегриране с цел обособяване от общата тримерна задача на аксиална едномерна задача (в направлението Oz) и двумерна задача в равнината (x,y), свързани помежду си чрез напречни утечки, които подлежат на итеративна оценка. Нодалните балансни уравнения се свързват чрез вътрешни гранични условия за непрекъснатост на парциалните токове. Породените от дифузионното уравнение нехомогенни линейни алгебрични системи се решават относно парциалните токове последователно за всяка енергетична група. При условнокритични задачи, за каквито е предназначен например комплексът HELHEX, такъв подход се съгласува естествено с итерациите по източника от делене и осигурява добра сходимост и устойчивост.

По отношение на началната задача за зависещия от времето скаларен неутронен поток нестационарното двугрупово дифузионно уравнение е твърда система от диференциални уравнения, за осигуряване на стабилност на чието решение е нужно да се използва неявна диференчна схема по време. От своя страна обаче, прилагането на методите HEXNEM се основава на разделно решаване на груповите уравнения и итериране по енергетични групи. Този итерационен процес, който впрочем наподобява последователна релаксация, не се съгласува добре с ограниченията на неявната диференчна схема. Допълнително неудобство в нестационарния случай създава сдвояването по парциални токове. То ограничава избора на метод за решаване на породените от дифузионната задача нехомогенни линейни алгебрични системи единствено до стационарна итерация и съответно до полиномен метод за нейното ускоряване. Ефектът може да бъде бавна сходимост и дори неустойчивост при някои бързи преходни процеси. Трябва все пак да се отбележи, че независимо от посочените недостатъци оригиналните методи HEXNEM на практика се прилагат и за решаване на нестационарни задачи, както например е избрано в програмата DYN3D, но с цената на особена чувствителност към настройките на чебишевския полиномен метод [Hageman and Young, 1981] за ускоряване на решението на нехомогенните алгебрични системи.

В настоящата дисертация е представена нова нестационарна формулировка на метода HEXNEM3, която практически изключва необходимостта от итериране по групови потоци. Това е постигнато чрез предварително прилагане на модално разлагане [Kolev and Christoskov, 2019[a]; Kolev and Christoskov, 2019[b]], което води до система от отделни нехомогенни хелмхолцови уравнения за всяка зависима променлива (мод), свързани единствено чрез вътрешните и външните гранични условия. При положителен лапласиан на хомогенното хелмхолцово уравнение моделът за координатната зависимост на мода съвпада с този в HEXNEM3 за скаларния поток. За случая на отрицателен лапласиан в настоящата дисертация е въведен и описан нов модел за представяне на тази координатна зависимост, съдържащ тригонометрични функции вместо хиперболични.

Допълнително нововъведение спрямо оригиналния метод HEXNEM3 е конструирането на ACMFD (analytical coarse-mesh finite difference) схема за него [Chao, 1999, Kolev and Christoskov, 2018], която свързва линейно граничния нетен неутронен ток със средните скаларни потоци за два съседни нода. Това позволява формиране на явна линейна алгебрична система относно нодалните средни скаларни потоци или модове и дава свобода на избор на метод за решаване на тази система.

В дисертацията са описани подробно главните елементи на новата формулировка на метода. Решени са няколко стационарни и нестационарни задачи за проверка на неговата точност и числена устойчивост. Допълнително са обсъдени някои особености на метода.

iii. Изчислително моделиране на неутронния пренос

За моделиране на неутронния пренос съществуват два принципно различни подхода – детерминистичен и стохастичен.

Детерминистичният подход се свежда до числено решаване на Болцмановото уравнение на неутронен пренос, най-често с цената на различни видове опростяващи приближения. Съществено предимство на подхода е възможността да се получи решение за целия обем на моделираната система с относително малки изчислителни разходи.

Стохастичният подход, представен чрез т.нар. методи Монте Карло, се състои в проследяване на индивидуалните събития в историята на всеки генериран в системата неутрон. Решението на преносната задача се получава чрез натрупване на подходящи статистики, най-често в ограничени области от фазовото пространство. Предимство на този подход е възможността за детайлно и точно описване на състоянието на моделирания обект.

Болцмановото транспортно уравнение има следния вид [Chandrasekhar, 1960; Davison, 1957; Bell and Glasstone, 1970]:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\mathrm{v}(E)}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)}{\partial t}+\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)+\Sigma_t(\mathbf{r},E,t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)\\
&=\int_0^\infty dE'\int_{4\pi}d\Omega'\Sigma_s(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega},E'\rightarrow E,t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}',E',t)\\
&+\frac{\chi(\mathbf{r},E,t)}{4\pi}\int_0^\infty dE'\int_{4\pi}d\Omega'\Sigma_\nu(\mathbf{r},E',t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}',E',t)+Q(\mathbf{r},E,\mathbf{\Omega},t)
\end{aligned}\tag{1}$$

Това линейно частно интегро-диференциално уравнение относно насочения (ъгловия) неутронен поток $\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)$ е със 7 независими променливи: позицията $(\mathbf{r})$ с три пространствени координати; единичният вектор на посоката на движение на неутроните $(\mathbf{\Omega})$ с две ъглови координати; енергията на неутроните (E) и времето (t). Всички означения в уравнението на неутронен пренос (1) са широко разпространени и в този смисъл са стандартни за реакторната физика:

v е скоростта на неутроните, която се определя еднозначно от енергията;

$\mathbf{\Omega}\cdot\nabla\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)$ е утечката на неутрони с разглежданите енергия (E) и посока на движение $(\mathbf{\Omega})$ поради свободно прелитане през стените на елементарен обем d^3r около точката $\mathbf{r}$;

$\Sigma_t(\mathbf{r},E,t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E,t)$ е скоростта на загуба на неутрони поради поглъщане и/или разсейване в обема d^3r, водещо до промяна на енергията и посоката на движение;

$\int_0^\infty dE'\int_{4\pi}d\Omega'\Sigma_s(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega},E'\rightarrow E,t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}',E',t)$ е скоростта на възникване на неутрони поради разсейване в обема d^3r, при което енергията и посоката стават равни на разглежданите;

$\int_0^\infty dE'\int_{4\pi}d\Omega'\Sigma_\nu(\mathbf{r},E',t)\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega}',E',t)$ е скоростта на възникване на неутрони поради делене в обема d^3r;

$\chi(\mathbf{r},E,t)$ е спектърът на неутрони от делене;

$Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ е независимият източник.

Източникът на неутрони в размножаващи среди, каквато е активната зона на един ядрен реактор, се формира главно от реакциите на делене и разсейване. Засега в (1) не е отчетен приносът на т.нар. закъсняващи неутрони и се приема, че всички неутрони от делене се изпускат мигновено. Този принос е сравнително малък, но въпреки това е определящ за развитието на преходните процеси в ядрения реактор и за неговото управление. Той ще бъде описан малко по-долу и ще бъде разгледан по-подробно в основното изложение.

В повечето случаи при детерминистичните методи за решаване на уравнението на неутронен пренос се разчита на пространствена дискретизация и дискретизация по енергия чрез обособяване на енергетични интервали, обичайно наричани групи, за които се търсят интегрални стойности на потока – т.нар. групови потоци.

Съществуват два основни подхода за третиране на зависимостта на насочения поток φ от посоката $\mathbf{\Omega}$: дискретизация по $\mathbf{\Omega}$ – напр. метод на дискретните ординати (S_N) или метод на характеристиките, и развитие на потока по базови функции на $\mathbf{\Omega}$ – напр. метод на сферичните хармоники и P_N метод. Сечението за разсейване се представя чрез своето развитие по полиноми на Лежандър относно косинуса на ъгъла на разсейване μ.

При дискретизацията по $\mathbf{\Omega}$ уравнението на неутронния пренос за всяка посока $\mathbf{\Omega}_m$, след обединяване на всички неутронни източници и въвеждане на енергетично групово представяне, придобива вида:

$$\begin{aligned} &\mathbf{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_m^g(\mathbf{r}) + \Sigma_t^g(\mathbf{r}) \varphi_m^g(\mathbf{r}) = Q_m^g(\mathbf{r}), \\ &m = 1, \ldots, M,\ g = 1, \ldots, G \end{aligned}, \qquad (2)$$

където g е индексът на съответната група, а $\varphi_m^g(\mathbf{r}) = \varphi^g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_m)$ е насоченият поток в посока $\mathbf{\Omega}_m$.

При ***метода на дискретните ординати*** [Carlson and Lathrop 1968; Alcouffe et al., 1979; Walters and O'Dell, 1980] се прилага пространствена дискретизация и преносното уравнение (2) се интегрира в границите на всяка клетка от пространствената мрежа. Изискваното от (1) интегриране по посоки е числено, като за целта всяко дискретно $\mathbf{\Omega}_m$ се асоциира с тегловен множител w_m. Полученото балансно уравнение свързва линейно средните стойности на φ_m^g по стените на клетката (нода) и средната стойност по обема. След въвеждане на предположени допълнителни линейни връзки между средното по обема и по стените, наричани в този контекст диференчна схема, балансното уравнение може да бъде решено относно обемно средния φ_m^g. Тези решения са свързани чрез условия за непрекъснатост на насочения поток на границите между клетките и външните гранични условия, и се обновяват заедно с източника до постигане на сходимост. Диференчните схеми зависят от формата и състава на клетката и обикновено ограничават приложимостта на метода до условно хомогенизирани клетки, оградени от координатни повърхности.

Методът на дискретните ординати позволява добро описване на анизотропията на разсейване, което го прави подходящ за решаване на преносната задача в отражателя и при високи неутронни енергии, но ограниченията по отношение на пространствената дискретизация затрудняват точното описване на преносната среда.

*При **метода на характеристиките*** [Azmy, 1992; Adams et al., 1988] се използва обстоятелството, че (2) е обикновено диференциално уравнение по правата линия (характеристика), определена от $(\mathbf{r},\mathbf{\Omega})$, и това уравнение се интегрира аналитично, но с опростяващи предположения за подинтегралната функция, която съдържа източника от разсейване и делене. Така се постъпва за представителен набор от стойности на $\mathbf{r}$ и $\mathbf{\Omega}$ и се итерира по източника.

Методът на характеристиките не изисква обемно интегриране и така позволява по-голяма свобода на пространствена дискретизация, но дава сравнително ограничена възможност за точно представяне на анизотропията на източника на неутрони от разсейване. Неговите особености го правят по принцип подходящ за решаване на преносната задача в активната зона и близкия отражател.

Методът на сферичните хармоники [Gelbard, 1960; Fletcher, 1983] се състои в разлагане на насочения поток по сферични функции относно двата насочващи ъгъла на единичния вектор $\mathbf{\Omega}$ и съставяне на система от уравнения за коефициентите на това разложение. Поради своята аналитична и изчислителна сложност този подход обикновено не се прилага в общия си вид.

Частният случай на метода на сферичните хармоники за линейна зависимост на насочения поток от $\mathbf{\Omega}$ е основа за ***дифузионното приближение*** на преносното уравнение [Hassitt, 1968; Semenza et al., 1972; Hansen and Kang, 1975], чието основно предимство е възможността да се състави сравнително проста задача непосредствено за скаларния поток Ф.

Дифузионното приближение може да се обоснове по следния начин. Преносното уравнение се интегрира по $\mathbf{\Omega}$ без и със почленно умножаване по $\mathbf{\Omega}$, като във втория случай се постулира линейна зависимост на насочения поток от $\mathbf{\Omega}$. Така се получава система от две интегродиференциални уравнения, която е равностойна на резултата от прилагане на метода на сферичните хармоники при спиране на разлагането на насочения поток до сферични функции от първи ред. Системата е относно коефициентите в това разложение: скаларния поток $\Phi(\mathbf{r},E)=\int\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)d\Omega$ и нетния ток $\mathbf{J}(\mathbf{r},E)=\int\mathbf{\Omega}\varphi(\mathbf{r},\mathbf{\Omega},E)d\Omega$. Допълнително се предполага пренебрежимо поглъщане спрямо разсейването при енергии, за които разсейването е значимо анизотропно. Така второто уравнение на системата се свежда до връзката $\mathbf{J}(\mathbf{r},E)=-D(\mathbf{r},E)\nabla\Phi(\mathbf{r},E)$, известна като закон на Фик, където $D(\mathbf{r},E)$ е т.нар. дифузионен коефициент. Тази връзка се замества в първото уравнение, а резултатът е единствено уравнение относно скаларния поток:

$$\frac{1}{\mathrm{v}(E)}\frac{\partial\Phi(\mathbf{r},E,t)}{\partial t}=\nabla\cdot D(\mathbf{r},E,t)\nabla\Phi(\mathbf{r},E,t)-\Sigma_t(\mathbf{r},E,t)\Phi(\mathbf{r},E,t)+Q(\mathbf{r},E,t)$$

P_N методът [TehHuang and Lewis, 1972; Aronson, 1986] е резултат от прилагането на общия подход на разлагане по сферични хармоники за частния случай на плоска едномерна геометрия.

До голяма степен евристичното обобщаване на P_N метода за тримерна геометрия, съчетано с допускането за слаба анизотропия на източника от разсейване, води до т.нар. ***опростен P_N*** (SP_N) метод [Gelbard, 1961].

SP_N методът при строго определени условия може да бъде еквивалентен на метода на сферичните хармоники, а предимството му пред дифузионното приближение е в точността на решението при наличие на съседни области, чийто материален състав силно се различава. Така например за пресмятания на активната зона, където в определени горивни касети са въведени поглътители, SP_3 методът може да достигне по-висока точност, като изчислителният разход за SP_3 спрямо дифузионното приближение не е много по-голям [Mohammad et al., 2016]. От друга страна, за задачи, при които се хомогенизират цели слоеве от касети и не са въведени силни поглътители, предимството на SP_3 пред дифузионното приближение е на практика незначително.

Донякъде извън тази основна класификация, макар и сродни по специфични признаци с поне един от двата описани детерминистични подхода, а също и със стохастичния подход, са методите, основани на т.нар. интегрална форма на преносното уравнение [Lewis and Miller, 1984]. Техен представител е напр. ***методът на вероятностите за стълкновение***, основан на предположение за слаба анизотропия на източника от разсейване, който успешно се прилага за решаване на преносната задача в хетерогенни реакторни решетки.

Предимство на този метод е, че основните уравнения се записват директно за скаларния поток, и то без да налагат никакво ограничение на анизотропията на насочения поток. Това прави метода на вероятностите за стълкновение подходящ за описване на преноса в хетерогенна среда.

Независимо от прилаганите опростяващи предположения, които впрочем трябва да бъдат физично обосновани за моделирания обект и поставените цели, решаването на глобалната преносна задача за активната зона и близкия отражател, и особено в нейната нестационарна формулировка, чрез повечето от описаните разновидности на по принцип относително икономичния детерминистичен подход, с изключение на дифузионното приближение и евентуално SP_N метода, изисква твърде високи изчислителни разходи и често поставя сериозни математически затруднения.

По тази причина за експлоатационни цели задачите на реакторния анализ се решават обикновено в малогрупово (най-често двугрупово) дифузионно приближение чрез прилагане на едроклетъчни (нодални) методи.

Малогруповите дифузионни методи изискват предварителна подготовка на ефективни сечения (т.нар. дифузионни константи) за широки енергетични групи и условно хомогенизирани обеми от реакторната среда, които да запазват действителните скорости на неутронните реакции и неутронния баланс [Koebke, 1978; Smith 1986; Smith, 1994]. Тези константи се пресмятат за мрежа от състояния на реактора чрез претегляне по по-точни оценки на енергетичното и пространственото разпределение на неутронния поток в обособени участъци на реакторната среда, които на свой ред се получават чрез решаване на преносното уравнение по някой или съчетания от някои от другите споменати детерминистични методи, а в последно време и чрез Монте Карло симулация. За по-точно компенсиране на ефекта от условната хомогенизация, в набора от дифузионни константи често се включват специални корекции на вътрешните и външните гранични условия – т.нар. коефициенти на прекъсване на потока. Външните гранични условия често се представят чрез т.нар. албедни матрици, които също се получават от по-точни решения на преносната задача.

Дифузионното приближение на уравнението на неутронен пренос дава напълно валидно математично описание на поведението на скаларния неутронен поток, ако са изпълнени следните две ключови предположения: а) анизотропията, т.е. зависимостта от $\mathbf{\Omega}$ на насочения поток, е най-много линейна; б) приносът на поглъщането в баланса на надтоплинните неутрони е пренебрежим спрямо този на разсейването.

Ясно е, че в реалната хетерогенна реакторна среда и при детайлно отчитане на енергетичната зависимост и анизотропията на потока и сеченията нито едно от тези предположения не може да бъде валидно. Те обаче ще бъдат достатъчно обосновани, ако: i) енергетичната дискретизация е в широки групи (особено важно за предположение (б)); ii) при пространствената дискретизация е приложено условно хомогенизиране на реакторната среда (основна предпоставка за (а)); iii) задачата се ограничава до активната зона, а отражателят се описва чрез подходящи гранични условия (отново главно заради (а)).

За много от целите на експлоатационната реакторна физика е достатъчно да се намери решение на стационарното уравнение на неутронен пренос, като зависимостта от времето се изключи изцяло от решаваната задача чрез формално разделяне на източника от делене на т.нар. ефективен коефициент на размножение, който също подлежи на определяне. Това е т.нар. условнокритична форма на преносното уравнение.

За редица други цели е нужно намиране на зависимостта на неутронния поток от времето – напр. моделиране на преходни процеси поради въздействия с органите за регулиране, проява на обратни връзки по реактивност и т.н.

Ако задачата е да се определи само ходът на пълната мощност на реактора, то тя може да се сведе до компактна система от обикновени диференциални уравнения, известни като уравнения на точковата кинетика [Yamoah et al., 2013; Keepin, 1965]. Коефициентите в тези уравнения, т.е. т.нар. параметри на кинетиката, зависят от менящите се с времето форма и спектър на потока и тяхното достатъчно точно оценяване обикновено изисква решаване на права и спрегната условнокритични задачи [Henry, 1975].

Най-често обаче моделирането на преходните процеси в активната зона се прави за определяне на зависещото от времето пространствено и енергетично разпределение на потока, което е нужно напр. за намиране на разпределението на локалната мощност.

Анализът на преходни процеси в един реактор на топлинни неутрони обикновено се основава на нестационарното дифузионно уравнение [Azmy and Sartori, 2010; Sutton and Aviles, 1996]:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mathrm{v}_g}\frac{\partial \Phi_g(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \nabla\cdot D_g(\mathbf{r},t)\nabla\Phi_g(\mathbf{r},t) - \Sigma_{t,g}(\mathbf{r},t)\Phi_g(\mathbf{r},t)\\ &+\sum_{\substack{g'=1\\ g'\neq g}}^{G}\Sigma_{s,g'\to g}(\mathbf{r},t)\Phi_{g'}(\mathbf{r},t)\\ &+(1-\beta)\chi_{0,g}\sum_{g'=1}^{G}\Sigma_{\nu,g'}(\mathbf{r},t)\Phi_{g'}(\mathbf{r},t)\\ &+\sum_{j=1}^{M}\lambda_j\chi_{j,g}C_j(\mathbf{r},t)+Q_g(\mathbf{r},t)\end{aligned}, \tag{3}$$

където $g=1,...,G$ е груповият индекс. Тук в източника е отчетен приносът на закъсняващите неутрони, като β е техният ефективен дял от общия брой неутрони от делене. Това допълнение към източника налага проследяване във времето и на концентрациите на ядрата-предшественици на закъсняващи неутрони C_j, а уравненията за тях имат следния вид:

$$\frac{\partial C_j(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \beta_j\chi_{j,g}\sum_{g'=1}^{G}\Sigma_{\nu,g'}(\mathbf{r},t)\Phi_{g'}(\mathbf{r},t) - \lambda_j C_j(\mathbf{r},t);\ j=1,...,M\ , \tag{4}$$

Важно е да се отбележи, че системата от диференциални уравнения (3) и (4) е твърда – на първо място поради големите разлики между груповите скорости v_g.

Най-често производната по времето се апроксимира с крайна разлика, която поради твърдостта на системата може да осигури стабилност на решението само ако е неявна, т.е. е отнесена към края на интервала по време.

Изискването за точност обаче продължава неприемливо да ограничава големината на стъпката на интегриране по време. Допустимата стъпка може да се увеличи чрез подходящо представяне на решението, което да позволява отчитане на неговата основна зависимост от времето. Такова представяне е т.нар. Stiffness Confinement Method [Sutton and Aviles, 1996]:

$$\Phi_g^n(\mathbf{r},t) = \exp\left(\omega^n\left(t-t_k\right)\right)\tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t), \tag{5}$$

където t_k е начало на текущата стъпка по време, n е нодален индекс, а реципрочната стойност на нововъведения параметър ω^n има смисъл на *динамична времеконстанта*.

Параметрите $\{\omega^n\}$ може да имат различни стойности за всеки нод и за всяка група, а може да бъде избрана и една единствена стойност за целия реактор. Във всеки случай целта е при правилно подбрани $\{\omega^n\}$ величината $\tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t)$ да се изменя слабо във времето, което ще доведе до по-точни изрази при използването на крайни разлики за апроксимиране на производните по време.

Въвеждането на представянето (5) в нестационарното дифузионно уравнение не води до промяна на структурата на (3), а апроксимирането на производната по време със задна разлика превръща нестационарната двугрупова дифузионна задача в система от две свързани нехомогенни Хелмхолцови уравнения:

$$
\begin{aligned}
&\nabla^2\Phi_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \left[A_{1,1}^{n,k+1}\Phi_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) + A_{1,2}^{n,k+1}\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r})\right] = Q_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) \\
&\nabla^2\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \left[A_{2,1}^{n,k+1}\Phi_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) + A_{2,2}^{n,k+1}\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r})\right] = Q_2^{n,k+1}(\mathbf{r})
\end{aligned}
\quad (6)
$$

В системата (6) константите A, както и източниците Q, се отнасят за края t_{k+1} на текущата стъпка по време и са функция на дифузионните константи и вече известните скаларни потоци и концентрации на ядрата-предшественици в края на предходната стъпка. Решението на (6) е относно груповите скаларни неутронни потоци в края на текущата стъпка и съдържа в себе си пълната информация за построяване на (6) относно следващата стъпка.

В общия случай матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ е пълна, което усложнява конструирането на функционален вид на координатната зависимост на решението на (6). В частност методът HEXNEM3 безусловно изисква за тази цел уравненията да бъдат разделени, т.е. матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ да бъде диагонална. Прост начин за заобикаляне на този проблем е извъндиагоналните членове да се пренесат в десните части на (6), което от своя страна би наложило тяхното итеративно обновяване до сходимост. Това итериране по групови потоци наподобява организацията на решаване на стационарни задачи чрез итериране по източника от делене. Такъв подход за нестационарни задачи е избран например в програмната реализация на DYN3D [Grundmann et al., 2005].

Подобна процедура обаче не се съгласува добре с принципа за неявно диференциране по време и се отличава с бавна сходимост. По тази причина за целите на представеното в дисертацията изследване беше приложен описаният по-долу алтернативен подход, известен като модално разлагане.

За системи от вида:

$$\hat{\mathbf{L}}\boldsymbol{\Phi} - \hat{\mathbf{A}}\boldsymbol{\Phi} = \mathbf{Q}, \quad (7а)$$

където $\hat{\mathbf{L}}$ е линеен диференциален оператор, а матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ е координатно независима, уравненията могат да бъдат разделени посредством диагонализацията: $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$, където всяка от матриците отдясно също е координатно независима, а $\hat{\boldsymbol{\Lambda}}$ е диагонална.

Така действието на операторите $\hat{\mathbf{Z}}$ и $\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$ върху (7а) води до системата:

$$\hat{\mathbf{L}}\mathbf{f} - \hat{\boldsymbol{\Lambda}}\mathbf{f} = \mathbf{S}, \quad (7б)$$

а връзката между величините в (7а, 7б) е следната:

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Phi} = \hat{\mathbf{Z}}\mathbf{f} \\
&\mathbf{f} = \hat{\mathbf{Z}}^{-1}\boldsymbol{\Phi} \\
&\mathbf{S} = \hat{\mathbf{Z}}^{-1}\mathbf{Q}
\end{aligned}
\quad (8)
$$

Прието е величините $\mathbf{f}$ да се наричат *модове*.

Уравненията (7б) са записани поотделно за всеки мод, но остават свързани помежду си чрез вътрешните и външните гранични условия, които се отнасят за потоците $\boldsymbol{\Phi}$ и токовете $\mathbf{J}$. Във всички случаи обаче итерирането по членовете $A_{g,g'}^{n,k+1}\Phi_{g'}^{n,k+1}$ в (6) напълно се избягва.

По принцип техниката на модалното разлагане може да бъде прилагана за решаване на дифузионни задачи с произволен брой енергетични групи, включително при наличие на комплексни собствени стойности на матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ [Cho et al., 1997; Aragonés et al., 2007].

Модално разлагане за (6) не е прилагано в досегашни реализации на методите HEXNEM за решаване на стационарната или нестационарната дифузионна задача. Процедурата за прилагането му при метода HEXNEM3, както и предимствата и особеностите на този подход, са изложени в [Kolev and Christoskov, 2019[a]; Kolev and Christoskov, 2019[b]] и са по-подробно описани в настоящата дисертация.

Друга новост в развитието на фамилията от методи HEXNEM е въвеждането на т.нар. ACMFD схема [Chao, 1999], която предлага определени удобства при съставянето и решаването на системата от балансни уравнения, породени от (6).

Нодалните методи [Lawrence, 1986] за решаване на дифузионното уравнение във физиката на ядрените реактори се свеждат до построяването на връзки между нетните неутронни токове през границите на клетките (нодовете) и средните стойности на неутронния скаларен поток в тези нодове. Тези връзки са известни като нодална схема и се използват за съставяне на система от уравнения за средните нодални потоци.

В досегашните реализации на методите HEXNEM за съставяне на такава система от уравнения е прилагана техниката на сдвояване по парциални токове (*partial current coupling*). Тази техника се основава на намиране чрез нодалната схема на връзка между изходящия и входящия парциални токове за дадена нодална стена и организиране на итеративна процедура за определяне на тези токове чрез налагане на външните гранични условия и на условия за непрекъснатост на парциалния неутронен ток през стените на нодовете. В хода на итерациите нодалната схема се използва за изразяване на средните нодални скаларни потоци чрез парциалните токове. Средните нодални скаларни потоци са всъщност и същинските нодални неизвестни, за които се прилагат критериите за сходимост.

За разлика от описаното, ACMFD подходът позволява чрез нодалната схема да се конструира линейна връзка между външните нормални проекции на нетния неутронен ток по стените на нодовете и средните нодални потоци. Така чрез външните гранични условия и условията за непрекъснатост на скаларния поток и на нетния ток през стените на нодовете се съставя линейна система от уравнения пряко за средните нодални потоци. Алтернативна възможност е ACMFD подходът да се приложи за модовете, но във всички случаи матрицата на системата за нодалните неизвестни се получава в явен вид за пълния набор от нодове в поставената задача. Явният вид на матрицата дава свобода на избор на метод за решаване на тази система. Това е важно предимство пред сдвояването по парциални токове, при което алгебричната задача за тяхното намиране има вида на стационарен итерационен процес, за чието ускоряване са достъпни само полиномни методи. Друго очевидно предимство е избягването на нуждата от възстановяване на средните нодални потоци чрез парциалните токове.

Изводът на ACMFD формулировката за HEXNEM3, както и коментари върху особеностите на подхода, могат да бъдат намерени в [Kolev and Christoskov, 2019; Kolev and Christoskov, 2018]. По-подробно описание има в основното изложение и в Приложението към настоящата дисертация.

I. Стационарна двугрупова дифузионна задача

Най-често за начално условие на нестацонарната дифузионна задача се взима разпределението на потока за дадено условнокритично състояние, което трябва да е предварително пресметнато и известно. По тази причина, а и защото при третиране на нестационарната задача се използват всички основни резултати за стационарната, най-напред ще бъде разгледан стационарният случай.

Общоприетият запис на стационарната двугрупова задача е следният [Duderstadt and Hamilton, 1976]:

$$\begin{aligned} &\nabla\cdot\mathbf{J}_1^n(\mathbf{r})+\Sigma_r^n\Phi_1^n(\mathbf{r})=\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{\nu,g}^n\Phi_g^n(\mathbf{r}), \\ &\nabla\cdot\mathbf{J}_2^n(\mathbf{r})+\Sigma_a^n\Phi_2^n(\mathbf{r})=\Sigma_s^n\Phi_1^n(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{I.1}$$

където индексът n се отнася за даден нод, а долните индекси 1 и 2 обозначават енергетичните групи (1 – за *бързата* и 2 – за *топлинната*). Σ_r^n е сечението за извеждане на неутрони от бързата група, Σ_a^n е сечение за поглъщане на топлинни неутрони, Σ_s^n е сечение за разсейване на неутрони от бързата към топлинната група, а $\Sigma_{\nu,g}^n$ е произведение на сечението за делене с неутрони от група g и средния брой неутрони, получени при един такъв акт на делене. k_{eff} е ефективният коефициент на размножение.

Нетният ток и скаларният поток са свързани чрез закона на Фик за дифузионното приближение на уравнението на неутронен пренос:

$$\mathbf{J}_g^n(\mathbf{r})=-D_g^n\nabla\Phi_g^n(\mathbf{r}), \tag{I.2}$$

където D е *коефициент на дифузия*.

Методите HEXNEM се основават на т.нар. напречно интегриране и позволяват обособено третиране на двумерна задача в равнината (x,y) и едномерна задача в аксиално направление.

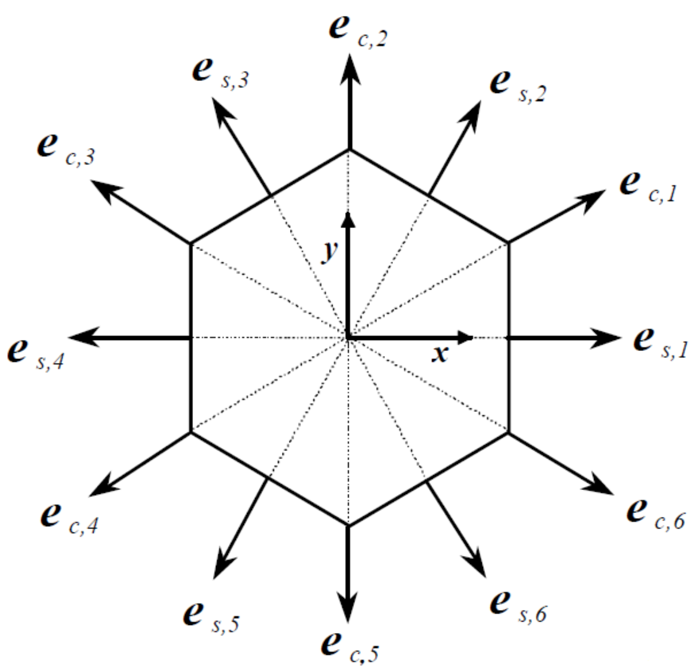
I.1. Двумерна стационарна задача

В декартови координати двумерната стационарна дифузионна задача има следния вид:

$$-D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi(x,y)+\Sigma_r\Phi(x,y)=Q(x,y) \tag{I.1.1}$$

Източникът $Q(x,y)$ в бързата група се дължи на делене, а в топлинната – на разсейване от бързата група. Поради напречното интегриране той включва с обратен знак аксиалната утечка. Техниката на напречно интегриране и апроксимирането на напречната утечка са разгледани в раздел I.3.

За горивната решетка на ВВЕР формата на нодовете е хексагонална, а при хомогенизирани сечения за даден слой от горивна касета размерите на нода съответстват на горивна касета с принадлежащото ѝ междукасетно пространство. Напречното сечение на такъв шестостенен нод е представено на Фиг I.1.



Фиг. I.1. Геометрия на напречното сечение на шестостенен нод

Изразяването на помощните единични вектори през стените и ъглите на нода чрез двата единични базисни вектора, насочени по *x* и *y*, е както следва:

$$\mathbf{e}_1^s=\mathbf{e}_x \qquad \mathbf{e}_1^c=\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x+\frac{1}{2}\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{e}_2^s=\frac{1}{2}\mathbf{e}_x+\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_y \qquad \mathbf{e}_2^c=\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{e}_3^s=-\frac{1}{2}\mathbf{e}_x+\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_y \qquad \mathbf{e}_3^c=-\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x+\frac{1}{2}\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{e}_4^s = -\mathbf{e}_x \qquad \mathbf{e}_4^c = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x - \frac{1}{2}\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{e}_5^s = -\frac{1}{2}\mathbf{e}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_y \qquad \mathbf{e}_5^c = -\mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{e}_6^s = \frac{1}{2}\mathbf{e}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_y \qquad \mathbf{e}_6^c = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_x - \frac{1}{2}\mathbf{e}_y$$

Помощните единични вектори се използват в модела за нодално разлагане на решението на уравнението (I.1.1), който ще бъде разгледан малко по-долу. Нека освен осите x и y бъдат въведени за удобство и помощните оси u и v, където u е обща ос за векторите $\mathbf{e}_2^s$ и $\mathbf{e}_5^s$, а v е обща ос за $\mathbf{e}_3^s$ и $\mathbf{e}_6^s$.

За простота на по-нататъшните изрази е подходящо да се извърши следното обезразмеряване на задачата:

$$x' = \frac{x}{h},\ y' = \frac{y}{h},$$

където $2h$ е разстоянието между две срещуположни стени на нода. Това води до следните означения и изрази:

$$\frac{d}{dx} = \frac{dx'}{dx}\frac{d}{dx'} = \frac{1}{h}\frac{d}{dx'} \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{h^2}\frac{d^2}{dx'^2}$$

$$\frac{d^2}{dy^2} = \frac{1}{h^2}\frac{d^2}{dy'^2}$$

$$D' = \frac{D}{h}; \Sigma'_r = h\Sigma_r; B' = hB = h\sqrt{\frac{\Sigma_r}{D}} = \sqrt{\frac{\Sigma'_r}{D'}}; Q' = hQ$$

(За удобство символът „'“ често ще бъде пропускан при изписване на D'.)

С тези означения решаваната задача се записва като:

$$-D'\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)\Phi(x', y') + \Sigma'_r\,\Phi(x', y') = Q'(x', y')\,. \qquad \text{(I.1.2)}$$

Нодалното разлагане на скаларния поток в настоящата работа съвпада с модела на метода HEXNEM3 [Christoskov and Petkov, 2013]:

$$\Phi\left(x', y'\right) = \sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x', y'\right) + \sum_{k=1}^{6} a_k^s \exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \sum_{k=1}^{6} a_k^w \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right), \qquad \text{(I.1.3)}$$

където $l(1) = l(4) = 2; l(2) = l(5) = 6; l(3) = l(6) = 4$ (вж. Фиг. I.1).

Изразът (I.1.3) е общо решение за уравнение (I.1.2). Полиномната компонента $\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x', y'\right)$ в него е частно решение на това уравнение и се построява от източника. Тази компонента е от втора степен и е минималната с ненулев принос в утечката. Членовете с експоненти удовлетворяват хомогенната част на дифузионното уравнение (I.1.2):

$$-D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi(x,y)+\Sigma\Phi(x,y)=0 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi(x,y)=\frac{\Sigma}{D}\Phi(x,y)$$

$$=B^2\Phi(x,y)$$

И действително, може да се покаже, че:

$$\nabla^2 \exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)=B^2\left(\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{e}_k^s\right)\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)=B^2\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)$$

$$\nabla^2\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{r}\right)\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)=2B\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{e}_k^s\right)\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)$$

$$+B^2\left(\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{e}_k^s\right)\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{r}\right)\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)$$

$$=B^2\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{r}\right)\exp\left(B\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}\right)$$

$\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{e}_k^s=1$ (по построение);

$\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{e}_k^s=0$ (по построение).

Пълнотата на общото решение на (I.1.2) би изисквала броят на експонентите в модела да бъде безкраен, също както и степента на полинома за частното решение. Това е практически неосъществимо, а добавянето на допълнителни членове в нодалното разложение усложнява задачата непропорционално в техническо отношение.

Всъщност трябва да се отбележи, че нехомогенността на уравнението (I.1.2) се дължи на итерирането по зависимия източник и на напречната утечка, докато базовата условнокритична задача без външен източник е хомогенна и нейното решение не би трябвало да съдържа полиномна компонента. При малък брой експоненти обаче въвеждането на тази полиномна компонента повишава адаптивността на нодалното разлагане и е решаваща за осигуряване на добра точност на метода.

Особеност на метода HEXNEM3 е включването в модела (I.1.3) на експонентите с линейно меняща се амплитуда по страните на нода $\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{r}'\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}'\right)$. Това замества експонентите през върховете на нода в HEXNEM2, без да усложнява реализацията, а от физична гледна точка позволява обосноваването на по-естествени и удобни за прилагане вътрешни гранични условия.

Наред с вътрешните и външните гранични условия за средните по страните на нода скаларен поток Φ_k^s и нетен ток J_k^s, в HEXNEM3 се въвеждат условия и за описаните по-долу т.нар. *тангенциални моменти* на потока и тока, Φ_k^w, и J_k^w. Тези допълнителни условия, които заменят условията за потока и тока във върховете на нода при HEXNEM2, са до голяма степен в основата на високата точност и ефективност на метода HEXNEM3.

Средната стойност на потока на *k*-тата стена на нода е:

$$\Phi_k^s=\frac{1}{L'^s_k}\left[\int_{L'^s_k}\Phi\left(x',y'\right)ds\right]; \qquad \text{(I.1.4a)}$$

където интегрирането е по дължината на съответната стена, като $L'^{s}_{k} = \dfrac{2}{\sqrt{3}}$.

Средната стойност на външната нормална проекция на нетния ток по дадена страна е:

$$J_k^s = -\frac{1}{L'^{s}_{k}}\left[D' \int_{L'^{s}_{k}} \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla\Phi\left(x', y'\right) ds\right]. \tag{I.1.4б}$$

Тангенциалният момент на потока е:

$$\Phi_k^w = \frac{1}{L'^{s}_{k}}\left[\int_{L'^{s}_{k}} \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \left(x', y'\right)\right)\Phi\left(x', y'\right) ds\right]. \tag{I.1.4в}$$

Тангенциалният момент на външната нормална проекция на нетния ток, аналогично, е следният:

$$J_k^w = -\frac{1}{L'^{s}_{k}}\left[D' \int_{L'^{s}_{k}} \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \left(x', y'\right)\right)\mathbf{e}_k^s \cdot \nabla\Phi\left(x', y'\right) ds\right]. \tag{I.1.4г}$$

Моментите на потока и на тока позволяват отчитане на вариацията на съответната величина по страната на нода. Така например, ако потокът и токът се изменят най-много линейно по дължината на нодалната страна, то изразите (I.1.4) биха съдържали пълната информация за тях.

От (I.1.3) и (I.1.4) се вижда, че величините Φ_k^s, Φ_k^w, J_k^s, J_k^w са линейна комбинация на коефициентите $c_i,\, i = 0,...,5$, $a_k^s,\, k = 1,...,6$ и $a_k^w,\, k = 1,...,6$. Нека:

$$\mathbf{c} = col\left(c_0,...,c_5\right),\ \mathbf{A}^s = col\left(a_1^s,...,a_6^s\right) \text{ и } \mathbf{A}^w = col\left(a_1^w,...,a_6^w\right),$$

където *col* (*column*) е означение за векторна величина.

Тогава за всеки нод могат да се запишат връзките (аналогично на публикацията [Christoskov and Petkov, 2013]):

$$\begin{aligned}\mathbf{\Phi}^s &= \hat{\mathbf{Q}}^{f,ss}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{f,sw}\mathbf{A}^w + \tilde{\mathbf{P}}^{f,s}\\ \mathbf{\Phi}^w &= \hat{\mathbf{Q}}^{f,ws}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{f,ww}\mathbf{A}^w + \tilde{\mathbf{P}}^{f,w}\end{aligned} \tag{I.1.5а}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{d}^s &= \hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\mathbf{A}^w\\ \mathbf{d}^w &= \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\mathbf{A}^w\end{aligned} \tag{I.1.5б}$$

където:

$$\mathbf{\Phi}^s = col\left(\Phi_1^s,...,\Phi_6^s\right)$$

$$\mathbf{\Phi}^w = col\left(\Phi_1^w,...,\Phi_6^w\right)$$

$$\tilde{\mathbf{P}}^{f,s} = \hat{\mathbf{P}}^{f,s}\mathbf{c}$$

$$\tilde{\mathbf{P}}^{f,w} = \hat{\mathbf{P}}^{f,w}\mathbf{c}$$

$$\mathbf{d}^s = -\left(\frac{\mathbf{J}^s}{D} + \tilde{\mathbf{P}}^{c,s}\right); \tilde{\mathbf{P}}^{c,s} = \hat{\mathbf{P}}^{c,s}\mathbf{c}$$

$$\mathbf{d}^w = -\left(\frac{\mathbf{J}^w}{D} + \tilde{\mathbf{P}}^{c,w}\right); \tilde{\mathbf{P}}^{c,w} = \hat{\mathbf{P}}^{c,w}\mathbf{c}$$

Матриците в горните изрази са представени в Приложението (раздел IV.6), както следва:

$\hat{\mathbf{Q}}^{f,ss}, \hat{\mathbf{Q}}^{f,sw}, \hat{\mathbf{Q}}^{f,ws}, \hat{\mathbf{Q}}^{f,ww}$ в таблици IV.5, IV.6, IV.8, IV.9;

$\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}, \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}, \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}, \hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}$ в таблици IV.11, IV.12, IV.14, IV.15;

$\hat{\mathbf{P}}^{f,s}, \hat{\mathbf{P}}^{f,w}, \hat{\mathbf{P}}^{c,s}, \hat{\mathbf{P}}^{c,w}$ в таблици IV.4, IV.7, IV.10, IV.13.

Неизвестни в (I.1.5) са векторите $\mathbf{c}$, $\mathbf{A}^s$, $\mathbf{A}^w$. Ясно е, че елементите на $\mathbf{c}$ могат да бъдат намерени от източника (при построяване на частното решение). Елементите на $\mathbf{A}^s$ и $\mathbf{A}^w$, от своя страна, могат да бъдат намерени чрез свързването на изразите (I.1.5) за всички нодове чрез вътрешните и външните гранични условия. Това ще образува една линейна система за тези неизвестни коефициенти, а нейното решаване ще е равносилно на решаване на нехомогенното дифузионно уравнение при известен източник.

В оригиналната реализация на HEXNEM3 итерационният процес за намиране на средните нодални потоци чрез коефициентите $\mathbf{A}^s$ и $\mathbf{A}^w$ е стационарен, при което матрицата на системата не се формира явно [Christoskov and Petkov, 2013]. При условнокритични задачи не се прилага самостоятелна техника за ускоряване на процеса, защото тази функция може да се съвмести с ускоряването на итерациите по източника.

В настоящото изследване е предложен подход, основан на схемата ACMFD (Coarse-Mesh Finite-Differencing) [Chao, 1999], който води до експлицитното съставяне на матрицата на нехомогенната линейна система за средните скаларни потоци във всички нодове. Това позволява неограничен избор от методи за решаването на тази система и създава голямо удобство най-вече при решаване на нестационарни задачи, където нуждата от ускоряване на алтернативния стационарен итерационен процес е неизбежна, а единствено възможната полиномна техника може да бъде недостатъчно ефективна и стабилна.

Изразите (I.1.5) са отправни при извеждането на основните връзки на ACMFD схемата за метода HEXNEM3 [Kolev and Christoskov, 2018]. Главните стъпки на реализацията на ACMFD са описани в следващия раздел.

I.1.1. ACMFD схема за двумерната задача

Както вече беше споменато, намирането на решение за дадена геометрия и гранични условия е равносилно на намиране на всички коефициенти в модела (I.1.3). За търсене на $\mathbf{A}^s$ и $\mathbf{A}^w$ може да се следва описаният по-долу подход.

Нека в съответствие с (I.1.5б) се въведат следните означения:

$$\hat{\mathbf{Q}}^c = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} & \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw} \\ \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws} & \hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}^s \\ \mathbf{d}^w \end{pmatrix}; \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^s \\ \mathbf{A}^w \end{pmatrix}.$$

При тези означения елементите с индекс 1 ... 6 се отнасят за средните стойности, а тези с индекс 7 ... 12 – за тангенциалните моменти. Такова индексиране ще бъде използвано често по-долу.

Така следва:

$$\hat{\mathbf{Q}}^{c}\mathbf{A} = \mathbf{d} \tag{I.1.6}$$

Изразът (I.1.6) е кратък запис на системата (I.1.5б) за намиране на неизвестните $\mathbf{A}$. Елементите на матрицата $\hat{\mathbf{Q}}^{c}$ зависят изцяло от материални константи и по-конкретно от величините *B*. За стационарни задачи, където сеченията са постоянни, всички матрици в (I.1.5) се генерират само веднъж.

Матрицата $\hat{\mathbf{Q}}^{c}$, която е с размерност 12×12, е със специална блочна структура, позволяваща нейното сравнително лесно аналитично обръщане. Това съществено подобрява бързодействието на изчислителната процедура особено при нестационарни задачи, където матриците от (I.1.5) се обновяват практически на всяка итерация. Не на последно място, аналитичният подход за (I.1.6) предпазва в по-голяма степен от натрупване на сериозни грешки от закръгление, каквито, макар и в редки случаи, могат да настъпят при изцяло числени процедури.

С отчитане на блочната структура на $\hat{\mathbf{Q}}^{c}$, решаването на (I.1.5б) относно $\mathbf{A}^{s}$ и $\mathbf{A}^{w}$ чрез последователни замествания и линейни операции води до следните изрази [Lohan, 1933]:

$$\mathbf{A}^{s} = \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\right]^{-1}\mathbf{d}^{s} - \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\right]^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\right)^{-1}\mathbf{d}^{w}$$

$$\mathbf{A}^{w} = -\left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\right]^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\right)^{-1}\mathbf{d}^{s} + \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\right]^{-1}\mathbf{d}^{w}$$

Нека за удобство бъдат въведени означенията:

$$\hat{\mathbf{F}}^{s} = \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\right)^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{F}}^{w} = \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\right)^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{i,s} = \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\right]^{-1} = \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} - \hat{\mathbf{F}}^{s}\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\right]^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{i,w} = \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} - \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\right)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\right]^{-1} = \left[\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} - \hat{\mathbf{F}}^{w}\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\right]^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{d,ss} = \hat{\mathbf{Q}}^{i,s}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{d,sw} = -\hat{\mathbf{Q}}^{i,s}\hat{\mathbf{F}}^{s}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{d,ws} = -\hat{\mathbf{Q}}^{i,w}\hat{\mathbf{F}}^{w}$$

$$\hat{\mathbf{Q}}^{d,ww} = \hat{\mathbf{Q}}^{i,w}$$

Така за коефициентите $\mathbf{A}$ окончателно се получава:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^s &= \hat{\mathbf{Q}}^{d,ss}\mathbf{d}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{d,sw}\mathbf{d}^w\\ \mathbf{A}^w &= \hat{\mathbf{Q}}^{d,ws}\mathbf{d}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{d,ww}\mathbf{d}^w\end{aligned}, \text{ т.е.}$$

$$\begin{pmatrix}\mathbf{A}^s\\ \mathbf{A}^w\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{\mathbf{Q}}^{d,ss} & \hat{\mathbf{Q}}^{d,sw}\\ \hat{\mathbf{Q}}^{d,ws} & \hat{\mathbf{Q}}^{d,ww}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{d}^s\\ \mathbf{d}^w\end{pmatrix} \qquad \text{(I.1.7)}$$

Изразите (I.1.7), получени на основата на (I.1.5б), се използват в (I.1.5а) за свързване на средните стойности и тангенциалните моменти на скаларния поток по страните на нода с аналогичните величини за външните нормални проекции на нетния ток. Резултатът е:

$$\mathbf{\Phi}^{s/w} = \hat{\mathbf{R}}\mathbf{d} + \tilde{\mathbf{P}}^f,$$

където:

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix}\hat{\mathbf{Q}}^{f,ss} & \hat{\mathbf{Q}}^{f,sw}\\ \hat{\mathbf{Q}}^{f,ws} & \hat{\mathbf{Q}}^{f,ww}\end{pmatrix}\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}.$$

Структурата на $\hat{\mathbf{R}}$ напълно съвпада с тази на $\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$. Тази структура спомага за опростяването на някои от основните ACMFD изрази. Видът на $\hat{\mathbf{R}}$ и $\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$ е представен на Фиг. I.2:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	α	β	γ	δ	γ	β	0	ε	-π	0	π	-ε
2	β	α	β	γ	δ	γ	ε	0	-ε	π	0	-π
3	γ	β	α	β	γ	δ	π	-ε	0	ε	-π	0
4	δ	γ	β	α	β	γ	0	-π	ε	0	-ε	π
5	γ	δ	γ	β	α	β	-π	0	π	-ε	0	ε
6	β	γ	δ	γ	β	α	-ε	π	0	-π	ε	0
7	0	τ	-σ	0	σ	-τ	κ	λ	μ	ν	μ	λ
8	τ	0	-τ	σ	0	-σ	λ	κ	λ	μ	ν	μ
9	σ	-τ	0	τ	-σ	0	μ	λ	κ	λ	μ	ν
10	0	-σ	τ	0	-τ	σ	ν	μ	λ	κ	λ	μ
11	-σ	0	σ	-τ	0	τ	μ	ν	μ	λ	κ	λ
12	-τ	σ	0	-σ	τ	0	λ	μ	ν	μ	λ	κ

Фиг. I.2. Структура на матриците $\hat{\mathbf{R}}$ и $\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$

За построяване на ACMFD схемата е нужна и връзка на средния нодален поток с елементите на **A**, а чрез тях и (I.1.7) – с нетните токове . Тя се получава както следва:

$$\frac{1}{F_{hex}}\iint\limits_{F_{hex}}\Phi(x,y)\,dxdy = \frac{1}{F'_{hex}}\left[\int\limits_{-1}^{0}\int\limits_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}\Phi(x',y')\,dy'dx' + \int\limits_{0}^{1}\int\limits_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}\Phi(x',y')\,dy'dx'\right].$$

Или още, с отчитане на модела (I.1.3):

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} \Phi\left(x', y'\right) dx' dy' = \frac{1}{F'_{hex}} \alpha \sum_{k} a_k^s + \bar{P},$$

където:

a_k^s са елементи на вектора **A**, $F'_{hex} = 2\sqrt{3}$ и

$$\alpha = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left[\left(\exp(B') - \exp(-B') \right) + \frac{1}{B'} \left(\exp(B') + \exp(-B') \right) - \frac{2}{B'} \right]$$

е интегралът на коя-да-е експонента от вида $\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)$ по площта на нода F'_{hex}.

Приносът на последните 6 елемента на **A** е нулев, защото интегралът на всяка експонента с тангенциално меняща се амплитуда от вида $\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right) \exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)$ върху F'_{hex} е нулев.

Прилагането на получените резултати за средните потоци и техните тангенциални моменти по общата стена между съседните нодове *n* и *m* (стена *k* за нода *n* и стена *l* за нода *m*) води до:

$$\Phi_k^{s,n} = r_{k,k}^n d_k^n + r_{k,l}^n d_l^n + \sum_{i \neq k,l,k+6,l+6} r_{k,i}^n d_i^n + \tilde{P}_k^{f,n} \qquad \text{(I.1.8а)}$$

$$\Phi_l^{s,m} = r_{l,k}^m d_k^m + r_{l,l}^m d_l^m + \sum_{i \neq k,l,k+6,l+6} r_{l,i}^m d_i^m + \tilde{P}_l^{f,m} \qquad \text{(I.1.8б)}$$

$$\Phi_k^{w,n} = r_{k+6,k+6}^n d_{k+6}^n + r_{k+6,l+6}^n d_{l+6}^n + \sum_{i \neq k,l,k+6,l+6} r_{k+6,i}^n d_i^n + \tilde{P}_{k+6}^{f,n} \qquad \text{(I.1.8в)}$$

$$\Phi_l^{w,m} = r_{l+6,k+6}^m d_{k+6}^m + r_{l+6,l+6}^m d_{l+6}^m + \sum_{i \neq k,l,k+6,l+6} r_{l+6,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{l+6}^{f,m} \qquad \text{(I.1.8г)}$$

Аналогично за средните потоци в двата съседни нода се получава:

$$\bar{\Phi}^n = \gamma^n d_k^n + \gamma^n d_l^n + \gamma^n \sum_{\substack{i=k \\ i \neq k,l}}^{6} d_i^n + \bar{P}^n \qquad \text{(I.1.8д)}$$

$$\bar{\Phi}^m = \gamma^m d_k^m + \gamma^m d_l^m + \gamma^m \sum_{\substack{i=k \\ i \neq k,l}}^{6} d_i^m + \bar{P}^m \qquad \text{(I.1.8е)}$$

Тук $\gamma = \frac{1}{F'_{hex}} \alpha \sum_{k=1}^{6} [(\hat{Q}^c)^{-1}]_{ki},\ i = 1,...,6,$

тъй като поради структурата на $\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$ $\gamma_i = \gamma$ за $i = 1,...,6$ и $\gamma_i = 0$ за $i = 7,...,12$.

За скаларния поток и нормалната проекция на нетния ток, както и за техните тангенциалн моменти са в сила следните условия за непрекъснатост на общата стена между съседните нодове:

$$\Phi_k^{s,n} = \Phi_l^{s,m} \qquad \text{(I.1.8ж)}$$

$$\Phi_k^{w,n} = \Phi_l^{w,m} \qquad \text{(I.1.8з)}$$

$$J_k^{s,n} = -J_l^{s,m} = J_n^{s,m} \qquad \text{(I.1.8и)}$$

$$J_k^{w,n} = -J_l^{w,m} = J_n^{w,m} \qquad \text{(I.1.8к)}$$

Важно е да се отбележи следното:

– Поради структурата на матрицата $\hat{\mathbf{R}}$ средните потоци за стените (по коя-да-е ос, *x*, *u* или *v*) не зависят от моментите на тока *по същата ос*, но остава зависимостта от моментите на тока по другите две оси.
– Отново по същата причина моментите на потоците по стените не зависят от средните токове *по същата ос*, но остава зависимостта от средните токове по другите две оси.
– Поради структурата на $\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$ средните потоци за нодовете зависят от средните токове по стените, но не и от техните моменти.

Окончателно, чрез замествания и линейни операции върху изразите (I.1.8) се получават следните основни за ACMFD връзки между граничните потоци, средните нодални потоци и граничните нетни токове (техният извод е поместен в раздел IV.1 на Приложението):

$$\begin{aligned} \Phi_k^{s,n} &= C^{J,n}\frac{J_k^{s,n}}{D^n} + C^{\Phi,n}\bar{\Phi}^n + T_k^n \\ \Phi_l^{s,m} &= C^{J,m}\frac{J_l^{s,m}}{D^m} + C^{\Phi,m}\bar{\Phi}^m + T_l^m \end{aligned} \qquad \text{(I.1.9a)}$$

С използване на условията за непрекъснатост в (I.1.8) се достига до крайния ACMFD израз за средната по стената външна нормална проекция на нетния ток:

$$\begin{aligned} J_n^{s,m} &= \frac{\left(C_l^{\Phi,m} + \dfrac{T_l^{s,m}}{\bar{\Phi}^m}\right)}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^m - \frac{\left(C_k^{\Phi,n} + \dfrac{T_k^{s,n}}{\bar{\Phi}^n}\right)}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^n \\ J_n^{s,m} &= \tilde{D}_{nm}^{s,m}\bar{\Phi}^m - \tilde{D}_{nm}^{s,n}\bar{\Phi}^n \end{aligned} \qquad \text{(I.1.9б)}$$

където $\tilde{D}_{nm}^{s,m}$ и $\tilde{D}_{nm}^{s,n}$ са така наречените *свързващи коефициенти*.

Такава връзка между нетния ток и средните потоци формално наподобява класическите крайни разлики. До аналогични на (I.1.9б) изрази се достига и в работите [Chao, 1999; Kolev and Christoskov, 2018].

Нелинейността в (I.1.9б) от вида $\dfrac{1}{\bar{\Phi}}$ по принцип не е задължителна. Може да се работи и с нехомогенни изрази от вида:

$$J_n^{s,m} = \frac{C_l^{\Phi,m}}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^m + \frac{T_l^{s,m}}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)} - \frac{C_k^{\Phi,n}}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^n - \frac{T_k^{s,n}}{\left(\dfrac{C_k^{J,n}}{D^n} + \dfrac{C_l^{J,m}}{D^m}\right)} \qquad \text{(I.1.9в)}$$

За момента на тока, аналогично, се получава:

$$J_n^{w,m} = \frac{T_k^{w,n}}{\dfrac{r_{l+6,l+6}^m}{D^m} + \dfrac{r_{k+6,k+6}^n}{D^n}} - \frac{T_l^{w,m}}{\dfrac{r_{l+6,l+6}^m}{D^m} + \dfrac{r_{k+6,k+6}^n}{D^n}} \qquad \text{(I.1.10)}$$

Вижда се, че изразите за моментите на нетните токове не зависят явно от средните потоци. Тези изрази не участват и в построяването на балансните уравнения. Те обаче са необходими, защото свързващите коефициенти за тока в (I.1.9) зависят от моментите на тока и на потока чрез величините *T*.

I.1.2. Коефициенти на прекъсване

Експлоатационният реакторен анализ най-често се основава на решаване на уравнението на неутронен пренос в дифузионно приближение в малък брой енергетични групи (типично две). За да се намали изчислителната тежест обикновено се прилага едроклетъчна хомогенизация на ниво слой от горивна касета. Дифузионните константи се подготвят така, че да запазват скоростите на неутронни реакции.

Тъй като получаването на еквивалентни дифузионни коефициенти за хомогенизираните нодове е свързано с неизбежни компромиси, които водят до принципна невъзможност за точно възпроизвеждане на средните нодални потоци за съществено хетерогенни по природа нодове, са развити различни техники за компенсиране на ефектите от хомогенизация. Една от тях се състои в прилагането на т.нар. коефициенти на прекъсване на потока (Reference Discontinuity Factors, съкратено RDF) [Koebke, 1978; Smith, 1986].

По дефиниция коефициентът на прекъсване f за дадена нодална стена е отношението на средния за стената „хетерогенен“ поток Φ^{het} (какъвто би бил той при решаване на преносната задача за хетерогенна среда) към съответния „хомогенен“ поток Φ^{hom} (какъвто се получава при решаване на задачата след хомогенизация):

$$f = \frac{\Phi^{het}}{\Phi^{hom}}$$

RDF се третират като материални характеристики и допълват набора от дифузионни константи.

Условието за непрекъснатост на скаларния поток на общата стена между съседни нодове се налага за „хетерогенния“ поток. Тъй като коефициентите на прекъсване за тази стена в двата нода са различни, то ще има вида:

$$\Phi_{ij}^{hom} f_{ij} = \Phi_{ji}^{hom} f_{ji} \,,$$

където i и j са нодални индекси.

Това условие ефективно запазва неутронния баланс какъвто би бил за хетерогенния нод.

Прилагането на RDF слабо модифицира изразите за свързващите коефициенти, а процедурата за извеждането на последните остава непроменена.

I.1.3. Външни гранични условия

На външната граница за условия от логаритмичен тип ($J_k^{s/w} = \alpha \Phi_k^{s/w}$) се получава:

За средния ток:

$$J_k^{s,n} = \left(\frac{C_k^{\Phi,n} + \dfrac{T_k^{s,n}}{\bar{\Phi}^n}}{\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_k^{J,n}}{D^n}} \right) \bar{\Phi}^n$$

$$J_k^{s,n} = \tilde{D}_k^n \bar{\Phi}^n$$

Или:

$$J_k^{s,n} = \frac{C_k^{\Phi,n}}{\left(\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_k^{J,n}}{D^n}\right)} \bar{\Phi}^n + \frac{T_k^{s,n}}{\left(\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_k^{J,n}}{D^n}\right)}.$$

За момента на тока:

$$J_k^{w,n} = \frac{T_k^{w,n}}{\left(\dfrac{1}{\alpha} + \dfrac{r_{k+6,k+6}^n}{D^n}\right)}$$

Известно е, че заради анизотропията на насочения поток дифузионното приближение на уравнението на неутронен пренос не може да гарантира задоволителна точност в близост до граници между области със силно различни преносни свойства. Този недостатък може да се прояви, ако например в дифузионната задача се включат нодове от близкия отражател, които да позволят налагане на прости условия на свободна повърхност на тяхната външна граница.

Често предпочитана възможност е отражателят да се представи чрез т.нар. албедни матрици [Koebke, 1978; Smith, 1986], които свързват изходящия и входящия парциални токове на външната граница на горивната област. Така поставени, външните гранични условия ще имат следния вид:

$$\begin{aligned} J_1^- &= \gamma_{11} J_1^+ + \gamma_{12} J_2^+ \\ J_2^- &= \gamma_{21} J_1^+ + \gamma_{22} J_2^+ \end{aligned}, \qquad \text{(I.1.11)}$$

където $J_{1,2}^-$ са входящите за съответната енергетична група парциални токове, а $J_{1,2}^+$ – изходящите.

Коефициентите γ в албедната матрица се третират като материални данни и се получават чрез решаване на локални преносни задачи по по-точен метод.

За да бъде приведен видът на (I.1.11) в удобен запис за целите на ACMFD, трябва да се използва дефиницията за парциалните токове $J_{1,2}^{\pm}$ изразени чрез нетния ток и скаларния поток. Последователно се получава:

$$J^{\pm} = \frac{1}{4}\Phi^s \pm \frac{1}{2} J^s$$

$$\frac{1}{2}\Phi_1^s - J_1^s = \gamma_{11}\left(\frac{1}{2}\Phi_1^s + J_1^s\right) + \gamma_{12}\left(\frac{1}{2}\Phi_2^s + J_2^s\right)$$

$$\frac{1}{2}\Phi_2^s - J_2^s = \gamma_{21}\left(\frac{1}{2}\Phi_1^s + J_1^s\right) + \gamma_{22}\left(\frac{1}{2}\Phi_2^s + J_2^s\right)$$

Или още, в матрично-векторно представяне:

$$\frac{1}{2}\mathbf{\Phi}^s - \mathbf{J}^s = \hat{\mathbf{\Gamma}}\left(\frac{1}{2}\mathbf{\Phi}^s + \mathbf{J}^s\right)$$

$$\mathbf{J}^s = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{\Gamma}}\right)^{-1}\left(\hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathbf{\Gamma}}\right)\mathbf{\Phi}^s$$

Окончателно работният израз е следният:

$$\mathbf{J}^s = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{\Phi}^s$$

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{\Gamma}}\right)^{-1}\left(\hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathbf{\Gamma}}\right)$$

Прилагането на ACMFD, следвайки процедура напълно аналогична на вече описаната в раздел I.1.1, води до работните изрази (I.1.12).

От

$$\mathbf{J}_k^{s,n} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{\Phi}_k^{s,n}$$

$$J_{k,1}^{s,n} = \alpha_{1,1}\Phi_{k,1}^{s,n} + \alpha_{1,2}\Phi_{k,2}^{s,n}$$

$$J_{k,2}^{s,n} = \alpha_{2,1}\Phi_{k,1}^{s,n} + \alpha_{2,2}\Phi_{k,2}^{s,n}$$

с използване на връзката (I.1.9a) за граничния поток се получава:

$$\begin{aligned}
\frac{J_{k,1}^{s,n}}{\alpha_{1,1}} &= C_1^{J,n}\frac{J_{k,1}^{s,n}}{D^n} + C_1^{\Phi,n}\overline{\Phi}_1 + \left(T_{k,1}^n + \frac{\alpha_{1,2}}{\alpha_{1,1}}\Phi_{k,2}^{s,n}\right) \\
\frac{J_{k,2}^{s,n}}{\alpha_{2,2}} &= C_2^{J,n}\frac{J_{k,2}^{s,n}}{D^n} + C_2^{\Phi,n}\overline{\Phi}_2 + \left(T_{k,2}^n + \frac{\alpha_{2,1}}{\alpha_{2,2}}\Phi_{k,1}^{s,n}\right)
\end{aligned} \qquad \text{(I.1.12)}$$

Оттук нататък пътят за намиране на свързващите коефициенти е ясен. Единствено трябва да се отбележи, че освен ако албедната матрица не е диагонална, то в свързващите коефициенти за токовете на външната граница ще участват и осреднените за външната нодална стена скаларни потоци. Това следва пряко от (I.1.12) и налага пресмятането на величините $\Phi_{k,g}^{s,n}$ на външната граница.

Процедурата за намиране на изрази от вида (I.1.12) за моментите на токовете е напълно аналогична. Както и при вътрешни граници, тези изрази (за моментите на токовете) не зависят явно от средните нодални потоци.

I.1.4. Полиномна компонента

В настоящата работа и в съответствие с методите HEXNEM частното решение на дифузионното уравнение (I.1.2) ще бъде търсено във вид на разложение по ортогонални спрямо интегриране по площта на нода полиноми. Построяването на базиса от ортогонални полиноми за двумерната задача за хексагонална решетка може да бъде намерено в Приложението (раздел IV.2). Крайните изрази за полиномите са следните (в съответствие с [Христосков, 2013]):

$$p_0(x',y') = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{3}}} = \frac{1}{N_0};$$

$$p_1(x',y') = \frac{3}{\sqrt{5\sqrt{3}}}x' = \frac{1}{N_1}x';$$

$$p_2(x',y') = \frac{3}{\sqrt{5\sqrt{3}}}y' = \frac{1}{N_2}y';$$

$$p_3(x',y') = \frac{9\sqrt{5}}{\sqrt{2}\sqrt{43\sqrt{3}}}\left(x'^2 + y'^2 - \frac{5}{9}\right) = \frac{1}{N_3}\left(x'^2 + y'^2 - \frac{5}{9}\right); \qquad \text{(I.1.13)}$$

$$p_4(x',y')=\frac{3\sqrt{3}\sqrt{5}}{2\sqrt{2}\sqrt{7\sqrt{3}}}\left(x'^2-y'^2\right)=\frac{1}{N_4}\left(x'^2-y'^2\right);$$

$$p_5(x',y')=\frac{3\sqrt{3}\sqrt{5}}{\sqrt{2}\sqrt{7\sqrt{3}}}x'y'=\frac{1}{N_5}x'y'.$$

Разбира се, $\bar{P}=\frac{c_0}{N_0}$.

Ортогоналността на полиномите позволява коефициентите в полиномната компонента на потока да бъдат получени по метода на претеглените остатъци. Първо се предполага, че източникът може да бъде сравнително точно представен чрез линейна комбинация на ортогоналните полиноми:

$$Q'\left(x',y'\right)\cong\sum_{i=0}^{5}q_i p_i\left(x',y'\right),$$

където (поради ортогоналността на $\{p_i\}$) коефициентите $\{q_i\}$ се намират по следния начин:

$$q_k=\iint\limits_{F'_{hex}}p_k\left(x',y'\right)Q'\left(x',y'\right)dx'dy',\ k=0,..,5.$$

В частност, за стационарната двугрупова дифузионна задача е изпълнено:

$$Q'\left(x',y'\right)=\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\Sigma'_{\nu,g}\,\bar{\Phi}_g\left(x',y'\right) \text{ за бързата група;}$$

$$Q'\left(x',y'\right)=\Sigma'_s\,\bar{\Phi}_1\left(x',y'\right) \text{ за топлинната група,}$$

където: $\Sigma'_{\nu,g}=h\Sigma_{\nu,g}$; $\Sigma'_s=h\Sigma_s$.

Съвсем естествено същото важи и за коефициентите в разложението на източника по ортогонални полиноми:

$$q_k=\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\Sigma'_{\nu,g}\,F_{g,k},\ k=0,..,5 \text{ за бързата група;}$$

$$q_k=\Sigma'_s\,F_{1,k},\ k=0,..,5 \text{ за топлинната група,}$$

където $F_k=\iint\limits_{F'_{hex}}p_k\left(x',y'\right)\Phi\left(x',y'\right)dx'dy',\ k=0,..,5$.

Получаването на коефициентите $\{F_k\}$ в разложението на потока по полиноми е описано в края на Приложението (раздел IV.7).

Тъй като експоненциалните членове са решение на хомогенната част на дифузионното уравнение, то за полиномната компонента (на основата на (I.1.2) и (I.1.3)) ще бъде изпълнено:

$$-D'\sum_{i=0}^{5}c_i\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)p_i\left(x',y'\right)+\Sigma'\sum_{i=0}^{5}c_i p_i\left(x',y'\right)=\sum_{i=0}^{5}q_i p_i\left(x',y'\right).$$

Поради ортогоналността на полиномите също така ще бъдат в сила и следните равенства:

$$\iint\limits_{F'_{hex}} p_k\left(x',y'\right)\begin{bmatrix} -D'\sum_{i=0}^{5} c_i\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x'^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)p_i\left(x',y'\right)+ \\ +\Sigma'\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right)-\sum_{i=0}^{5} q_i p_i\left(x',y'\right)\end{bmatrix}dx'dy' \tag{I.1.14}$$

$$=-D'\sum_{i=0}^{5} c_i\iint\limits_{F'_{hex}} p_k\left(x',y'\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)p_i\left(x',y'\right)dx'dy'+\Sigma' c_k-q_k=0,\ k=0,..,5$$

Понеже полиномите са от степен до втора включително, лапласианът на даден полином ще бъде или нула, или константа. От (I.1.13) може да се види, че единственият полином, чийто лапласиан не е нулев, е $p_3(x',y')$. Това, от своя страна, ще има значение само за случая k=0, защото само тогава интегралът в последния ред на (I.1.14) ще бъде ненулев – при i=3. Така от (I.1.14) следва:

$$c_k=\frac{q_k}{\Sigma'},k=1,...,5\,;$$

докато за k=0 ще бъде изпълнено:

$$-D'\sum_{i=0}^{5} c_i\iint\limits_{F'_{hex}} dx'dy'\,p_0\left(x',y'\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)p_i\left(x',y'\right)$$

$$=-\frac{D'}{N_0N_3}c_3\iint\limits_{F'_{hex}} dx'dy'\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)\left(x'^2+y'^2-\frac{5}{9}\right)$$

$$=-\frac{D'}{N_0N_3}c_3\iint\limits_{F'_{hex}} dx'dy'\left(2+2\right)=-c_3\frac{4D'}{N_0N_3}N_0^2=-c_3 4D'\frac{N_0}{N_3}$$

и за c_0 се получава:

$$c_0=\frac{q_0}{\Sigma'}+4\frac{N_0}{N_3}\frac{1}{B'^2}c_3=\frac{q_0}{\Sigma'}+36\sqrt{\frac{5}{43}}\frac{1}{B'^2}c_3\,.$$

I.2. Едномерна стационарна задача в аксиално направление

Едномерната стационарна дифузионна задача има следния вид:

$$-D\frac{d^2}{dz^2}\Phi(z)+\Sigma_r\Phi(z)=Q(z)\ \text{ или}$$

$$-\frac{d^2}{dz^2}\Phi(z)+\kappa^2\Phi(z)=\frac{Q(z)}{D}, \tag{I.2.1}$$

където:

$$\kappa^2=\frac{\Sigma_r}{D}.$$

Източникът $Q(z)$ в бързата група е от делене, а в топлинната – от разсейване от бързата група. Поради напречното интегриране той включва с обратен знак радиалната утечка.

Нека търсеното общо решение на (I.2.1) бъде във вида:

$$\Phi(z)=a_1\exp(\kappa z)+a_2\exp(-\kappa z)+P(z), \tag{I.2.2}$$

където експоненциалните членове са решение на хомогенната част на (I.2.1), а $P(z)$ е частно решение, което зависи от $Q(z)$.

I.2.1. ACMFD схема за аксиалната задача

Аналогично на двумерното разглеждане, тук накратко ще бъде описана ACMFD формулировката за едномерната дифузионна задача в аксиално направление. Нека долната и горната граници на задачата бъдат съответно z_d и z_u. Коефициентите пред експонентите в общото решение могат да бъдат изразени чрез граничните токове както следва.

$$J_u = -D\frac{d\Phi}{dz}\left(z_u\right) = -D\left[a_1\kappa\exp\left(\kappa z_u\right) - a_2\kappa\exp\left(-\kappa z_u\right) + P'\left(z_u\right)\right]$$

$$J_d = -D\frac{d\Phi}{dx}\left(z_d\right) = -D\left[a_1\kappa\exp\left(\kappa z_d\right) - a_2\kappa\exp\left(-\kappa z_d\right) + P'\left(z_d\right)\right]$$

Нека:

$$e_{u,d}^{\pm} = \exp\left(\pm\kappa z_{u,d}\right);$$

$$d_{u,d} = -\frac{1}{\kappa}\left(\frac{J_{u,d}}{D} + P'(z_{u,d})\right).$$

Така за a_1 и a_2 се получава системата:

$$\begin{aligned} a_1e_u^+ - a_2e_u^- &= d_u \\ a_1e_d^+ - a_2e_d^- &= d_d \end{aligned},$$

чието решение е следното:

$$a_1 = \frac{d_de_u^- - d_ue_d^-}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}\ ;\ a_2 = \frac{d_de_u^+ - d_ue_d^+}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}\ . \qquad \text{(I.2.3)}$$

На основата на изразите от (I.2.3) средният поток в нода може да бъде изразен чрез граничните токове. Тук отново напомняме, че тази връзка е основна за целите на ACMFD подхода. Последователно се получава:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi} &= \frac{1}{H}\int_{z_d}^{z_u}\left(a_1\exp(\kappa z) + a_2\exp(-\kappa z) + P(z)\right)dz \\ &= \bar{P} + \frac{1}{\kappa\left(z_u - z_d\right)}\frac{1}{\left(e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+\right)}\begin{bmatrix}\left(d_de_u^- - d_ue_d^-\right)\left(e_u^+ - e_d^+\right) - \\ -\left(d_de_u^+ - d_ue_d^+\right)\left(e_u^- - e_d^-\right)\end{bmatrix} \\ &= \bar{P} + \frac{d_u - d_d}{\kappa\left(z_u - z_d\right)} \end{aligned}$$

или още:

$$\kappa\left(z_u - z_d\right)\left(\bar{\Phi} - \bar{P}\right) = d_u - d_d$$

$$d_u = d_d + \kappa\left(z_u - z_d\right)\left(\bar{\Phi} - \bar{P}\right)$$

$$d_d = d_u - \kappa\left(z_u - z_d\right)\left(\bar{\Phi} - \bar{P}\right)$$

Последните изрази се използват за изразяване на граничните потоци чрез средния поток и граничните токове. Явни изрази за граничните потоци са необходими за прилагането на вътрешните гранични условия по-нататък. Изводът за потоците на долната и горната граници се намира в Приложението (раздел IV.1), като крайният резултат е следният:

$$\begin{aligned}\Phi_d &= C^J \frac{J_d\left(z_u - z_d\right)}{2D} + C^{\Phi}\bar{\Phi} - T^d \\ \Phi_u &= -C^J \frac{J_u\left(z_u - z_d\right)}{2D} + C^{\Phi}\bar{\Phi} - T^u\end{aligned}, \qquad \text{(I.2.4)}$$

където:

$$C^J = \frac{2}{\kappa\left(z_u - z_d\right)} \tanh\left(\frac{\kappa\left(z_u - z_d\right)}{2}\right)$$

$$C^{\Phi} = \frac{\kappa\left(z_u - z_d\right)}{\sinh\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right)}$$

$$T^d = C^{\Phi}\bar{P} - P_d - \frac{1}{2} C^J \left(z_u - z_d\right) P_d{}'$$

$$T^u = C^{\Phi}\bar{P} - P_u + \frac{1}{2} C^J \left(z_u - z_d\right) P_u{}'$$

Аналогичен запис на (I.2.4) може да се намери в [Петков, 2013; Chao, 1999; Kolev and Christoskov, 2018].

На всяка вътрешна за задачата гранична повърхност трябва да бъдат изпълнени условията за непрекъснатост на скаларния поток и на нетния ток:

$$\begin{aligned}\Phi_u^n &= \Phi_d^{n+1} \\ J_u^n &= J_d^{n+1} = J_n^{n+1}\end{aligned}, \qquad \text{(I.2.5)}$$

където n и n+1 са два съседни нода. От (I.2.4) и (I.2.5) следва:

$$-C_n^J \frac{J_u^n H_n}{2D_n} + C_n^{\Phi}\bar{\Phi}_n - T_n^u = C_{n+1}^J \frac{J_d^{n+1} H_{n+1}}{2D_{n+1}} + C_{n+1}^{\Phi}\bar{\Phi}_{n+1} - T_{n+1}^d,$$

откъдето се получава окончателният израз за тока на границата на два нода, изразен чрез средните за тези нодове скаларни потоци:

$$J_n^{n+1} = -\left[\left(2\frac{C_{n+1}^{\Phi} - \dfrac{T_{n+1}^d}{\bar{\Phi}_{n+1}}}{C_n^J \dfrac{H_n}{D_n} + C_{n+1}^J \dfrac{H_{n+1}}{D_{n+1}}}\right)\bar{\Phi}_{n+1} - \left(2\frac{C_n^{\Phi} - \dfrac{T_n^u}{\bar{\Phi}_n}}{C_n^J \dfrac{H_n}{D_n} + C_{n+1}^J \dfrac{H_{n+1}}{D_{n+1}}}\right)\bar{\Phi}_n\right].$$

Така *свързващите коефициенти* за аксиалната задача са:

$$D_{n+1}^d = \left(2\frac{C_{n+1}^{\Phi} - \dfrac{T_{n+1}^d}{\bar{\Phi}_{n+1}}}{C_n^J \dfrac{H_n}{D_n} + C_{n+1}^J \dfrac{H_{n+1}}{D_{n+1}}}\right) \text{ и } D_n^u = \left(2\frac{C_n^{\Phi} - \dfrac{T_n^u}{\bar{\Phi}_n}}{C_n^J \dfrac{H_n}{D_n} + C_{n+1}^J \dfrac{H_{n+1}}{D_{n+1}}}\right),$$

което води до следния съкратен запис:

$$J_n^{n+1} = -\left[D_{n+1}^d \bar{\Phi}_{n+1} - D_n^u \bar{\Phi}_n\right]. \qquad \text{(I.2.6)}$$

За външна граница на задачата с условия от логаритмичен тип следва:

$$\frac{1}{\Phi(z)}\frac{d}{dz}\Phi(z)\bigg|_{z_s} = -\alpha\frac{1}{D}, \tag{I.2.7}$$

където оста z е насочена по външната нормала на нода. С отчитане на закона на Фик от (I.2.4) и (I.2.7) за тока на горната граница се получава:

$$J_u = \alpha\Phi_u = \alpha\left(-C^J\frac{J_u H}{2D} + C^\Phi\bar{\Phi} - T^u\right)$$

$$J_u = \alpha\frac{C^\Phi - \dfrac{T^u}{\bar{\Phi}}}{1+\alpha C^J\dfrac{H}{2D}}\bar{\Phi} = D_u\bar{\Phi}$$

Аналогично за тока на долната граница ще имаме:

$$J_d = -\alpha\Phi_d = -\alpha\left(C^J\frac{J_d H}{2D} + C^\Phi\bar{\Phi} - T^d\right)$$

$$J_d = -\alpha\frac{C^\Phi - \dfrac{T^d}{\bar{\Phi}}}{1+\alpha C^J\dfrac{H}{2D}}\bar{\Phi} = -D_d\bar{\Phi}$$

I.2.2. Полиномна компонента

Частното решение на (I.2.1) може да бъде изградено на основата на базис от ортогонални спрямо интегриране в аксиалните граници на нода полиноми, като за целите на настоящото разглеждане максималната степен ще бъде втора. Това е и най-ниската степен, при която приносът на полиномната компонента в утечката е ненулев. И така:

$$P(z) = \sum_{i=0}^{2} c_i p_i(z),$$

където,

$$\int_{z_d}^{z_u} p_i(z)p_j(z)dz = \delta_{ij}.$$

Построяването на ортогоналните полиноми е описано в Приложението (раздел IV.3), а полиномите са както следва:

$$p_0(z) = \frac{1}{\sqrt{H_n}};$$

$$p_1(z) = \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{H_n}}\frac{z}{H_n};$$

$$p_2(z) = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\left(\frac{1}{2} - 6\frac{z^2}{H_n^2}\right).$$

Оттук можем да пресметнем нужните величини за $T^{d,u}$ (участващи в изразите (I.2.6)):

$$\bar{P} = \frac{1}{H_n}\frac{1}{\sqrt{H_n}}\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}}\left(c_0 + 2\sqrt{3}c_1\frac{z}{H_n} + \sqrt{5}c_2\left(\frac{1}{2} - 6\frac{z^2}{H_n^2}\right)\right)dz$$

$$= \frac{1}{H_n}\frac{1}{\sqrt{H_n}}\left(\left(c_0 + \frac{\sqrt{5}}{2}c_2\right)H_n - \frac{\sqrt{5}}{2}c_2 H_n\right) = \frac{c_0}{\sqrt{H_n}}$$

$$P_d = \frac{1}{\sqrt{H_n}}\left[c_0 - \sqrt{3}c_1 - \sqrt{5}c_2\right]$$

$$P_u = \frac{1}{\sqrt{H_n}}\left(c_0 + \sqrt{3}c_1 - \sqrt{5}c_2\right)$$

$$P_d' = \frac{2}{H_n}\frac{1}{\sqrt{H_n}}\left(\sqrt{3}c_1 + 3\sqrt{5}c_2\right)$$

$$P_u' = \frac{2}{H_n}\frac{1}{\sqrt{H_n}}\left(\sqrt{3}c_1 - 3\sqrt{5}c_2\right)$$

Коефициентите пред полиномите в модела на потока се намират от източника в уравнение (I.2.1), за който се предполага, че може да бъде представен чрез вече конструираните базисни полиноми:

$$Q(z) \approx \sum_{i=0}^{2} q_i p_i(z) .$$

Тъй като експонентите в модела на потока са решение на хомогенната част, то за полиномната компонента се получава следното уравнение:

$$-D\sum_{i=0}^{2} c_i \frac{d}{dz^2} p_i(z) + \Sigma_r \sum_{i=0}^{2} c_i p_i(z) = \sum_{i=0}^{2} q_i p_i(z) .$$

Аналогично на двумерния случай, поради ортогоналността на полиномите, коефициентите $\{c_i\}$ могат да бъдат намерени по метода на претеглените остатъци, а именно:

$$\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_k(z)\left[-D\sum_{i=0}^{2} c_i \frac{d^2}{dz^2} p_i(z) + \Sigma_r \sum_{i=0}^{2} c_i p_i(z) - \sum_{i=0}^{2} q_i p_i(z)\right]dz$$

$$= -D\sum_{i=0}^{2} c_i \int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_k(z)\frac{d^2}{dz^2} p_i(z)dz + \Sigma_r c_k - q_k = 0$$

Максималната степен на полиномите е втора, което означава, че втората производна по z в последния запис ще бъде нула или константа. Оттук следва:

за $k = 1,2$:

$$\Sigma_r c_k - q_k = 0 ;$$

$$c_k = \frac{q_k}{\Sigma_r} ;$$

за $k = 0$:

$$-D\sum_{i=0}^{2} c_i \int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_0(z)\frac{d}{dz^2}\,p_i(z)dz$$

$$=-Dc_2\frac{1}{\sqrt{H_n}}\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}}\frac{d}{dz^2}\left(\frac{1}{2}-6\frac{z^2}{H_n^2}\right)dz$$

$$=\frac{12\sqrt{5}D}{H_n^2}c_2$$

Откъдето:

$$\frac{12\sqrt{5}D}{H_n^2}c_2+\Sigma_r c_0-q_0=0\,;$$

$$c_0=\frac{q_0}{\Sigma_r}-12\sqrt{5}\,\frac{1}{H_n^2\kappa^2}c_2\,.$$

Коефициентите в разложението на източника също подлежат на определяне. Тъй като източникът в (I.2.1) се изгражда на основата на потока:

$Q_1(z)=\dfrac{1}{k_{eff}}\displaystyle\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{\nu,g}\Phi_g(z)$, за бързата група;

$Q_2(z)=\Sigma_s\Phi_1(z)$, за топлинната група,

следва:

$q_i^f=\dfrac{1}{k_{eff}}\displaystyle\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{\nu,g}f_i^g$, за коефициентите на източника в бързата група;

$q_i^t=\Sigma_s f_i^f$, за коефициентите на източника в топлинната група.

Коефициентите $\{f_i\}$ в разложението на потока се получават както следва:

$$\Phi(z)=\sum_{i=0}^{2} f_i p_i(z)\,;$$

$f_k=\displaystyle\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_k(z)\Phi(z)dz$, поради ортогоналността на полиномите,

откъдето след пресмятане на интегралите се получава:

$$f_0=\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_0(z)\Phi(z)dz=\sqrt{H_n}\bar{\Phi}_n$$

$$f_1=-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{H_n}}\frac{1}{H_n}\frac{1}{\kappa^2}\left(\frac{J_r+J_l}{D}+P_r'+P_l'\right)\left[H_n-\frac{2}{\kappa}\tanh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right]+c_1\,;$$

$$f_2=\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\frac{1}{2\kappa^2}\left(\frac{J_r-J_l}{D}+P_r'-P_l'\right)\left\{2\left[1+\frac{12}{\kappa^2H_n^2}\right]-\frac{12}{\kappa H_n}\coth\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right\}+c_2\,.$$

Изводът на изразите за f_1 и f_2 може да бъде намерен в Приложението (раздел IV.7).

I.3. Напречна утечка

Напречното интегриране е техника, която се използва при редица съвременни нодални методи [Lawrence, 1986]. Математическата процедура има смисъл на осредняване и разделя тримерната задача на едномерна аксиална и двумерна в равнината (*x*,*y*).

Ако на тримерното дифузионно уравнение (I.1) бъде подействано с оператора $\frac{1}{F}\iint\limits_F dxdy$, където F е напречното сечение на нода, то за всяка група се получава уравнение от вида:

$$-D_g \frac{d^2}{dz^2}\Phi_g(z) + \Sigma_g \Phi_g(z) = Q_g(z), \tag{I.3.1}$$

където нодалният индекс е изпуснат, Σ_g е сечението за извеждане на неутрони от съответната група, а $\Phi_g(z)$ е осредненият по *x* и *y* поток. Дясната част, която съдържа в себе си източника на неутрони, има следните основни компоненти:

$Q_g(z) = S_g(z) - L_g(z)$, където:

$$S_1(z) = \frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{\nu,g}\frac{1}{F}\iint\limits_F \Phi_g(\mathbf{r})dxdy = \frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{\nu,g}\Phi_g(z);$$

$$S_2(z) = \Sigma_s \frac{1}{F}\iint\limits_F \Phi_1(\mathbf{r})dxdy = \Sigma_s \Phi_1(z);$$

$$L_g(z) = -\frac{D_g}{F}\iint\limits_F \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g(\mathbf{r})dxdy .$$

Аналогично, ако подействаме на (I.1) с оператора $\frac{1}{H}\int\limits_H dz$, където H е височината на нода, се получава една чисто двумерна задача:

$$-D_g\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g(x,y) + \Sigma_g \Phi_g(x,y) = Q_g(x,y); \tag{I.3.2}$$

$$Q_g(x,y) = S_g(x,y) - L_g(x,y);$$

$$L_g(x,y) = -\frac{D_g}{H}\int\limits_H \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_g(\mathbf{r})dz .$$

Разделянето на тримерни задачи чрез напречно интегриране на две по-малки задачи – едномерна в аксиално направление (*Oz*) и двумерна в напречната равнина (*x*,*y*) – опростява технически решаваната пълна тримерна задача. От особено значение обаче се оказва точното апроксимиране на напречната утечка L_g. Процедурата за обновяване и оценка на утечката в хода на итерациите може силно да влияе както върху точността на решението, така и върху числената устойчивост на избрания алгоритъм.

В настоящата работа апроксимирането на утечката е както при съществуващите реализации на HEXNEM [Grundmann et al., 2005; Christoskov and Petkov, 2013] и е описано по-долу.

I.3.1. Напречна утечка за двумерната задача

При изпуснат групов индекс g, напречната (аксиална) утечка за двумерната задача (I.1.1) е:

$$L(x',y') = J_u(x',y') + J_d(x',y'),$$

където $J_{d,u}(x,y)$ са проекциите на нетния ток по външните нормали на долната и съответно горната стени на нода.

За възстановяване на координатната зависимост $L(x',y')$ е необходима подходяща апроксимация. Нейният вид задължително трябва да бъде съгласуван с представянето на източника $Q_g(x',y')$ в (I.1.2) чрез набора от базисни полиноми $p_i(x',y'), i = 0,...,5$. В този смисъл естествен избор би бил следният:

$$L(x',y') \approx \sum_{i=0}^{5} l_i p_i(x',y') \qquad \text{(I.3.3)}$$

Процедурата за намиране на коефициентите $l_i, i = 0,...,5$ е както следва. Първо, нека заедно със средната за площта на нода стойност L_0 на аксиалната утечка бъдат известни и средните стойности на $L(x',y')$ по околните стени на нода:

$$L_k = \frac{1}{L'^s_k} \iint_{L'^s_k} L(x',y')dx'dy', k = 1,...,6 \qquad \text{(I.3.4)}$$

Тогава, след заместване на (I.3.3) в (I.3.4), се получава:

$$\begin{aligned} L_k &= \frac{1}{L'^s_k} \iint_{L'^s_k} L(x',y')dx'dy' \\ &\approx \frac{1}{L'^s_k} \iint_{L'^s_k} \sum_{i=0}^{5} l_i p_i(x',y')dx'dy' \\ &= \sum_{i=0}^{5} l_i \frac{1}{L'^s_k} \iint_{L^s_k} p_i(x',y')dx'dy' \\ &= \sum_{i=0}^{5} l_i p_{i,k}, k = 1,...,6 \end{aligned} , \qquad \text{(I.3.5а)}$$

Аналогично:

$$\begin{aligned} L_0 &= \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} L(x',y')dx'dy' \\ &\approx \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} \sum_{i=0}^{5} l_i p_i(x',y')dx'dy' \\ &= \sum_{i=0}^{5} l_i \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} p_i(x',y')dx'dy' \\ &= \sum_{i=0}^{5} l_i p_{i,0} \end{aligned} \qquad \text{(I.3.5б)}$$

където $p_{i,k} = \frac{1}{L'^s_k} \iint\limits_{L^s_k} p_i(x', y')dx'dy'$ е средната стойност на $p_i(x', y')$ по k-тата околна стена на двумерния нод, а $p_{i,0} = \frac{1}{F'_{hex}} \iint\limits_{F'_{hex}} p_i(x', y')dx'dy'$ е осреднената стойност на $p_i(x', y')$ по неговата площ.

Така изразите (I.3.5) могат да бъдат разглеждани като уравнения за коефициентите $l_i, i = 0,...,5$. Тъй като системата е преопределена, тези уравнения няма как да се удовлетворят строго. Възможен изход от това затруднение би било удовлетворяването им в смисъла на най-малките квадрати:

$$\sum_{k=0}^{6} \left[\sum_{i=0}^{5} p_{i,k} l_i - L_k \right]^2 \to \min$$

Решението на задачата е поместено в Приложението (раздел IV.4), а окончателният резултат е следният:

$$l_0 = N_0 L_0$$

$$l_1 = \frac{N_1}{6}\left(2L_1 + L_2 - L_3 - 2L_4 - L_5 + L_6\right)$$

$$l_2 = \frac{N_2}{2\sqrt{3}}\left(L_2 + L_3 - L_5 - L_6\right)$$

$$l_3 = \frac{3N_3}{10}\left(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6 - 6L_0\right)$$

$$l_4 = \frac{3N_4}{16}\left(2L_1 - L_2 - L_3 + 2L_4 - L_5 - L_6\right)$$

$$l_5 = \frac{3\sqrt{3}N_5}{8}\left(L_2 - L_3 + L_5 - L_6\right)$$

Остава да се реши въпросът с оценяването на средните по околните стени на нода стойности на аксиалната утечка, $L_k, k = 1,...,6$, които досега бяха считани за известни. За следващите изрази е въведен нодалният индекс n. Последователно се получава:

$$
\begin{aligned}
L_k^n &= \iint\limits_{L'^s_k} L(x',y')dx'dy' \\
&= -D'^n \iint\limits_{L'^s_k} \left(\frac{\partial}{\partial z'} \Phi^n(x',y',z')\bigg|_{z'=\frac{1}{2}} - \frac{\partial}{\partial z} \Phi^n(x',y',z')\bigg|_{z'=-\frac{1}{2}} \right) dx'dy' \\
&= -\left[D'^n \frac{\partial}{\partial z'} \iint\limits_{L'^s_k} \Phi^n(x',y',z')dx'dy' \bigg|_{z'=\frac{1}{2}} - D'^n \frac{\partial}{\partial z'} \iint\limits_{L'^s_k} \Phi^n(x',y',z')dx'dy' \bigg|_{z'=-\frac{1}{2}} \right], \qquad \text{(I.3.6a)} \\
&= -D'^n \left[\frac{\partial \Phi_k^n(z')}{\partial z'} \left(z'=\frac{1}{2} \right) - \frac{\partial \Phi_k^n(z')}{\partial z'} \left(z'=-\frac{1}{2} \right) \right] \\
&= L_k^n\left(\frac{1}{2}\right) - L_k^n\left(-\frac{1}{2}\right) \\
&\quad (k=1,\dots,6)
\end{aligned}
$$

където:

$$
\Phi_k^n(z') = \iint\limits_{L_k^s} \Phi^n(x',y',z')dx'dy' \qquad \text{(I.3.6б)}
$$

е средният по хоризонтала поток на k-тата стена на нода, а

$$
L_k^n(z') = -D'^n \frac{\partial}{\partial z'} \iint\limits_{L'^s_k} \Phi^n(x',y',z')dx'dy' = -D'^n \frac{\partial \Phi_k^n(z')}{\partial z'}. \qquad \text{(I.3.6в)}
$$

Нека също така:

$$
J_k^n(z') = -D'^n \, \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla \iint\limits_{L'^s_k} \Phi^n(x',y',z')dx'dy' = -D'^n \, \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla \Phi_k^n(z') \qquad \text{(I.3.6г)}
$$

е средната външна нормална проекция на тока по k-тата стена на нода.

Нодалната схема изрично гарантира, чрез налагането на вътрешните гранични условия, спазване на физичното изискване за *непрекъснатост* на *аксиалната средна стойност* на $J_k^n(z')$. Съвсем естествено би било да се наложи условието за аналогична непрекъснатост и върху самата величина $J_k^n(z')$. Следвайки класическата диференчна схема, основаваща се на крайните разлики, последното условие може да се изрази по следния начин:

$$
\frac{1}{h} D^n \left(\Phi_k^n(z') - \Phi_0^n(z') \right) = \frac{1}{h} D^m \left(\Phi_0^m(z') - \Phi_k^n(z') \right), \qquad \text{(I.3.7)}
$$

където m е индексът за нода, който е съседен на n през k-тата му околна стена, а $\Phi_0^n(z')$ и $\Phi_0^m(z')$ са осреднените потоци по сечението на съответните нодове на височина z'.

Класическата диференчна схема се основава на предположението за съвпадение между средната и централната стойности на потока в равнината (x,y). Това предположение, разбира се, е само приблизително.

Изпълнението на (I.3.7) удовлетворява и условието за непрекъснатост на скаларния поток. То може да се разглежда като уравнение за неизвестната гранична стойност $\Phi_k^n(z')$, а решението е следното:

$$\Phi_k^n(z') = \frac{D^n \Phi_0^n(z') + D^m \Phi_0^m(z')}{D^n + D^m} \tag{I.3.8а}$$

Същата връзка ще бъде в сила и за аксиалната производна на тази гранична стойност, т.е.:

$$\frac{\partial}{\partial z'} \Phi_k^n(z') = \frac{D^n \frac{\partial}{\partial z'} \Phi_0^n(z') + D^m \frac{\partial}{\partial z'} \Phi_0^m(z')}{D^n + D^m} \tag{I.3.8б}$$

Оттук, според (I.3.6в) следва:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{D^n} L_k^n(z') = \frac{L_0^n(z') + L_0^m(z')}{D^n + D^m} \Rightarrow \\ &L_k^n(z') = \frac{D^n}{D^n + D^m}\left(L_0^n(z') + L_0^m(z')\right) \end{aligned} . \tag{I.3.9}$$

Така от (I.3.6а) окончателно се получава:

$$L_k^n = \frac{D^n}{D^n + D^m}\left(L_0^n + L_0^m\right),$$

а величините L_0^n и L_0^m са известни от решаването на аксиалната задача.

(Връзката $L_0^n(z') = D^n \frac{\partial}{\partial z'} \Phi_0^n(z')$, необходима за прехода от (I.3.8б) към (I.3.9) е естествено допълнение към (I.3.6).)

В случая на външна граница с условия от логаритмичен тип $(J = \alpha\Phi)$ по аналогичен на горе описания начин за L_k^n се получава:

$$L_k^n = \frac{D^n}{D^n + h\alpha} L_0^n$$

I.3.2. Напречна утечка за едномерната задача

При изпуснат групов индекс g, напречната (радиална) утечка за едномерното дифузионно уравнение (I.2.1) е:

$$L(z') = \sum_{k=1}^{6} J_k(z'),$$

където $J_k(z)$ е средната по *k*-тата странична стена на нода външна нормална проекция на нетния ток. Тук, за удобство и аналогия с предходния подраздел, ще се работи с нормираната променлива $z' = z/H_z$.

Както в предходния случай, така и тук за възстановяването на координатната зависимост $L(z')$ е необходима подходяща апроксимация. Нейният вид трябва да бъде съгласуван с предположението за разложимост на източника $Q_g(z)$ в (I.2.1) по базиса от ортогонални полиноми $p_i(z'), i = 0,...,2$. Това води до следния избор:

$$L(z') \approx \sum_{i=0}^{2} l_i p_i(z') \tag{I.3.10}$$

Процедурата за намиране на коефициентите $l_i, i = 0,...,2$ е аналогична на тази от раздел I.3.1. Първо, нека заедно с аксиално средната стойност на радиалната утечка L_0 бъдат известни и нейните стойности на долната и горната граници на нода:

$$L_{B,T} = L\left(\mp\frac{1}{2}\right) \tag{I.3.11}$$

Тогава, след заместване на (I.3.10) в (I.3.11), се получава:

$$L_{B,T} = L\left(\mp\frac{1}{2}\right) \approx \sum_{i=0}^{2} l_i p_i\left(\mp\frac{1}{2}\right), \tag{I.3.12а}$$

Аналогично, за аксиално средната радиална утечка:

$$L_0 = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} L'(z')dz' \approx \sum_{i=0}^{2} l_i \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} p_i(z') \tag{I.3.12б}$$

Изразите (I.3.12) са уравнения за коефициентите $l_i, i = 0,...,2$.

Чрез пряко заместване на полиномите за аксиалната задача в (I.3.12) се установява:

$$\sum_{i=0}^{2} l_i \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} p_i(z') = L_0 \Rightarrow l_0 = L_0$$

$$\sum_{i=0}^{2} l_i p_i\left(-\frac{1}{2}\right) = L_B \Rightarrow L_0 - \sqrt{3}l_1 - \sqrt{5}l_2 = L_B$$

$$\sum_{i=0}^{2} l_i p_i\left(\frac{1}{2}\right) = L_T \Rightarrow L_0 + \sqrt{3}l_1 - \sqrt{5}l_2 = L_T$$

Решението на получената система е:

$$l_1 = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(L_T - L_B\right)$$

$$l_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(L_0 - \frac{1}{2}\left(L_T + L_B\right)\right)$$

И накрая, аналогично на разглежданията в предходния раздел, но за неравномерно аксиално разбиване, за $L_{B,T}$ се получава:

$$L_{B,T} = \frac{D^n}{H_z^m D^n + H_z^n D^m}\left(H_z^m L_0^n + H_z^n L_0^m\right), \tag{I.3.13а}$$

където *m* е индексът на долния/горния съсед на нода *n*.

В случая на външна граница с условия от логаритмичен тип $\left(J = \alpha\Phi\right)$ за $L_{B,T}$ се получава:

$$L_{B,T} = \frac{D^n}{D^n + 0.5H_z^n\alpha} L_0^n \tag{I.3.13б}$$

I.4. Балансни уравнения

Едно от удобствата, които предлага ACMFD схемата, е съставянето на явна линейна алгебрична система от балансни уравнения относно средните нодални скаларни неутронни потоци.

Интегралът:

$$\frac{1}{V_{node}}\iiint\limits_{V_{node}}\left(\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r})+\Sigma_r\Phi(\mathbf{r})\right)dxdydz=\frac{1}{V_{node}}\iiint\limits_{V_{node}}Q(\mathbf{r})dxdydz \qquad \text{(I.4.1а)}$$

води до балансното уравнение:

$$\frac{1}{V_{node}}\left(\sum_{k=1}^{6}H_{node}L_k^sJ_k^s+\sum_{k=7}^{8}F_{hex}J_k^s\right)+\Sigma_r\bar{\Phi}=\bar{Q}, \qquad \text{(I.4.1б)}$$

където е използвана теоремата за дивергенцията, а стените с индекси 7 и 8 са съответно долната и горната основи на нода.

В уравненията (I.4.1) средните за нодалните стени външни проекции на нетните токове $\left\{J_k^s\right\}$ се заменят с ACMFD изразите (I.1.9б) и (I.2.6), които дават връзка със средните нодални скаларни потоци за два съседни нода.

Важен детайл е, че чрез величините $T^{s/w}$, които зависят от токовете, техните моменти и напречната утечка, *свързващите коефициенти* също на практика зависят от решението на задачата. Това предполага тяхното итеративно обновяване. Нужният за тази цел изчислителен разход не е особено голям, а и обновяването не е задължително да се прави на всяка итерация по източника.

I.5. Алгоритъм

Въз основа на описаното в предходните няколко раздела може да се построи следният алгоритъм за решаване на тримерната стационарна дифузионна задача.

В самото начало средните токове и тангенциалните моменти на токовете по стените на нодовете се приемат за нулеви. Пространственото разпределение на средните потоци по нодове се приема за *плоско*, а коефициентите в разложението на потока по полиноми са нулеви с изключение на коефициента пред полинома от нулева степен, който има пряка връзка със средния поток. Построява се източникът от делене, след което (в най-общия си вид) итеративната процедура е както следва:

Начало на външната итерация (по източника);

Начало на обхождането по групи;

Пресмятане на свързващите коефициенти;

Съставяне на матрицата на задачата;

Начало на вътрешните итерации;

В програмната реализация (за целите на настоящата дисертация) вътрешните итерации се основават на метода BiCGSTAB [Van der Vorst, 1992], *като, разбира се, могат да бъдат използвани и други итеративни методи;*

Край на вътрешните итерации;

Обновяване на средните токове и техните тангенциални моменти на базата на новите средни потоци и старите свързващи коефициенти;

Обновяване на напречните утечки;

Обновяване на разложението на потока по ортогонални полиноми;

Формиране на източника за следващата група;

Край на итерациите по групи

Обновяване на ефективния коефициент на размножение и на източника от делене;

Край на външната итерация.

Вътрешните итерации се прекратяват при постигане на сходимост на средните потоци. Външните итерации се прекратяват след постигане на сходимост по k_{eff} и източника от делене. Обновяването на k_{eff} се извършва на основата на следния израз:

$$k_{eff}^{(j)} = \frac{\sum_n V_n \left[\left(\sum_{g=1}^{2} \Sigma_{\nu,g}^{n} \bar{\Phi}_{g,n}^{(j)} \right) \right]^2}{\sum_n V_n \left[\left(\sum_{g=1}^{2} \Sigma_{\nu,g}^{n} \bar{\Phi}_{g,n}^{(j)} \right) \right] \left[\left(\sum_{g=1}^{2} \Sigma_{\nu,g}^{n} \bar{\Phi}_{g,n}^{(j-1)} \right) \right]}$$

Индексът *j* отговаря на текущата оценка на съответната величина.

II. Нестационарна двугрупова дифузионна задача

С отчитане на източника от закъсняващи неутрони, един общ запис на нестационарната двугрупова задача може да бъде следният [Azmy and Sartori, 2010]:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\mathrm{v}_1}\frac{\partial \Phi_1^n(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{J}_1^n(\mathbf{r},t)+\Sigma_r^n(t)\Phi_1^n(\mathbf{r},t)\\
&=\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\left(1-\beta_g^n(t)\right)\Sigma_{\nu,g}^n(t)\Phi_g^n(\mathbf{r},t)+\sum_{j=1}^{M}\lambda_j^n C_j^n(\mathbf{r},t)\\
&\frac{1}{\mathrm{v}_2}\frac{\partial \Phi_2^n(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{J}_2^n(\mathbf{r},t)+\Sigma_a^n(t)\Phi_2^n(\mathbf{r},t)=\Sigma_s^n(t)\Phi_1^n(\mathbf{r},t)\\
&\frac{\partial C_j^n(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\beta_{g,j}^n(t)\Sigma_{\nu,g}^n(t)\Phi_g^n(\mathbf{r},t)-\lambda_j^n C_j^n(\mathbf{r},t);\ j=1,\dots,M
\end{aligned}\tag{II.1}$$

Тук v_1 и v_2 са скоростите на неутроните съответно в бързата и в топлинната групи. $\left\{C_j^n\right\}$ са концентрациите на ядрата-предшественици на закъсняващи неутрони в нод *n*, $\left\{\lambda_j^n\right\}$ са константите на разпадане на тези ядра, а $\left\{\beta_{g,j}^n\right\}$ са относителните дялове на закъсняващите неутрони в процеса на генериране на нови неутрони от делене. Индексът j е за съответната група закъсняващи неутрони, а $\sum_{j=1}^{M}\beta_{g,j}^n=\beta_g^n$. Всички останали означения са като тези при стационарната двугрупова задача.

Производната на неутронния поток по времето в нестационарното дифузионно уравнение по принцип може да бъде представена чрез *предна разлика*. Това води до т.нар. *явна схема*, чието важно потенциално предимство е разделянето на системата от уравнения за зависимите променливи в края на стъпката по време. За параболични частни диференциални уравнения явната схема обаче налага твърде строги ограничения върху стъпката на интегриране по време и е практически неприложима за решаваната реакторна задача. Ако производната по времето се оцени чрез *задна разлика* се получава *неявната схема*, при която уравненията за зависимите променливи в края на стъпката са свързани. Неявната схема е безусловно стабилна при големи стъпки, но с общо присъщия за крайните разлики риск от неприемливо влошаване на точността с увеличаване на стъпката до практически целесъобразен мащаб. Без загуба на стабилност точността може да се повиши чрез т.нар. θ-претеглена схема, която е линейна комбинация между явната и неявната схеми. Нейното прилагане обаче усложнява реализацията, без да позволи достатъчно за практически цели подобряване на точността спрямо чисто неявната схема.

II.1. Третиране на производната по време

В настоящата работа е използвана неявна схема в комбинация със специално представяне на зависимостта на потока от времето (II.1.1), какъвто е подходът и в DYN3D например [Grundmann et al., 2005]. Техниката, позната като Stiffness Confinement Method [Sutton and Aviles, 1996], цели да се подобри точността при относително големи стъпки по време. В рамките на $t \in [t_k, t_{k+1}]$ неутронният поток се представя във вида:

$$\Phi_g^n(\mathbf{r},t) = \exp\left(\omega^n (t - t_k)\right) \tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t). \qquad \text{(II.1.1)}$$

С отчитане на природата на параболичните частни диференциални уравнения, зависимостта на потока от времето в (II.1) действително ще бъде приблизително експоненциална. Така при правилно подбрани параметри $\{\omega^n\}$ функцията $\tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t)$ ще се изменя слабо с времето, което позволява сравнително големи стъпки, без това да води до съществена загуба на точност. Диференцирането на (II.1.1) по времето дава следния израз:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi_g^n(\mathbf{r},t_{k+1}) = \omega^n \Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r}) + \exp(\omega^n \Delta_k)\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}_g^{n,k+1}(\mathbf{r}),$$

където индексът k привързва съответната величина към момента t_k, а $\Delta_k = t_{k+1} - t_k$. Оценяването на производната по времето на $\tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t)$ чрез задна разлика води до следната неявна диференчна схема:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\Phi_g^n(\mathbf{r},t_{k+1}) &\approx \omega^n \Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r}) + \exp(\omega^n \Delta_k)\frac{\tilde{\Phi}_g^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \tilde{\Phi}_g^{n,k}(\mathbf{r})}{\Delta_k} \\
&= \omega^n \Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r}) + \exp(\omega^n \Delta_k)\frac{\Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r})\exp(-\omega^n \Delta_k) - \Phi_g^{n,k}(\mathbf{r})}{\Delta_k}, \\
&= \frac{1}{\Delta_k}\left[\left(1 + \omega^n \Delta_k\right)\Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \Phi_g^{n,k}(\mathbf{r})\exp(\omega^n \Delta_k)\right]
\end{aligned}$$

където е използван изразът (II.1.1). Оценяването на $\{\omega^n\}$ може да стане отново на основата на (II.1.1):

$$\omega^n = \frac{1}{\Delta_k}\ln\left(\frac{\sum_{g=1}^{2}\bar{\Phi}_g^{n,k+1}}{\sum_{g=1}^{2}\bar{\Phi}_g^{n,k}}\right). \qquad \text{(II.1.2)}$$

Нищо не пречи $\{\omega^n\}$ да се преоценяват итеративно, напр. заедно със свързващите коефициенти, като в (II.1.2) се използват последните получени числени оценки за $\{\bar{\Phi}_g^{n,k+1}\}$.

С използване на (II.1.1), интегрирането на уравненията за концентрациите на ядрата-предшественици на закъсняващи неутрони в (II.1) води до следния израз за концентрациите в края на дадена стъпка по време:

$$\begin{aligned}
C_j^{n,k+1}(\mathbf{r}) &= C_j^{n,k}(\mathbf{r})\exp\left(-\lambda_j^n \Delta_k\right) \\
&+ \exp\left(-\lambda_j^n t_{k+1}\right)\int_{t_k}^{t_{k+1}} dt\left[\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\beta_{g,j}^{n,k+1}\Sigma_{\nu,g}^{n,k+1}\tilde{\Phi}_g^n(\mathbf{r},t)\right]\exp\left(\lambda_j^n t + \omega^n (t - t_k)\right)
\end{aligned}$$

или

$$C_j^{n,k+1}(\mathbf{r}) \approx C_j^{n,k}(\mathbf{r})\exp\left(-\lambda_j^n\Delta_k\right) + \frac{1-\exp\left(-\left(\lambda_j^n+\omega^n\right)\Delta_k\right)}{\lambda_j^n+\omega^n}\left[\frac{1}{k_{eff}}\sum_{g=1}^{2}\beta_{g,j}^{n,k+1}\Sigma_{\nu,g}^{n,k+1}\Phi_g^{n,k+1}(\mathbf{r})\right] \tag{II.1.3}$$

Този израз се замества в уравнението за потока в (II.1) и води до описания в следващия раздел аналог на нехомогенната стационарна дифузионна задача.

II.2. Неявна схема

В настоящата работа сеченията в (II.1) се считат за постоянни в дадена стъпка по време, а техните стойности се отнасят за края на стъпката. Ако е необходимо, тяхното обновяване (преизчисляване) се прави преди следващата стъпка по време.

Изборът на напълно неявна диференчна схема в комбинация с представянето на зависимостта от времето във вида (II.1.1) и резултата от (II.1.3), след пряко заместване в (II.1) и опростяване, дава следните уравнения за двугруповата нестационарна дифузионна задача:

$$-D_1^{n,k+1}\nabla^2\Phi_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) + \left(\Sigma_r^{n,k+1} + \frac{1+\omega^n\Delta_k}{\mathrm{v}_1\Delta_k} - \gamma^{n,k}\Sigma_{\nu,1}^{n,k+1}\right)\Phi_1^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \gamma^{n,k}\Sigma_{\nu,2}^{n,k+1}\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{\exp\left(\omega^n\Delta_k\right)}{\mathrm{v}_1\Delta_k}\Phi_1^{n,k}(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^{M}\lambda_j^n C_j^{n,k}(\mathbf{r})\exp\left(-\lambda_j^n\Delta_k\right)$$

$$-D_2^{n,k+1}\nabla^2\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r}) - \Sigma_s^{n,k+1}\Phi_1^{n,k+1} + \left(\Sigma_a^{n,k+1} + \frac{1+\omega^n\Delta_k}{\mathrm{v}_2\Delta_k}\right)\Phi_2^{n,k+1}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{\exp\left(\omega^n\Delta_k\right)}{\mathrm{v}_2\Delta_k}\Phi_2^{n,k}(\mathbf{r})$$

където:

$$\gamma^{n,k} = \frac{1}{k_{eff}}\left(1-\sum_{j=1}^{M}\delta_j^{n,k}\beta_j\right),\ \delta_j^{n,k} = \frac{\omega^n + \lambda_j^n\exp\left(-\left(\lambda_j^n+\omega^n\right)\Delta_k\right)}{\lambda_j^n+\omega^n},\ \Delta_k = t_{k+1}-t_k\,.$$

За удобство нека бъдат въведени следните означения:

$$A_{1,1}^{n,k} = \frac{1}{D_1^{n,k+1}}\left(\Sigma_r^{n,k+1} + \frac{1+\omega^n\Delta_k}{\mathrm{v}_1\Delta_k} - \gamma^{n,k}\Sigma_{\nu,1}^{n,k+1}\right)$$

$$A_{1,2}^{n,k} = -\frac{1}{D_1^{n,k+1}}\gamma^{n,k}\Sigma_{\nu,2}^{n,k+1}$$

$$A_{2,1}^{n,k} = -\frac{1}{D_2^{n,k+1}}\Sigma_s^{n,k+1}$$

$$A_{2,2}^{n,k} = \frac{1}{D_2^{n,k+1}}\left(\Sigma_a^{n,k+1} + \frac{1+\omega^n\Delta_k}{\mathrm{v}_2\Delta_k}\right)$$

$$Q_1^{n,k} = -\frac{1}{D_1^{n,k+1}} \left[\frac{\exp\left(\omega^n \Delta_k\right)}{\mathrm{v}_1 \Delta_k} \Phi_1^{n,k}\left(\mathbf{r}\right) + \sum_{j=1}^{M} \lambda_j^n C_j^{n,k}\left(\mathbf{r}\right) \exp\left(-\lambda_j^n \Delta_k\right) \right]$$

$$Q_2^{n,k} = -\frac{1}{D_2^{n,k+1}} \frac{\exp\left(\omega^n \Delta_k\right)}{\mathrm{v}_2 \Delta_k} \Phi_2^{n,k}\left(\mathbf{r}\right)$$

Следователно:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Phi_1^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) - \left[A_{1,1}^{n,k} \Phi_1^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) + A_{1,2}^{n,k} \Phi_2^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) \right] = Q_1^{n,k}\left(\mathbf{r}\right) \\ \nabla^2 \Phi_2^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) - \left[A_{2,1}^{n,k} \Phi_1^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) + A_{2,2}^{n,k} \Phi_2^{n,k+1}\left(\mathbf{r}\right) \right] = Q_2^{n,k}\left(\mathbf{r}\right) \end{aligned} \qquad \text{(II.2.1а)}$$

И така, двугруповата система за потока (в матрично-векторен запис) е:

$$\nabla^2 \mathbf{\Phi}(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{A}} \mathbf{\Phi}(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}(\mathbf{r}) \qquad \text{(II.2.1б)}$$

Началното състояние като правило е условнокритично, т.е.:

$$\bar{\Phi}_g^{n,0} = \bar{\Phi}_g^{n,crit},$$

като същото важи и за полиномното разложение на потока. Така изразите за ядрата-предшественици и коефициентите в тяхното полиномно разложение в началото биха били следните:

$$\bar{C}_j^n = \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^{2} \frac{\beta_{g,j}^n}{\lambda_j} \Sigma_{\nu,g}^n \bar{\Phi}_g^n$$

$$c_{j,m}^{p,n} = \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^{2} \frac{\beta_{g,j}^n}{\lambda_j} \Sigma_{\nu,g}^n f_{g,m}^n,$$

където $c_{j,m}^{p,n}$ е m-тият коефициент в полиномното разложение на $C_j^n(\mathbf{r})$.

В началото за всяка следваща стъпка по време изразите за ядрата-предшественици се обновяват както следва от (II.1.3):

$$\bar{C}_j^{n,k+1} = \bar{C}_j^{n,k} \exp\left(-\lambda_j^n \Delta_k\right) + \gamma_j^n \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^{2} \beta_{g,j}^{n,k+1} \Sigma_{\nu,g}^{n,k+1} \bar{\Phi}_g^{n,k+1}$$

$$c_{j,m}^{p,n,k+1} = c_{j,m}^{p,n,k+1} \exp\left(-\lambda_j^n \Delta_k\right) + \gamma_j^n \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^{2} \beta_{g,j}^{n,k+1} \Sigma_{\nu,g}^{n,k+1} f_{g,m}^{n,k+1}$$

където:

$$\gamma_j^n = \frac{1 - \exp\left(-\left(\lambda_j^n + \omega^n\right)\Delta_k\right)}{\lambda_j^n + \omega^n}.$$

II.3. Модално разлагане

В изразите (II.2.1) участието на двата групови потока в лявата страна на уравненията прави невъзможно прилагането на модела HEXNEM3 за нодално разлагане на потока и построяване на ACMFD схемата, както те са описани за стационарни задачи в разделите I.1.1 и I.2.1. Едно сравнително просто решение би било в лявата част на уравненията да се оставят величини, свързани единствено с текущата група, а всичко останало да придобие роля на източник. Това налага итериране по групи подобно на подхода за решаване на стационарни задачи. Такава стратегия е реализирана в DYN3D, но тя не е оптимална от гледна точка на изискванията на неявната схема. Определени твърди преходни процеси водят до сравнително бавна сходимост, а поради стационарността на подобния на последователна релаксация итеративен процес техниките за ускоряване са ограничени.

Модалното разлагане, предложено в настоящата дисертация, е подход, който запазва свойствата на разгледания в предходните раздели нодален метод и същевременно има важното предимство да елиминира нуждата от лошо съгласуващото се с принципа на неявната схема итериране по групи при решаване на системата (II.2.1).

Изхождайки от системата (II.2.1), първата стъпка е диагонализирането на матрицата $\hat{\mathbf{A}}$. Матрицата е с размерност 2×2, а процедурата се извършва аналитично. Изводът е поместен в Приложението (раздел IV.5). Диагонализирането на $\hat{\mathbf{A}}$ води до следния запис:

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{\Lambda}}\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}},$$

където матрицата $\hat{\mathbf{\Lambda}}$ е диагонална и съдържа собствените стойности на $\hat{\mathbf{A}}$.

След умножаване на (II.2.1б) отляво със $\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}$ се получава:

$$\nabla^2\left[\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\mathbf{\Phi}(\mathbf{r})\right] - \left[\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{Z}}\right]\left[\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\mathbf{\Phi}(\mathbf{r})\right] = \left[\hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\mathbf{Q}(\mathbf{r})\right],$$

или:

$$\nabla^2\mathbf{f}(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{\Lambda}}\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \mathbf{S}(\mathbf{r}) \qquad \text{(II.3.1)}$$

където:

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\mathbf{\Phi}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{\Phi}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{Z}}\mathbf{f}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{Z}}^{\mathbf{-1}}\mathbf{Q}(\mathbf{r})$$

Преходът от (II.2.1б) към (II.3.1) е позволен, тъй като матриците $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathbf{Z}}$ са координатно независими. Записът (II.3.1) съдържа две самостоятелни нехомогенни хелмхолцови уравнения относно величините $f_{1,2}$, които в литературата са познати като *модове*. Собствените стойности $\lambda_{1,2}$ на матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ в контекста на хомогенната форма на (II.3.1) често биват наричани лапласиани.

II.4. Двумерна задача за модовете

Формулировката (II.3.1) позволява за всеки от двата мода да се изгради ACMFD схема подобно на стационарния случай, който от своя страна не изисква на всяка цена модално разлагане.

II.4.1. ACMFD схема за модовете

Двумерната задача за даден мод в равнината (*x*,*y*) има следния вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) f(x,y)-\lambda f(x,y)=S(x,y) \qquad \text{(II.4.1)}$$

Нека за удобство бъде извършено следното обезразмеряване:

$$x'=\frac{x}{h},\ y'=\frac{y}{h};\ S'(x',y')\equiv h^2 S(x',y')$$

Тъй като в определени случаи λ в (II.4.1) може да се окаже отрицателна, ще бъдат разгледани поотделно двата варианта. Матрицата $\hat{\mathbf{A}}$ в (II.2.1) зависи най-вече от материалните константи, характеризиращи съответния хомогенен нод. Оказва се, че за неразмножаващи среди почти във всички случаи $\hat{\mathbf{A}}$ притежава две положителни собствени стойности, докато за размножаваща среда матрицата обикновено има една положителна и една отрицателна собствени стойности.

II.4.1 а) Положителен лапласиан

Това е случаят $\lambda > 0$. Двумерното уравнение в равнината (*x*,*y*) записваме във вида:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) f(x',y')-B'^2 f(x',y')=S'(x',y'), \qquad \text{(II.4.2)}$$

където $B'^2\equiv h^2\lambda$

В този случай функционалният вид на решението може да съвпада с модела от стационарната задача (в съгласие с HEXNEM3), а именно:

$$f\left(x',y'\right)=\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right)+\sum_{k=1}^{6} a_k^s \exp\left(B'\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}'\right)+\sum_{k=1}^{6} a_k^w\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\mathbf{r}'\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s\cdot\mathbf{r}'\right), \qquad \text{(II.4.3)}$$

като $l(1)=l(4)=2; l(2)=l(5)=6; l(3)=l(6)=4$ (вж. Фиг. I.1).

Във връзка с прилагането на вътрешните гранични условия в предходен раздел вече бяха представени величините Φ_k^s, Φ_k^w, J_k^s, J_k^w (I.1.4). Техните аналози в задачата за модовете са следните:

$$f_k^s=\frac{1}{L'^s_k}\left[\int_{L'^s_k} f\left(x',y'\right)ds\right]; \qquad \text{(II.4.4а)}$$

$$f_k^w=\frac{1}{L'^s_k}\left[\int_{L'^s_k}\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\left(x',y'\right)\right) f\left(x',y'\right)ds\right]; \qquad \text{(II.4.4б)}$$

$$g_k^s = \frac{1}{L'^s_k}\left[\int_{L'^s_k} \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla f\left(x',y'\right) ds\right]; \tag{II.4.4в}$$

$$g_k^w = \frac{1}{L'^s_k}\left[\int_{L'^s_k} \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \left(x',y'\right)\right)\mathbf{e}_k^s \cdot \nabla f\left(x',y'\right) ds\right]. \tag{II.4.4г}$$

Величините (II.4.4) за модовете са важни за прилагането на вътрешните и външните гранични условия, тъй като имат пряка връзка със съответните величини за скаларния поток и нетния ток (I.1.4).

Връзката между (II.4.4) и (I.1.4) е чрез линейните оператори $\hat{\mathbf{Z}}$ и $\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$:

$$\mathbf{f}_k^s(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{Z}}^{-1} \cdot \mathbf{\Phi}_k^s(\mathbf{r}); \tag{II.4.5а}$$

$$\mathbf{f}_k^w(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{Z}}^{-1}\mathbf{\Phi}_k^w(\mathbf{r}); \tag{II.4.5б}$$

$$\mathbf{g}_k^s = -\hat{\mathbf{Z}}^{-1}\hat{\mathbf{E}}\mathbf{J}_k^s; \tag{II.4.5в}$$

$$\mathbf{g}_k^w = -\hat{\mathbf{Z}}^{-1}\hat{\mathbf{E}}\mathbf{J}_k^w, \tag{II.4.5г}$$

където

$$\hat{\mathbf{E}} = \begin{pmatrix} 1/D_1' & 0 \\ 0 & 1/D_2' \end{pmatrix},$$

а D' са обезразмерените коефициенти на дифузия.

В горните четири записа (II.4.5) векторните величини съдържат по две компоненти, съответстващи на модовете и техните производни ($f_{1,2}$, $g_{1,2}$) или на двугруповия поток и ток ($\Phi_{1,2}$, $J_{1,2}$). Също така, поради координатната независимост на матрицата $\hat{\mathbf{Z}}$ връзката между коефициентите в полиномното разложение на потоците и това на модовете е аналогична на (II.4.5а).

От модела (II.4.3) се вижда, че величините f_k^s, f_k^w, g_k^s, g_k^w са линейна комбинация на коефициентите $c_i, i = 0,...,5$, $a_k^s, k = 1,...,6$ и $a_k^w, k = 1,...,6$.

Нека:

$\mathbf{c} = col\left(c_0,...,c_5\right)$, $\mathbf{A}^s = col\left(a_1^s,...,a_6^s\right)$ и $\mathbf{A}^w = col\left(a_1^w,...,a_6^w\right)$

Тогава за всеки нод могат да се запишат следните изрази в пълна аналогия със задачата за потоците:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^s &= \hat{\mathbf{Q}}^{f,ss}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{f,sw}\mathbf{A}^w + \tilde{\mathbf{P}}^{f,s} \\ \mathbf{f}^w &= \hat{\mathbf{Q}}^{f,ws}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{f,ww}\mathbf{A}^w + \tilde{\mathbf{P}}^{f,w} \end{aligned} \tag{II.4.6а}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^s &= \hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}\mathbf{A}^w \\ \mathbf{d}^w &= \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}\mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}\mathbf{A}^w \end{aligned} \tag{II.4.6б}$$

където (всяка компонента във векторите съответства на дадена нодална стена):

$$\mathbf{f}^s = col\left(f_1^s,...,f_6^s\right)$$

$$\mathbf{f}^w = col\left(f_1^w,...,f_6^w\right)$$

$$\tilde{\mathbf{P}}^{f,s} = \hat{\mathbf{P}}^{f,s}\mathbf{c}$$
$$\tilde{\mathbf{P}}^{f,w} = \hat{\mathbf{P}}^{f,w}\mathbf{c}$$
$$\mathbf{d}^{s} = \left(\mathbf{g}^{s} - \tilde{\mathbf{P}}^{c,s}\right); \tilde{\mathbf{P}}^{c,s} = \hat{\mathbf{P}}^{c,s}\mathbf{c}$$
$$\mathbf{d}^{w} = \left(\mathbf{g}^{w} - \tilde{\mathbf{P}}^{c,w}\right); \tilde{\mathbf{P}}^{c,w} = \hat{\mathbf{P}}^{c,w}\mathbf{c}$$

Нека, аналогично на разглежданията в раздел I.1:

$$\hat{\mathbf{Q}}^{c} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{Q}}^{c,ss} & \hat{\mathbf{Q}}^{c,sw} \\ \hat{\mathbf{Q}}^{c,ws} & \hat{\mathbf{Q}}^{c,ww} \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}^{s} \\ \mathbf{d}^{w} \end{pmatrix}; \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{s} \\ \mathbf{A}^{w} \end{pmatrix}.$$

Така:

$$\hat{\mathbf{Q}}^{c}\mathbf{A} = \mathbf{d}$$
$$\mathbf{A} = \left(\hat{\mathbf{Q}}^{c}\right)^{-1}\mathbf{d}$$

Изграждането на ACMFD схема за модовете се извършва по аналогична процедура на вече описаната за стационарни задачи. Връзката на средните стойности на модовете и техните тангенциални моменти по стените на нодовете (II.4.6а) с нормалните производни на модовете и техните тангенциални моменти, които са част от величините $\mathbf{d}$ в (II.4.6б), се извършва изцяло на основата на изразите (II.4.6), при което първо коефициентите $\mathbf{A}$ се изразяват чрез $\mathbf{d}$ и после се заместват в (II.4.6а).

Връзката между средните за стената модове и средните за нода стойности на модовете е важна за по-нататъшното съставяне на свързващите коефициенти, които участват в балансните уравнения.

Средната стойност на мода за даден нод ще бъде:

$$\bar{f} = \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} f\left(x', y'\right) dx' dy' = \frac{1}{F'_{hex}} \alpha \sum_{k} a_{k}^{s} + \bar{P}, \qquad \text{(II.4.7)}$$

където:

a_{k}^{s} са елементи на вектора $\mathbf{A}$;

$F'_{hex} = 2\sqrt{3}$;

$\alpha = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left[\left(\exp(B') - \exp(-B')\right) + \frac{1}{B'} \left(\exp(B') + \exp(-B')\right) - \frac{2}{B'} \right]$ е интегралът на коя-да-е експонента от вида $\exp\left(B'\mathbf{e}_{k}^{s} \cdot \mathbf{r}'\right)$ върху сечението на нода F'_{hex}, а интегралът на всяка експонента с тангенциално меняща се амплитуда върху F'_{hex} е нулев.

На тази основа, за два съседни нода n и m и тяхната обща стена (k за нод n и l за нод m) изводът на работните ACMFD изрази за модовете е аналогичен на този при стационарната задача, а резултатът е от вида:

$$\begin{aligned} f_{k}^{s,n} &= C_{k}^{d,n} g_{k}^{n} + C_{k}^{a,n} \bar{f}^{n} + t_{k}^{n} \\ f_{l}^{s,m} &= C_{l}^{d,m} g_{l}^{m} + C_{l}^{a,m} \bar{f}^{m} + t_{l}^{m} \end{aligned} \qquad \text{(II.4.8a)}$$

за осреднените по стените модове и съответно:

$$f_k^{w,n} = C_w^{d,n} g_{k+6}^n + t_{k+6}^n$$
$$f_l^{w,m} = C_w^{d,m} g_{l+6}^m + t_{l+6}^m \qquad \text{(II.4.8б)}$$

за техните тангенциални моменти.

Описание на величините *C* и *t*, както и извод на изразите (II.4.8), са поместени в Приложението (раздел IV.1).

II.4.1 б) Отрицателен лапласиан

Това е случаят $\lambda < 0$. За него нека $\kappa'^2 \equiv \left|h^2\lambda\right|$. Така задачата придобива вида:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) f(x',y') + \kappa'^2 \, f(x',y') = S'(x',y') \qquad \text{(II.4.9)}$$

В този случай мястото на експонентите в модела (II.4.3) се заема от тригонометрични функции:

$$\begin{aligned} f\left(x',y'\right) = \sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right) + \sum_{k=1}^{6} a_k^s \left[\sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)\right] + \\ + \sum_{k=1}^{6} a_k^w \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\left[\sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)\right] \end{aligned}, \qquad \text{(II.4.10)}$$

като $l(1) = l(4) = 2; l(2) = l(5) = 6; l(3) = l(6) = 4$ (вж. Фиг. I.1).

Може да се покаже, че тригонометричните функции са решение на хомогенния аналог на (II.4.9):

$$\nabla^2 \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) = -\kappa'^2 \left(\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{e}_k^s\right) \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) = -\kappa'^2 \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right);$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right) \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) &= 2\kappa' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{e}_k^s\right) \cos\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) \\ &\quad - \kappa'^2 \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\left(\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{e}_k^s\right) \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right); \\ &= -\kappa'^2 \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right) \sin\left(\kappa' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) \end{aligned}$$

$\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{e}_k^s = 1$ (по построение);

$\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{e}_k^s = 0$ (по построение).

И аналогично за членовете с косинус.

Замяната на експоненциалните функции в модела за отрицателен лапласиан (случая б)) с линейна комбинация от синус и косинус запазва структурата на всички матрици, които бяха необходими за извеждането на ACMFD изразите за модовете в случая на положителен лапласиан (случай а)). Така всички изрази в ACMFD схемата за б) остават аналогични на тези от а) и имат същия вид. Елементите на матриците при отрицателен лапласиан са представени в Приложението (раздел IV.6).

Средната стойност на мода за даден нод при отрицателен лапласиан ще бъде:

$$\overline{f} = \frac{1}{F'_{hex}} \iint_{F'_{hex}} f\left(x',y'\right) dx' dy' = \frac{1}{F'_{hex}} \alpha \sum_{k=1}^{6} a_k^s + \overline{P},$$

където a_k^s са елементи на вектора **A**, $F'_{hex} = 2\sqrt{3}$, $\alpha = \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{1}{\kappa'^2} \left(1 - \cos(\kappa') + \kappa' \sin(\kappa')\right)$ е интегралът на кой-да-е косинус от вида $\cos\left(B' \mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)$ върху сечението на нода F'_{hex}, а интегралът върху F'_{hex} на всеки синус и всяка величина в модела с тангенциално меняща се амплитуда е нулев.

II.4.2. Свързващи коефициенти

Векторните величини в настоящия раздел съдържат по две компоненти – съответно за двата мода или двата групови потока.

За произволна ос и общата стена (k или l) между съседните нодове (n и m) вече имаме резултата:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_k^{s,n} &= \hat{\mathbf{C}}_k^{d,n} \mathbf{g}_k^n + \hat{\mathbf{C}}_k^{a,n} \overline{\mathbf{f}}^n + \mathbf{t}_k^n \\ \mathbf{f}_l^{s,m} &= \hat{\mathbf{C}}_l^{d,m} \mathbf{g}_l^m + \hat{\mathbf{C}}_l^{a,m} \overline{\mathbf{f}}^m + \mathbf{t}_l^m \end{aligned},$$

където матриците $\hat{\mathbf{C}}_k^{d/a}$ са диагонални.

За да намерим свързващите коефициенти за потоците и неутронните токове, първо преминаваме от модове към потоци с помощта на операторите $\hat{\mathbf{Z}}$:

$$\mathbf{\Phi}_k^{s,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{f}_k^{s,n} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{d,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{g}_k^n + \left[\hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{a,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^n \overline{\mathbf{f}}^n + \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{t}_k^n$$

$$\mathbf{\Phi}_l^{s,m} = \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{f}_l^{s,m} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^m \hat{\mathbf{C}}_l^{d,m} \left(\hat{\mathbf{Z}}^m \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{g}_l^m + \left[\hat{\mathbf{Z}}^m \hat{\mathbf{C}}_l^{a,m} \left(\hat{\mathbf{Z}}^m \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^m \overline{\mathbf{f}}^m + \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{t}_l^m$$

Нека означим:

$$\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{d,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{a,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1}$$

$$\mathbf{T}_k^n = \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{t}_k^n,$$

където k е индекс на нодална стена.

Матриците $\hat{\mathbf{C}}_s^{J/\Phi,n}$ зависят само от номера на нода n, но не и от номера на стената, аналогично на матриците $\hat{\mathbf{C}}^{d/a,n}$.

Така стигаме до следния резултат:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Phi}_k^{s,n} &= -\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \mathbf{J}_k^{s,n} + \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} \overline{\mathbf{\Phi}}^n + \mathbf{T}_k^n \\ \mathbf{\Phi}_l^{s,m} &= -\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m \mathbf{J}_l^{s,m} + \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,m} \overline{\mathbf{\Phi}}^m + \mathbf{T}_l^m \end{aligned} \qquad \text{(II.4.11)}$$

Вътрешните гранични условия налагат непрекъснатост на средните стойности и тангенциалните моменти на скаларния поток по общата нодална стена и на средните стойности и тангенциалните моменти на външните нормални проекции на нетните токове по тази стена. Оттук непосредствено следват равенствата:

$$-\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \mathbf{J}_n^{s,m} + \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} \overline{\mathbf{\Phi}}^n + \mathbf{T}_k^n = \hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m \mathbf{J}_n^{s,m} + \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,m} \overline{\mathbf{\Phi}}^m + \mathbf{T}_l^m$$

$$\left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \right] \mathbf{J}_n^{s,m} = \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} \overline{\mathbf{\Phi}}^n + \mathbf{T}_k^n - \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,m} \overline{\mathbf{\Phi}}^m - \mathbf{T}_l^m$$

$$\mathbf{J}_n^{s,m} = \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n}\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\mathbf{T}_k^n$$
$$-\left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,m}\bar{\mathbf{\Phi}}^m - \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\mathbf{T}_l^m$$

Или още:

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_n^{s,m} &= \hat{\mathbf{D}}_k^n\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \tilde{\mathbf{T}}_k^n \\ &- \hat{\mathbf{D}}_l^m\bar{\mathbf{\Phi}}^m - \tilde{\mathbf{T}}_l^m\end{aligned} \qquad \text{(II.4.12a)}$$

Прилагането на външни гранични условия е аналогично, като например в случая на условия от логаритмичен тип имаме:

$$\mathbf{J}_k^{s,n} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{\Phi}_k^{s,n}$$
$$\mathbf{\Phi}_k^{s,n} = -\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\mathbf{J}_k^{s,n} + \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n}\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \mathbf{T}_k^n$$

откъдето:

$$\left[\hat{\mathbf{1}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]\mathbf{J}_k^{s,n} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n}\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{T}_k^n$$
$$\mathbf{J}_k^{s,n} = \left[\hat{\mathbf{1}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n}\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \left[\hat{\mathbf{1}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{T}_k^n$$

Или:

$$\mathbf{J}_k^{s,n} = \hat{\mathbf{D}}_k^n\bar{\mathbf{\Phi}}^n + \tilde{\mathbf{T}}_k^n \qquad \text{(II.4.12б)}$$

Аналогично за тангенциалния момент на тока последователно се получава:

$$f_k^{w,n} = C_w^{d,n}g_{k+6}^n + t_{k+6}^n$$
$$f_l^{w,m} = C_w^{d,m}g_{l+6}^m + t_{l+6}^m$$
$$\mathbf{\Phi}_k^{w,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n\mathbf{f}_k^{w,n} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^n\hat{\mathbf{C}}_w^{d,n}\left(\hat{\mathbf{Z}}^n\right)^{-1}\right]\hat{\mathbf{Z}}^n\mathbf{g}_{k+6}^n + \hat{\mathbf{Z}}^n\mathbf{t}_{k+6}^n$$
$$\mathbf{\Phi}_l^{w,m} = \hat{\mathbf{Z}}^m\mathbf{f}_l^{w,m} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^m\hat{\mathbf{C}}_w^{d,m}\left(\hat{\mathbf{Z}}^m\right)^{-1}\right]\hat{\mathbf{Z}}^m\mathbf{g}_{l+6}^m + \hat{\mathbf{Z}}^m\mathbf{t}_{l+6}^m$$

Нека:

$$\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n\hat{\mathbf{C}}_w^{d,n}\left(\hat{\mathbf{Z}}^n\right)^{-1}$$
$$\mathbf{T}_k^n = \hat{\mathbf{Z}}^n\mathbf{t}_k^n$$

Така:

$$\mathbf{\Phi}_k^{w,n} = -\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\mathbf{J}_k^{w,n} + \mathbf{T}_{k+6}^n$$
$$\mathbf{\Phi}_l^{w,m} = -\hat{\mathbf{C}}_w^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m\mathbf{J}_l^{w,m} + \mathbf{T}_{l+6}^m$$

От вътрешните гранични условия следва непрекъснатост на тангенциалните моменти на потока и на тока на общата стена:

$$-\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\mathbf{J}_n^{w,m} + \mathbf{T}_{k+6}^n = \hat{\mathbf{C}}_w^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m\mathbf{J}_n^{w,m} + \mathbf{T}_{l+6}^m$$
$$\left[\hat{\mathbf{C}}_w^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]\cdot\mathbf{J}_n^{w,m} = \mathbf{T}_{k+6}^n - \mathbf{T}_{l+6}^m$$
$$\mathbf{J}_n^{w,m} = \left[\hat{\mathbf{C}}_w^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\mathbf{T}_{k+6}^n - \left[\hat{\mathbf{C}}_w^{J,m}\hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\mathbf{T}_{l+6}^m$$

Или:

$$\mathbf{J}_n^{w,m} = \tilde{\mathbf{T}}_{k+6}^n - \tilde{\mathbf{T}}_{l+6}^m$$

За външна граница с логаритмично условие:

$$\mathbf{\Phi}_k^{w,n} = -\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\mathbf{J}_k^{w,n} + \mathbf{T}_{k+6}^n$$

$$\mathbf{J}_k^{w,n} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{\Phi}_k^{w,n}$$

$$\left[\hat{\mathbf{1}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]\mathbf{J}_k^{w,n} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{T}_{k+6}^n$$

$$\mathbf{J}_k^{w,n} = \left[\hat{\mathbf{1}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{C}}_w^{J,n}\hat{\mathbf{E}}^n\right]^{-1}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{T}_{k+6}^n$$

Окончателно:

$$\mathbf{J}_k^{w,n} = \tilde{\mathbf{T}}_{k+6}^n$$

Алтернативен подход за получаването на израз от типа (II.4.12а) е още в изразите (II.4.11) векторите **T** да бъдат представени по следния начин:

$$\mathbf{T}_k^n = \hat{\mathbf{T}}_k^n\bar{\mathbf{\Phi}}^n,$$

т.е.:

$$\mathbf{T}_k^n = \begin{pmatrix} \dfrac{\mathrm{T}_{k,1}^n}{\bar{\Phi}_1^n} & 0 \\ 0 & \dfrac{\mathrm{T}_{k,1}^n}{\bar{\Phi}_2^n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{\Phi}_1^n \\ \bar{\Phi}_2^n \end{pmatrix}.$$

Така векторът $\bar{\mathbf{\Phi}}^n$ може да бъде изнесен зад скоби, в които величините $\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n}$ и $\hat{\mathbf{T}}_k^n$ да бъдат комбинирани в една единствена величина. Тогава връзката между външната нормална проекция на средния нетен ток за дадена нодална стена и средните скаларни потоци за двата съседни нода ще има следния вид:

$$\mathbf{J}_n^{s,m} = \hat{\mathbf{D}}_k^n\bar{\mathbf{\Phi}}^n - \hat{\mathbf{D}}_l^m\bar{\mathbf{\Phi}}^m \qquad \text{(II.4.12в)}$$

Използването на израз от вида (II.4.12в) не води до отместване на решението на нестационарни задачи, а в повечето случаи (II.4.12в) се оказва и по-ефикасен от израз (II.4.12а), като се достига една и съща точност при по-малък брой итерации.

II.4.3. Полиномна компонента

Базисът от полиноми, използван за нестационарни задачи, не се различава от вече описания в разделите за условнокритичната задача. Видът на полиномната компонента не зависи от знака на собствената стойност в задачата за модовете, а коефициентите в модела се получават както следва.

Задачата е:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) f(x',y') - \lambda' f(x',y') = S'(x',y')$$

където $\lambda' = h^2\lambda$ и *може да има както положителен, така и отрицателен знак*.

Като се изключи решението на хомогенната част от модела за мода, се получава уравнение за неизвестните коефициенти $\{c\}$ в полиномната компонента:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right) - \lambda'\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right) = S'(x',y')$$

Предполага се, че полиномното разложение на източника е достатъчно точно:

$$S'(x',y') \cong \sum_{i=0}^{5} s_i p_i\left(x',y'\right).$$

Поради ортогоналността на полиномите ще бъде изпълнено:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'dy'\, p_k\left(x',y'\right)\left[\begin{array}{l}\sum_{i=0}^{5} c_i\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) p_i\left(x',y'\right)- \\ -\lambda'\sum_{i=0}^{5} c_i p_i\left(x',y'\right)-\sum_{i=0}^{5} s_i p_i\left(x',y'\right)\end{array}\right]$$

$$=\sum_{i=0}^{5} c_i \iint_{F'_{hex}} dx'dy'\, p_k\left(x',y'\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) p_i\left(x',y'\right)-\lambda' c_k - s_k = 0,\ k=0,..,5$$

Аналогично на предходните разглеждания, единственият полином, чийто лапласиан не е нулев, е $p_3(x',y')$. Това има значение само за случая k=0. Така се получава:

$$c_k = -\frac{s_k}{\lambda'},\ k=1,...,5;$$

за k=0:

$$\sum_{i=0}^{5} c_i \iint_{F'_{hex}} dx'dy'\, p_0\left(x',y'\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) p_i\left(x',y'\right)$$

$$=\frac{1}{N_0 N_3} c_3 \iint_{F'_{hex}} dx'dy'\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right)\left(x'^2+y'^2-\frac{5}{9}\right)$$

$$=\frac{1}{N_0 N_3} c_3 \iint_{F'_{hex}} dx'dy'\left(2+2\right)=c_3\frac{4}{N_0 N_3}N_0^2 = c_3 4\frac{N_0}{N_3}$$

където $N_0=\sqrt{2\sqrt{3}}$; $N_3=\frac{\sqrt{2}\sqrt{43\sqrt{3}}}{9\sqrt{5}}$, а за c_0 резултатът е:

$$c_0 = -\frac{s_0}{\lambda'}+4\frac{N_0}{N_3}\frac{1}{\lambda'}c_3=\frac{1}{\lambda'}\left(36\sqrt{\frac{5}{43}}c_3 - s_0\right).$$

II.5. Едномерна нестационарна задача в аксиално направление

Едномерната аксиална задача за даден мод има следния вид:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z)-\lambda f(z)=S(z). \qquad \text{(II.5.1)}$$

II.5.1. ACMFD схема за модовете

Аналогично на двумерния случай, и тук ще бъдат разгледани двата модела за решение на (II.5.1) според знака на собствената стойност λ.

II.5.1 а) Положителен лапласиан

Това е случаят $\lambda > 0$. Нека $\kappa^2=\lambda$. Така общото решение на (II.5.1) ще бъде:

$$f(z)=a_1\exp(\kappa z)+a_2\exp(-\kappa z)+P(z) \qquad \text{(II.5.2)}$$

За целите на ACMFD схемата са необходими изрази за граничните производни на мода:

$$g_u = \frac{df}{dz}(z_u) = a_1\kappa\exp(\kappa z_u) - a_2\kappa\exp(-\kappa z_u) + P'(z_u)$$

$$g_d = -\frac{df}{dx}(z_d) = -\left[a_1\kappa\exp(\kappa z_d) - a_2\kappa\exp(-\kappa z_d) + P'(z_d)\right]$$

Нека за удобство бъдат въведени следните означения:

$$e^{\pm} = \exp\left(\pm\kappa\frac{H_z}{2}\right);$$

$$d_{u,d} = \frac{1}{\kappa}\left(g_{u,d} \mp P'(z_{u,d})\right).$$

Така за неизвестните в модела (II.5.2) коефициенти a_1 и a_2 се получава системата:

$$\begin{aligned} +e^{+}a_1 - e^{-}a_2 &= d_u \\ -e^{-}a_1 + e^{+}a_2 &= d_d \end{aligned},$$

чието решение е следното:

$$a_1 = \frac{d_u e^{+} + d_d e^{-}}{\Delta};\ a_2 = \frac{d_d e^{+} + d_u e^{-}}{\Delta}, \qquad \text{(II.5.3)}$$

където $\Delta = \left(e^{+}\right)^2 - \left(e^{-}\right)^2 = e^{\kappa H} - e^{-\kappa H} = 4\sinh\left(\frac{\kappa H}{2}\right)\cosh\left(\frac{\kappa H}{2}\right)$.

На основата на резултата (II.5.3) средната стойност на мода по височината на нода може да бъде изразена чрез неговите производни по границата. По аналогия на стационарната задача, за средния мод се получава следният израз:

$$\overline{f} = \overline{P} + \frac{d_u + d_d}{\kappa(z_u - z_d)}$$

или още:

$$\left(\overline{f} - \overline{P}\right)\kappa H = d_u + d_d$$

$$d_u = \left(\overline{f} - \overline{P}\right)\kappa H - d_d$$

$$d_d = \left(\overline{f} - \overline{P}\right)\kappa H - d_u$$

Последните изрази се използват за изразяване на граничните модове чрез средния мод и граничните производни. Явни изрази за граничните модове са необходими за прилагането на вътрешните гранични условия по-нататък. Изводът за модовете на долната и горната граници е аналогичен на този за граничните потоци от стационарния случай, а крайният резултат е следният:

$$\begin{aligned} f_d &= C_g g_d + C_a\overline{f} + t_d \\ f_u &= C_g g_u + C_a\overline{f} + t_u \end{aligned}, \qquad \text{(II.5.4)}$$

където:

$$C_g = \frac{1}{\kappa}\tanh\left(\frac{\kappa H}{2}\right)$$

$$C_a = \frac{\kappa H}{\sinh(\kappa H)}$$

$$t_d = -C_a \bar{P} + P_d + C_g P_d'$$
$$t_u = -C_a \bar{P} + P_u - C_g P_u'$$

II.5.1 б) Отрицателен лапласиан

Това е случаят $\lambda < 0$. Аналогично на двумерната задача, нека $\kappa^2 = |\lambda|$. Така задачата (II.5.1) придобива вида:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + \kappa^2 f(z) = S(z) \tag{II.5.5}$$

Общото решение на (II.5.5) ще бъде:

$$f(z) = a_1 \sin(\kappa z) + a_2 \cos(\kappa z) + P(z) \tag{II.5.6}$$

В този случай граничните производни на мода ще бъдат:

$$g_u = \frac{df}{dz}(z_u) = a_1\kappa \cos\left(\frac{\kappa H}{2}\right) - a_2\kappa \sin\left(\frac{\kappa H}{2}\right) + P'(z_u)$$
$$g_d = -\frac{df}{dx}(z_d) = -\left[a_1\kappa \cos\left(\frac{\kappa H}{2}\right) + a_2\kappa \sin\left(\frac{\kappa H}{2}\right) + P'(z_d)\right]$$

Нека:

$$\begin{aligned} c &= \cos\left(\kappa \frac{H_z}{2}\right) \\ s &= \sin\left(\kappa \frac{H_z}{2}\right) \end{aligned};$$

$$d_{u,d} = \frac{1}{\kappa}\left(g_{u,d} \mp P'(z_{u,d})\right).$$

Така за коефициентите a_1 и a_2 от (II.5.6) се получава системата:

$$\begin{aligned} +ca_1 - sa_2 &= d_u \\ -ca_1 - sa_2 &= d_d \end{aligned},$$

чието решение е следното:

$$a_1 = \frac{d_u - d_d}{2c};\ a_2 = -\frac{d_u + d_d}{2s}. \tag{II.5.7}$$

На основата на резултата (II.5.7) средната стойност на мода в нода може да бъде изразена чрез граничните производни:

$$\bar{f} = \bar{P} - \frac{d_u + d_d}{\kappa H}$$

или още:

$$\left(\bar{P} - \bar{f}\right)\kappa H = d_u + d_d$$
$$d_u = \left(\bar{P} - \bar{f}\right)\kappa H - d_d$$
$$d_d = \left(\bar{P} - \bar{f}\right)\kappa H - d_u$$

Основната връзка между граничните модове, средната стойност на мода и граничните производни е както следва:

$$f_d = C_g g_d + C_a \overline{f} + t_d$$
$$f_u = C_g g_u + C_a \overline{f} + t_u \, ,$$

където:

$$C_g = \frac{1}{\kappa}\tan\left(\frac{\kappa H}{2}\right)$$

$$C_a = \frac{\kappa H}{\sin\left(\kappa H\right)}$$

$$t_d = -C_a \overline{P} + P_d + C_g P_d\,'$$

$$t_u = -C_a \overline{P} + P_u - C_g P_u\,'$$

II.5.2. Свързващи коефициенти

ACMFD изразите (II.4.8а) за двумерната задача и ACMFD изразите (II.5.4) за аксиалната задача напълно съвпадат по структура независимо от знака на собствената стойност λ. Така изводът на свързващите коефициенти също остава непроменен, а структурата на изразите е в пълно съгласие с тази от раздел II.4.2. Единствено трябва да се отбележи, че в аксиалната задача дифузионните коефициенти в матриците $\hat{\mathbf{E}}$ не се обезразмеряват, а също да се припомни, че на аксиални граници не се пресмятат свързващи коефициенти за тангенциалните моменти на токовете.

II.5.3. Полиномна компонента

По аналогия с двумерната задача полиномният базис в аксиално направление остава непроменен спрямо този от раздел I.2.2, без значение какъв е знакът на λ. Намирането на коефициентите $\{c_k\}$ в полиномната компонента на модела за решение (II.5.2)/(II.5.6) също следва стъпките от раздел I.2.2 по метода на претеглените остатъци.

Предполага се, че източникът в задачата за модовете може да бъде достатъчно добре апроксимиран чрез полиномния базис:

$$S(z) \cong \sum_{i=0}^{5} s_i p_i\left(z\right)$$

Тъй като хиперболичните (или съответно тригонометричните) функции в модела на мода са решение на хомогенната част на (II.5.1), то за неизвестните коефициентите в полиномната компонента се получава следното уравнение:

$$\sum_{i=0}^{2} c_i \frac{d}{dz^2} p_i(z) - \lambda \sum_{i=0}^{2} c_i p_i(z) = \sum_{i=0}^{2} s_i p_i(z) \, .$$

Максималната степен на полиномите е втора, което означава, че втората производна по z в последния запис ще бъде нула или константа. Оттук, аналогично на раздел I.2.2, следва:

за $k = 1{,}2$:

$$-\lambda c_k - s_k = 0 \, ;$$

$$c_k = -\frac{s_k}{\lambda} \, ;$$

за $k = 0$:

$$\sum_{i=0}^{2} c_i \int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_0(z) \frac{d}{dz^2} p_i(z) dz$$

$$= c_2 \frac{1}{\sqrt{H_n}} \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}} \int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} \frac{d}{dz^2} \left(\frac{1}{2} - 6 \frac{z^2}{H_n^2} \right) dz$$

$$= -\frac{12\sqrt{5}}{H_n^2} c_2$$

Откъдето:

$$-\frac{12\sqrt{5}}{H_n^2} c_2 - \lambda c_0 - s_0 = 0\,;$$

$$c_0 = -\frac{s_0}{\lambda} - \frac{12\sqrt{5}}{H_n^2 \lambda} c_2\,.$$

II.6. Балансни уравнения

Подобно на стационарната задача, и в нестационарния случай чрез ACMFD схемата се съставя явна линейна алгебрична система от балансни уравнения за средните нодални потоци. За разлика от стационарния случай обаче, където се итерира по групи, при нестационарни задачи балансните уравнения за всички нодове и двете енергетични групи се решават съвместно. Тази разлика се дължи на факта, че след прилагането на модално разлагане в нестационарния случай свързващите коефициенти представляват матрици (с размерност 2×2), чиито извъндиагонални елементи са ненулеви. Така в балансните уравнения за дадена група се появява зависимост от средните нодални потоци на другата група.

Балансните уравнения за нестационарната задача имат следния вид:

$$\frac{1}{V_{node}} \left(\sum_{l=1}^{6} H_z L_{side} J_{1,l}^{n,k+1} + \sum_{k=7}^{8} F_{hex} J_{1,l}^{n,k+1} \right) + \tilde{\Sigma}_{1,1}^{n,k+1} \bar{\Phi}_1^{n,k+1} + \tilde{\Sigma}_{1,2}^{n,k+1} \bar{\Phi}_2^{n,k+1} = \bar{Q}_1$$

$$\frac{1}{V_{node}} \left(\sum_{l=1}^{6} H_z L_{side} J_{2,l}^{n,k+1} + \sum_{k=7}^{8} F_{hex} J_{2,l}^{n,k+1} \right) + \tilde{\Sigma}_{2,1}^{n,k+1} \Phi_1^{n,k+1} + \tilde{\Sigma}_{2,2}^{n,k+1} \bar{\Phi}_2^{n,k+1} = \bar{Q}_2$$

където:

$$\tilde{\Sigma}_{1,1}^{n,k+1} = \left(\Sigma_r^{n,k+1} + \frac{1 + \omega^n \Delta_k}{\mathrm{v}_1 \Delta_k} - \gamma^{n,k} \Sigma_{\nu,1}^{n,k+1} \right)$$

$$\tilde{\Sigma}_{1,2}^{n,k+1} = -\gamma^{n,k} \Sigma_{\nu,2}^{n,k+1}$$

$$\tilde{\Sigma}_{2,1}^{n,k+1} = -\Sigma_s^{n,k+1}$$

$$\tilde{\Sigma}_{2,2}^{n,k+1} = \left(\Sigma_a^{n,k+1} + \frac{1 + \omega^n \Delta_k}{\mathrm{v}_2 \Delta_k} \right)$$

$$\bar{Q}_1 = \frac{\exp\left(\omega^n \Delta_k\right)}{\mathrm{v}_1 \Delta_k} \bar{\Phi}_1^{n,k} + \sum_{j=1}^{M} \lambda_j^n \bar{C}_j^{n,k} \exp\left(-\lambda_j^n \Delta_k\right)$$

$$\bar{Q}_2 = \frac{\exp\left(\omega^n \Delta_k\right)}{\mathrm{v}_2 \Delta_k} \bar{\Phi}_2^{n,k}$$

Решението на системата от балансни уравнения дава средните нодални потоци в края на съответната стъпка по време. Ако е необходимо, се правят итерации за обновяване на свързващите коефициенти и величините $\{\omega^n\}$.

II.6.1. Задача за средните модове

Алтернативен подход на решаването на пълната система от балансни уравнения относно средните потоци е да се реши система от уравнения, съставена за средните модове. На основата на (II.3.1) след обемно интегриране върху целия нод и прилагане на теоремата за дивергенцията може да се състави система от балансни уравнения относно средните нодални модове.

За целта са необходими коефициенти, които да свързват средните нодални модове с външните нормални производни на модовете по стените на нодовете. Изхождайки от ACMFD изразите за общата стена на два съседни нода, имаме:

$$\mathbf{\Phi}_k^{s,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{f}_k^{s,n} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{d,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{g}_k^n + \left[\hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{a,n} \right] \bar{\mathbf{f}}^n + \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{t}_k^n$$

$$\mathbf{\Phi}_l^{s,m} = \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{f}_l^{s,m} = \left[\hat{\mathbf{Z}}^m \hat{\mathbf{C}}_l^{d,m} \left(\hat{\mathbf{Z}}^m \right)^{-1} \right] \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{g}_l^m + \left[\hat{\mathbf{Z}}^m \hat{\mathbf{C}}_l^{a,m} \right] \bar{\mathbf{f}}^m + \hat{\mathbf{Z}}^m \mathbf{t}_l^m$$

Нека:

$$\hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{d,n} \left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1}$$

$$\hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} = \hat{\mathbf{Z}}^n \hat{\mathbf{C}}_k^{a,n}$$

$$\mathbf{T}_k^n = \hat{\mathbf{Z}}^n \mathbf{t}_k^n$$

След приравняване на граничните потоци и токовете, получаваме израз за средния ток на граничната стена:

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_n^{s,m} &= \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \right]^{-1} \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,n} \bar{\mathbf{f}}^n + \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \right]^{-1} \mathbf{T}_k^n \\ &- \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \right]^{-1} \hat{\mathbf{C}}_s^{\Phi,m} \bar{\mathbf{f}}^m - \left[\hat{\mathbf{C}}_s^{J,m} \hat{\mathbf{E}}^m + \hat{\mathbf{C}}_s^{J,n} \hat{\mathbf{E}}^n \right]^{-1} \mathbf{T}_l^m\end{aligned}$$

Или:

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_n^{s,m} &= \hat{\mathbf{D}}_k^n \bar{\mathbf{f}}^n + \tilde{\mathbf{T}}_k^n \\ &- \hat{\mathbf{D}}_l^m \bar{\mathbf{f}}^m - \tilde{\mathbf{T}}_l^m\end{aligned},$$

където е използвана връзката между нормалната проекция на неутронния ток и нормалната производна на мода:

$$\mathbf{g}_k^s = -\hat{\mathbf{Z}}^{-1} \hat{\mathbf{E}} \mathbf{J}_k^s$$

Така, ако $\hat{\mathbf{F}}^n = -\left(\hat{\mathbf{Z}}^n \right)^{-1} \hat{\mathbf{E}}^n$, то за външната нормална производна на мода в нод *n* на общата стена с нод *m* получаваме израза:

$$\mathbf{g}_n^{s,m} = \hat{\mathbf{F}}^n \hat{\mathbf{D}}_k^n \overline{\mathbf{f}}^n + \hat{\mathbf{F}}^n \tilde{\mathbf{T}}_k^n$$
$$- \hat{\mathbf{F}}^n \hat{\mathbf{D}}_l^m \overline{\mathbf{f}}^m - \hat{\mathbf{F}}^n \tilde{\mathbf{T}}_l^m$$

Или:

$$\mathbf{g}_n^{s,m} = \hat{\mathbf{D}}_k^{nm} \overline{\mathbf{f}}^n + \tilde{\mathbf{T}}_k^{nm}$$
$$- \hat{\mathbf{D}}_l^{mn} \overline{\mathbf{f}}^m - \tilde{\mathbf{T}}_l^{mn}$$

За разлика от изразите за средните нормални външни проекции на нетните токове, при изразите за средните външни нормални производни на модовете са необходими два комплекта свързващи коефициенти поотделно за нодовете n и m, тъй като матрицата $\hat{\mathbf{F}}^n$ в общия случай е различна за два съседни нода.

Изразите за тангенциалните моменти на нормалните производни на модовете се получават по аналогичен начин.

Предимство при решаването на алгебричната задача относно средните модове е видът на матрицата, която в този случай е много близо до диагонално преобладаваща. Това позволява ефективно прилагане на предобусловител на Якоби в хода на решаване на задачата. Така например, при използване на метода BiCGSTAB броят на итерациите намалява средно с около 40 %, ако алгебричната задача се решава за средните модове вместо за средните потоци.

II.7. Алгоритъм

Алгоритъмът за решаване на нестационарната дифузионна задача изглежда по следния начин:

1. При известни потоци и коефициенти в тяхното разложение по полиноми се пресмята разложението на източника Q в (II.2.1).
2. Пресмятат се коефициентите в полиномното разложение на източниците S в задачата за модовете посредством линейния оператор $\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$.
3. Изготвят се необходимите матрици ($\hat{\mathbf{R}}$, $(\mathbf{Q}^c)^{-1}$, $\hat{\mathbf{G}}$) в задачата за модовете според знака на собствената стойност λ и се пресмятат величините, участващи в ACMFD връзките за модовете. Чрез линейния оператор $\hat{\mathbf{Z}}$ се преминава към ACMFD връзки за потоците. Налагат се граничните условия и се пресмятат свързващите коефициенти.
4. Формират се баланcните уравнения за всеки нод и всяка група, след което пълната система се решава относно средните потоци (или средните модове) в края на съответната стъпка по време.
5. Обновяват се токовете и техните моменти с помощта на вече пресметнатите свързващи коефициенти.
6. От токове се преминава към нормални производни на модовете чрез линейния оператор $\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$. Нормалните производни на модовете са необходими на свой ред за пресмятане на разложението по полиноми на модовете в края на стъпката.
7. Новите коефициенти в разложението на модовете се използват за пресмятане на коефициентите в разложението на потоците, а те на свой ред участват в разложението на източника за следващата стъпка по време.

На всяка стъпка по време се итерира по свързващите коефициенти. В настоящата програмна реализация е избрано критерият за сходимост да се прилага върху оценката за пълната мощност на реактора в края на стъпката по време.

III. Програмна реализация и тестови задачи

Програмната реализация следва стриктно метода описан в изложението.

Уместно е обаче най-напред да се коментират произтичащите от този метод алтернативни организации на решаването на балансните уравнения и особеностите на всяка от тях, които бяха наблюдавани по време на решаване на тестови задачи.

Тъй като тримерните задачи изискват напречно интегриране на дифузионното уравнение, тяхното решаване може да бъде организирано по различни начини:

1. Решаване на nz на брой обособени двумерни задачи, където nz е броят на аксиалните слоеве;
2. Решаване на nk на брой обособени едномерни аксиални задачи, където nk е броят на касетите;
3. Решаване на *една обща* алгебрична система, която включва балансните уравнения за всички нодове.

При решаването на *стационарни* тримерни задачи *без модално разлагане* (итериране по групи) трите подхода дават на практика неразличими резултати, като и в трите случая е налице отлична числена стабилност. Във всички случаи успоредно на итерацията по източника се итерира и по напречната утечка. При вариант 3 напречната утечка се използва единствено за формиране на сдвояващите коефициенти, докато при останалите два варианта тя се включва и в източника за балансните уравнения.

Когато за решаването на *стационарни* тримерни задачи се *включи модалното разлагане* и задачата се решава наведнъж за всички нодове и групи (вариант 3), се наблюдава разходимост при определени съотношения между големините на стъпката на решетката и на аксиалната стъпка. Ако задачата се решава по слоеве (вариант 1), такива проблеми не се наблюдават.

В крайна сметка, оптималният вариант за решаване на стационарни задачи остава итерирането по групи (без модално разлагане) и решаването на пълната алгебрична система от балансни уравнения за всички нодове в тримерната задача. В този случай се оказва най-ефективно и прилагането на полиномни методи за ускоряване на итерацията по източника от делене и k_{eff}, в частност чрез използване на трислойната схема на полиномите на Чебишев [Saad, 2011].

При решаване на *нестационарни* тримерни задачи, разбира се, модалното разлагане се използва винаги, но ефектът от избора на организация на пресмятанията е различен от този при стационарни задачи. Ако задачата се решава по слоеве (вариант 1), се получава практически мигновена разходимост независимо от размерите на нодовете. От друга страна, ако се решава пълната система от балансни уравнения (вариант 3), не се наблюдават никакви проблеми, като сходимостта за дадена стъпка по време е много добра, а числената стабилност е отлична.

Така, при решаване на нестационарни задачи най-добрият вариант е свързващите коефициенти да бъдат пресметнати предварително за всички нодове и двете групи, след което с една стъпка да бъде решена пълната двугрупова тримерна алгебрична задача за средните потоци (или модове). Това е и практическа демонстрация на предимството на избрания модален ACMFD подход.

За краткост и определеност фортрановата програмна реализация на новата модална ACMFD формулировка на метода HEXNEM3, създадена за целите на настоящата дисертация, ще бъде наричана H3CM (**H**EXNEM**3** A**C**MFD **M**odal).

III.1. Хибридна финоклетъчна схема

Някои от представените в следващия раздел тестови задачи не са придружени с публикувано точно референтно решение, с което да бъдат сравнени резултатите, получени с H3CM.

По тази причина, за получаване на точни референтни решения за проверка на H3CM беше създадена описаната в настоящия раздел *хибридна* схема за решаване на финоклетъчната дифузионна задача. Подобен подход е описан например в [Lee and Downar, 2004]. Идеята зад хибридната схема е използваните модели, техники и алгоритми да бъдат прости, обозрими и лесни за прилагане, като същевременно гарантират висока точност. В общия случай всичко това е постижимо с цената на огромен изчислителен разход в сравнение с едроклетъчните нодални методи, какъвто е реализираният в H3CM.

Хибридната схема се характеризира със следните особености:

– Нодален метод в аксиално направление, базиран на напречно интегриране;

– Метод на крайните разлики за двумерната задача в равнината (x,y);

– Локално квадратично апроксимиране на напречната утечка за аксиалния нодален метод, основано на подходящи гранични условия за утечката на вътрешните и външните аксиални граници.

Основните предпоставки за избор на такава схема са следните.

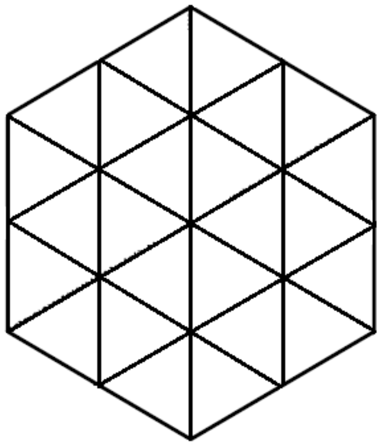
- Техниката на напречно интегриране при изграждане на нодалния метод в аксиално направление не би следвало да води до загуба на точност, стига членът на радиалната утечка да се апроксимира достатъчно добре.
- Прилагането на описания в раздели I.2 и II.5 нодален метод в аксиално направление в съчетание с финоклетъчни двумерни крайни разлики демонстрира практически точно съвпадение с изцяло финоклетъчните решения както на условнокритични, така и на нестационарни задачи.
- Конфигурациите на описаните в следващия раздел тестови задачи за ВВЕР позволяват сравнително големи аксиални стъпки на пространствена дискретизация.
- Методът на крайните разлики, от своя страна, гарантира неограничено нарастваща точност с намаляване на стъпката на пространствена дискретизация.

Решените за целите на настоящата работа тестови задачи са с хомогенизирани сечения на ниво слой от касета. Това позволява за хибридната схема финоклетъчното разбиване на един хомогенен шестостенен нод да се извършва както е представено на Фиг. III.1. Най-напред нодът се разделя на шест равностранни триъгълника, при което на всяка следваща стъпка всеки от съществуващите равностранни триъгълници се разбива на четири по-малки равностранни триъгълника.

Връзката между нормалната външна проекция на средния за дадена стена (k) нетен ток и средните скаларни неутронни потоци за две съседни клетки (m и n) е чрез диференчната схема (III.1.1), базирана на основното предположение за съвпадение на средния скаларен поток в клетката със стойността му в нейния център.

$$J_g^{n,k} = \frac{1}{h} \frac{D_g^n D_g^m}{D_g^n + D_g^m} \left(\bar{\Phi}_g^n - \bar{\Phi}_g^m \right), \qquad \text{(III.1.1)}$$

където h е полуразстоянието между центровете на две съседни клетки.



Фиг. III.1. Финоклетъчно разбиване на хомогенизиран шестостенен нод
(в случая – на 24 триъгълника)

За прилагане на нодалния метод в аксиално направление е необходимо аксиалната зависимост на напречната (радиална) утечка да бъде апроксимирана с полином от втора степен. Описаната в раздел I.3. процедура за пресмятане на коефициентите в полиномното разложение включва използване на крайни разлики (израз (I.3.7)). Това опростяващо предположение е неизбежно при двумерната задача, но при едномерната то може да бъде избегнато и така да се елиминира потенциален източник на неточност.

Използвайки тази възможност, в хибридната схема е приложена следната методически по-коректна техника.

Напречната утечка за аксиалната задача в хибридната схема има вида:

$$L_g^n(z) = -\frac{D_g^n}{F} \iint_F \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Phi_g^n(x, y, z) dxdy \qquad \text{(III.1.2а)}$$

Апроксимирането на утечката се извършва с полином от втора степен:

$$L(z) \approx \sum_{i=0}^{2} l_i p_i(z), \qquad \text{(III.1.2б)}$$

където коефициентите l подлежат на определяне.

От условието за непрекъснатост на скаларния поток последователно се получава:

$$\Phi_g^n(x,y,z_u)=\Phi_g^{n+1}(x,y,z_d)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g^n(x,y,z_u)=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g^{n+1}(x,y,z_d)$$

$$-\frac{1}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g^n(x,y,z_u)dxdy \qquad \text{(III.1.3a)}$$

$$=-\frac{1}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g^{n+1}(x,y,z_d)dxdy$$

$$\frac{1}{D_g^n}L_g^n(z_u)=\frac{1}{D_g^{n+1}}L_g^{n+1}(z_d)$$

От условието за непрекъснатост на нетния ток имаме следното:

$$J_g^n(x,y,z_u)=J_g^{n+1}(x,y,z_d)$$

$$-D_g^n\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_u}=-D_g^{n+1}\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^{n+1}(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_d}$$

$$-D_g^n\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_u} \qquad \text{(III.1.3б)}$$

$$=-D_g^{n+1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^{n+1}(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_d}$$

$$-\frac{D_g^n}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_u}dxdy$$

$$=-\frac{D_g^{n+1}}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\Phi_g^{n+1}(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_d}dxdy$$

$$\frac{\partial}{\partial z}L_g^n(z)\Big|_{z_u}=\frac{\partial}{\partial z}L_g^{n+1}(z)\Big|_{z_d}$$

Аналогично, на външна граница се получава:

$$\mathbf{J}^n(x,y,z_s)=\hat{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z_s)$$

$$-\hat{\mathbf{D}}^n\left(\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_s}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\Big|_{z_s}$$

$$-\hat{\mathbf{D}}^n\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_s}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\Big|_{z_s}$$

$$-\hat{\mathbf{D}}^n\frac{1}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\right)\Bigg|_{z_s}dxdy \qquad \text{(III.1.3в)}$$

$$=\hat{\boldsymbol{\alpha}}\frac{1}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\boldsymbol{\Phi}^n(x,y,z)\Big|_{z_s}dxdy$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\mathbf{L}^n(z)\Big|_{z_s}=-\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(\hat{\mathbf{D}}^n\right)^{-1}\mathbf{L}^n(z)\Big|_{z_s}$$

Тук матрично-векторният запис е необходим единствено в случаите, когато матрицата $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ не е диагонална. В противен случай всяка енергетична група може да се разглежда поотделно.

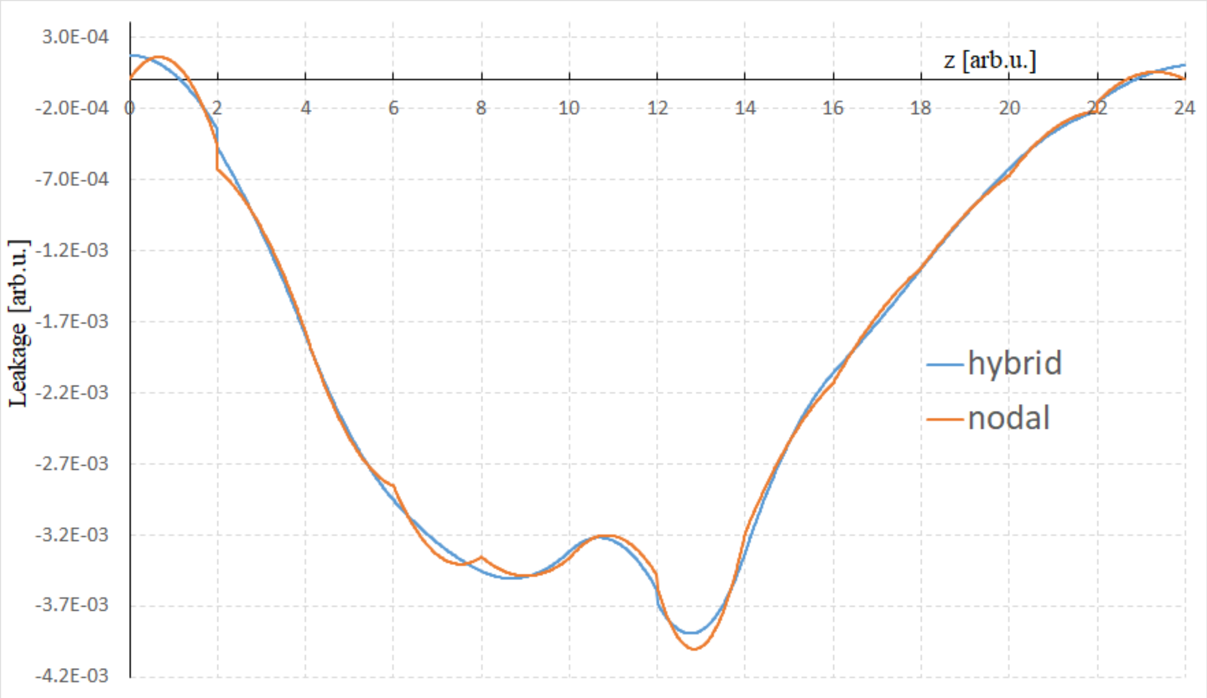
За целите на подхода е необходим и израз за средната стойност на утечката по височината на нода, а именно:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{H_z}\int_{H_z} L_g^n(z)dz = -\frac{D_g^n}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\frac{1}{H_z}\int_{H_z}\Phi_g^n(x,y,z)dzdxdy \\
&\bar{L}_g^n = -\frac{D_g^n}{F}\iint_F\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi_g^n(x,y)dxdy \\
&\bar{L}_g^n = \frac{1}{F}\iint_F \nabla\cdot J_g^n(x,y)dxdy \\
&\bar{L}_g^n = \frac{1}{F}\sum_{k=1}^{N} J_g^{n,s}
\end{aligned}
\tag{III.1.3г}
$$

Окончателно, на основата на (III.1.3) може да бъде съставена една линейна алгебрична система за коефициентите в (III.1.2б) със следните уравнения за нодовете в един стълб:

$$
\begin{aligned}
&\bar{L}_g^n = \frac{1}{F}\sum_{k=1}^{K} J_g^{n,k} \\
&\frac{1}{D_g^n}L_g^n(z_u) = \frac{1}{D_g^{n+1}}L_g^{n+1}(z_d) \\
&\left.\frac{\partial}{\partial z}L_g^n(z)\right|_{z_u} = \left.\frac{\partial}{\partial z}L_g^{n+1}(z)\right|_{z_d}
\end{aligned}
\tag{III.1.4}
$$

На Фиг. III.2 е представено поведението на напречната утечка по височина (z) в стълб от клетки в касета на ВВЕР-1000, в която е въведен поглътител до средата на активната зона. Единиците по оста z са условни. На две единици съответства пълната височина на една клетка.



Фиг. III.2. Поведение на утечката при използване на подхода в хибридната схема (синьо) и този в нодалната (червено)

В аксиални позиции 2, 12 и 22 на Фиг. III.2 се очаква утечката да бъде прекъсната поради природата на вътрешните гранични условия (III.1.4). В тези позиции има скок в материалния състав. Във всички други позиции е нормално да се очаква утечката да бъде гладка функция. Това е изпълнено за апроксимацията в хибридната схема, но не и за апроксимацията в НЗСМ, включваща използване на крайни разлики. В случая ефектът е най-силно изразен в позиции 6 и 8.

Такова поведение, макар и нефизично, не води до съществена загуба на точност. Този извод се потвърждава от доброто съгласие с референтни решения при решаване на тестови задачи с НЗСМ, където за аксиалната и радиалната задачи е използван опростеният базиран на крайни разлики подход, описан в раздел I.3.

Независимо от това, за елиминиране на излишни източници на неточност в хибридната схема е използван описаният в настоящия раздел подход, който гарантира гладкост на напречната утечка на вътрешни граници без материален скок.

В следващия раздел са показани решения на тестови задачи за два типа реактори. Единият е ВВЕР-1000 със стъпка на решетката от горивни касети 23.7 – 24.1 cm. Другият е ВВЕР-440, където стъпката на решетката е 14.7 cm. И в двата случая за хибридната схема един шестостен се разделя на 1536 триъгълни клетки. Така разстоянието между центровете на съседни клетки при ВВЕР-1000 е около 5 mm, а при ВВЕР-440 е около 3 mm. За тези тестови задачи хибридната схема демонстрира добра точност и при по-големи стъпки, като при ВВЕР-1000 за стъпка дори 2 cm резултатите не се влошават съществено, а при ВВЕР-440 при двойно по-голямата стъпка 6 mm резултатите са на практика равностойни на тези при 3 mm. Все пак по-долу, ако не е уговорено друго, са представени резултатите за малките стъпки – съответно 5 и 3 mm за двата типа реактори.

Хибридната схема позволява запазването на големи аксиални размери на клетките, без това да влошава точността. Така всички тестови задачи са решени в предписания по условие набор от аксиални слоеве, които са не повече от 12 – 15.

За краткост и определеност фортрановата програмна реализация на хибридната схема по-нататък ще бъде наричана FRCZ (**F**ine-mesh **R**adial **C**oarse-mesh **Z** (axial)).

III.2. Решаване на тестови задачи

За целите на настоящата работа са решени няколко тестови задачи, чрез които са проверени точността на метода и качеството на програмната реализация НЗСМ.

При решаване на тези задачи критериите за сходимост са както следва:

– за условнокритични задачи:

$\varepsilon_k = 1.E-6$;

$\varepsilon_f = 1.E-5$;

$\varepsilon_{bcgs} = 1.E-7$,

където ε_k е критерият по ефективен коефициент на размножение; ε_f е критерият по източника от делене, а ε_{bcgs} е критерият за сходимост в BiCGSTAB.

– за нестационарни задачи:

$\varepsilon_{bcgs} = 1.E-7$;

$\varepsilon_{pwr} = 1.E-5$,

където ε_{pwr} е критерият за сходимост по относителна мощност на реактора в края на стъпката по време:

$$A = \frac{P}{P_0} = \frac{1}{P_0}\sum_n V_{node}\sum_{g=1}^{2}\Sigma_{Er,g}^n \bar{\Phi}_g^n .$$

Произведението $\Sigma_{Er,g}^n \bar{\Phi}_g^n$ (*Er = Energy release*) дава средната депозирана мощност от делене за съответния нод, предизвикано от потока в група *g*, а P_0 е мощността в началното условнокритично състояние. Отсега нататък величината *A* ще бъде наричана *амплитудна функция*.

За всяка тестова задача и пресметнато състояние разпределението на мощността по нодове е нормирано към единична средна стойност. Затова е избрано отклоненията от реперните решения да бъдат представени в абсолютни, а не относителни, разлики. Единствено при сравнение на k_{eff} са използвани относителни разлики.

При решаване на стационарни задачи е използван метод на полиномите на Чебишев за ускоряване на външните итерации. Параметрите на метода са фиксирани и не се преизчисляват по време на итерациите. След известен брой тестове, доминантното отношение, което е определящо за поведението на метода, е избрано да бъде 0.96. Отношението на минималната собствена стойност към максималната е избрано да бъде -0.2. Отрицателното отношение по принцип води до леко влошаване на качествата на ускоряващата процедура, но предпазва допълнително от разходимост.

III.2.1. Условнокритични задачи B1–BB за ВВЕР-1000

Първата тестова задача има за цел да провери качеството на новата ACMFD формулировка на HEXNEM3, както и използването на коефициенти на прекъсване на потока от типа ADF (Assembly discontinuity factors [Smith, 1986]) и албедни гранични условия.

Решава се набор от стационарни двумерни тестови задачи B1-BB [Petkov and Mittag, 2003], които представят началото на първа кампания за ВВЕР-1000 при горещо състояние на нулева мощност (hot zero power). При B1 не са въведени органи за регулиране в активната зона, докато от B2 до BB последователно се въвеждат поглътителите от десета до първа група. Така при BB са въведени всички групи. Зареждането на зоната е представено в 60-градусов сектор на симетрия, като албедните матрици за външните гранични условия са индивидуални за всяка от стените в сектора. Коефициентите на прекъсване на потока са по материални типове. Стъпката на решетката от касети е 23.7178 cm.

Материалните константи, необходими за решаване на задачите B1–BB, са представени в Табл. III.1 и Табл. III.2.

Табл. III.1. Задачи B1-BB. Материални типове, неутронни сечения и коефициенти на прекъсване

тип	D_1, cm	D_2, cm	Σ_1^r, cm^{-1}	Σ_2^r, cm^{-1}	$\Sigma_{1\to2}^s$, cm^{-1}	Σ_1^ν, cm^{-1}	Σ_2^ν, cm^{-1}
A	1.4443E+00	3.9865E-01	2.5077E-02	5.9029E-02	1.7376E-02	3.9865E-03	6.6163E-02
B	1.4775E+00	4.0395E-01	2.6358E-02	7.2400E-02	1.5497E-02	3.9471E-03	6.6780E-02
C	1.4281E+00	4.0654E-01	2.4292E-02	8.1148E-02	1.5891E-02	5.6212E-03	1.1447E-01
D	1.4524E+00	4.1092E-01	2.5590E-02	9.5501E-02	1.4205E-02	5.5390E-03	1.1574E-01
E	1.4282E+00	4.2361E-01	2.3686E-02	1.0486E-01	1.4342E-02	6.9217E-03	1.5117E-01
F	1.4278E+00	4.2459E-01	2.3662E-02	1.0782E-01	1.4233E-02	7.1010E-03	1.5713E-01

тип	ADF_1	ADF_2
A	9.9871E-01	1.0605E+00
B	1.0493E+00	1.3755E+00
C	9.9810E-01	1.0818E+00
D	1.0462E+00	1.3936E+00
E	1.0026E+00	1.2752E+00
F	1.0069E+00	1.2346E+00

Табл. III.2. Задачи B1-BB. Албедни матрици според номера на нодалната стена

№	$1 \to 1$	$2 \to 1$	$1 \to 2$	$2 \to 2$
1	6.4861E-01	2.5713E-03	3.6720E-02	5.3884E-01
2	7.1268E-01	2.9794E-03	3.0291E-02	5.3096E-01
3	6.3711E-01	3.0074E-03	2.3517E-02	4.9115E-01
4	6.9025E-01	3.0185E-03	2.8329E-02	5.2675E-01
5	6.3464E-01	2.9380E-03	2.8609E-02	5.2063E-01
6	6.5158E-01	2.9431E-03	2.9040E-02	5.2578E-01
7	6.4511E-01	2.8662E-03	2.9010E-02	5.2105E-01
8	6.4593E-01	2.8887E-03	2.9003E-02	5.2313E-01
9	6.4582E-01	2.8914E-03	2.8998E-02	5.2308E-01
10	6.4522E-01	2.8628E-03	2.9014E-02	5.2109E-01
11	6.5149E-01	2.9413E-03	2.9033E-02	5.2573E-01
12	6.3491E-01	2.9520E-03	2.8524E-02	5.2066E-01
13	6.9036E-01	3.0237E-03	2.8233E-02	5.2667E-01
14	6.3733E-01	2.9897E-03	2.3515E-02	4.9116E-01
15	7.1269E-01	2.9654E-03	3.0295E-02	5.3101E-01

В Табл. III.2 стена № 1 отговаря на дясната стена на касета № 7 (вж Фиг. III.3), а обхождането на следващите стени се прави обратно на часовниковата стрелка. Албедните коефициенти се отнасят за парциалните токове, т.е. $\mathbf{J}^{-} = \hat{\mathbf{\Gamma}}\mathbf{J}^{+}$, където векторите са двугрупови, а матрицата $\hat{\mathbf{\Gamma}}$ е с елементи от Табл. III.2.

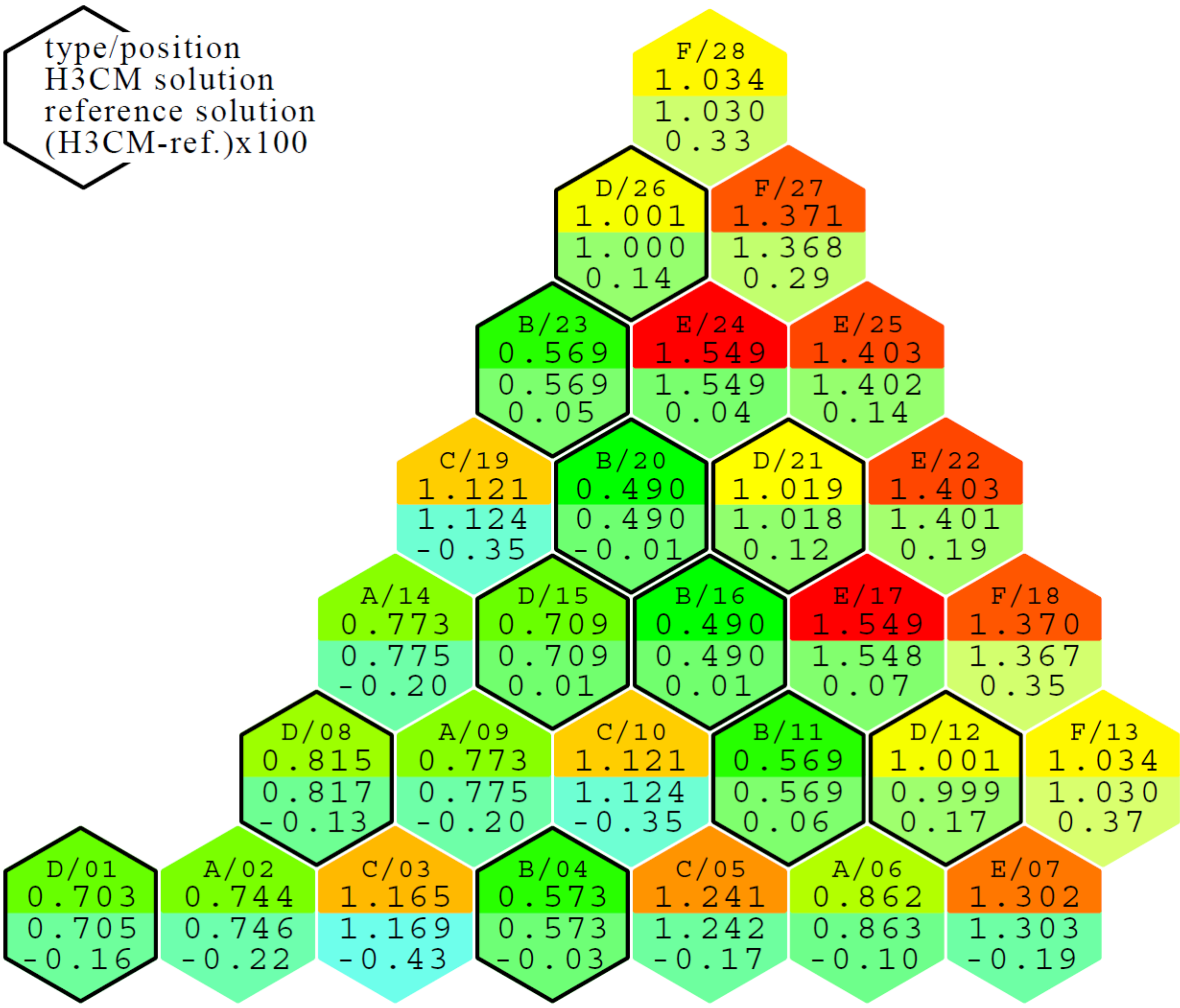
Еталонното решение, с което са сравнени резултатите от настоящата реализация, е получено финоклетъчно в дифузионно приближение с програмата HEX2DA [Petkov and Georgieva, 1987], като решението е екстраполирано към нулева стъпка на пространствена дискретизация. Резултати от сравнение с НЗСМ са представени в Табл. III.3 и на Фиг. III.3.

В Табл. III.3 и по-надолу *δk/k* е означение за относителното отклонение по k_{eff} (1 pcm = 1.E-5), *min* е минималното отклонение на мощността от референтната, *max* е максималното отклонение, а *rms* е средноквадратичното отклонение.

На всички картограми по-долу цветният код в горната половина на клетката съответства на относителната мощност, а в долната – на отклонението от референтното решение.

Табл. III.3. Задачи B1-BB. Отклонения на H3CM от референтното финоклетъчно решение по k_{eff} (относително) и по относителна мощност по касети

Задача	δk/k, pcm	min×100	max×100	rms×100
B1	-3.5	-0.17	0.05	0.05
B2	-3.0	-0.18	0.09	0.06
B3	-3.4	-0.24	0.09	0.07
B4	-3.8	-0.29	0.12	0.08
B5	-5.3	-0.32	0.13	0.09
B6	-5.4	-0.15	0.11	0.07
B7	-6.4	-0.18	0.16	0.10
B8	-7.8	-0.26	0.26	0.12
B9	-10.1	-0.25	0.16	0.11
BA	-9.7	-0.25	0.15	0.11
BB	-5.2	-0.43	0.37	0.21



Фиг. III.3. Двумерна задача BB. Разпределение на относителната мощност по касети (H3CM). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

На Фиг. III.3 в позициите с черен контур са въведени поглътители – материални типове B и D. Материалните типове следват означенията от Табл. III.1.

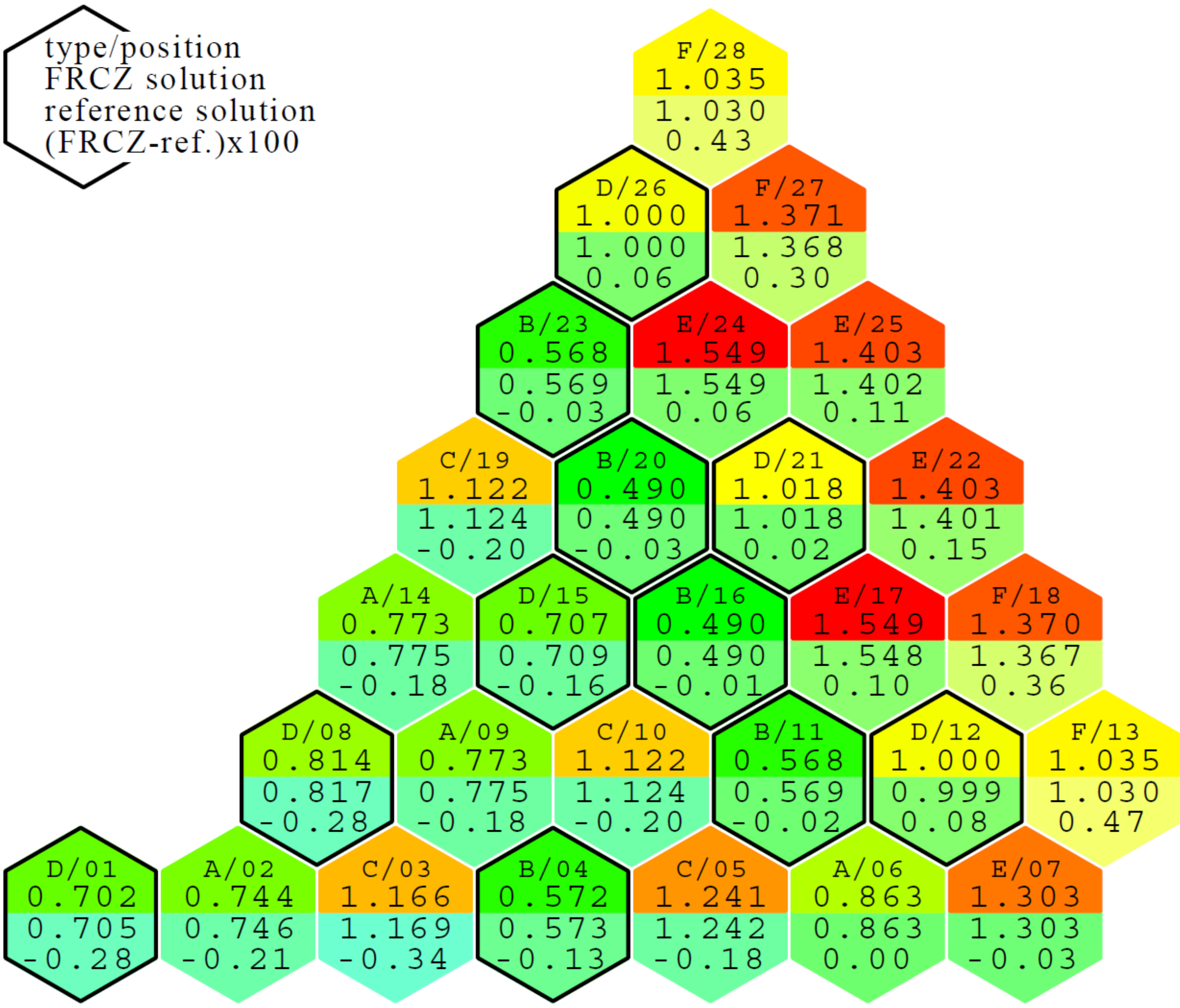
Избрано е да бъде показано решението на задача BB, тъй като при нея отклоненията от референтното решение са най-големи. Те обаче остават изцяло в рамките на допустимото, защото разлики по k_{eff} до около 10 pcm, а по относителна мощност до около 1 %, обикновено се оценяват като напълно приемливи за практически цели.

Броят на външните итерации за задачите B1–BB е типично около 70-80, а средният брой вътрешни итерации (в BiCGSTAB) на една външна е типично около 2-3 за всяка група.

Същият набор от задачи е решен и с програмата FRCZ. Резултатите са представени в аналогичен формат съответно в Табл. III.4 и Фиг. III.4.

Табл. III.4. Задачи B1-BB. Отклонения на FRCZ по k_{eff} (относително) и по относителна мощност по касети от референтното финоклетъчно решение

Задача	δk/k, pcm	min×100	max×100	rms×100
B1	0.2	-0.04	0.04	0.02
B2	0.7	-0.07	0.04	0.03
B3	0.4	-0.06	0.04	0.03
B4	0.9	-0.08	0.04	0.03
B5	0.3	-0.12	0.05	0.04
B6	1.6	-0.06	0.07	0.04
B7	2.0	-0.04	0.06	0.03
B8	1.8	-0.06	0.09	0.04
B9	2.2	-0.07	0.07	0.04
BA	2.3	-0.09	0.09	0.05
BB	6.7	-0.34	0.47	0.21



Фиг. III.4. Двумерна задача ВВ. Разпределение на относителната мощност по касети (FRCZ). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

При този набор от двумерни стационарни задачи за ВВЕР-1000 се наблюдава много добро съгласие между НЗСМ и FRCZ, както и между тях и референтните решения.

III.2.2. Условнокритична задача AER-FCM-101 за ВВЕР-1000

Втората задача е AER-FCM-101 [Schulz, 1996]. Това е стационарна тримерна математическа еталонна задача. Броят касети и стъпката на решетката съответстват на прототипна конструкция на ВВЕР-1000. Горивната област е оградена от отражателни нодове, на чиято външна граница се налагат условия на свободна повърхност. В средната част на централната касета има изгарящ поглътител, а в дванадесет от касетите (в симетрични позиции) са въведени наполовина органи за регулиране. Пълната височина на активната зона е 355 cm. Общият брой на аксиалните слоеве (включващ двата отражателя на долната и горната граници) е 12, като аксиалната стъпка е 35.5 cm. Коефициенти на прекъсване на потока не се прилагат. Стъпката на решетката от касети е 24.1 cm.

Еталонното решение е получено по метода на крайните елементи с програмата CRONOS [Lautard et al., 1990]. Решението е екстраполирано към нулева стъпка на дискретизация и може да бъде намерено в [Kolev et al., 1999].

Задачата AER-FCM-101 се е превърнала в задължителен еталон за проверка на точността на тримерни дифузионни програми.

Материалните константи, необходими за решаването на задача AER-FCM-101, са представени в Табл. III.5.

Табл. III.5. Задача AER-FCM-101. Материални типове и неутронни сечения

тип	D_1, cm	D_2, cm	Σ_1^r, cm^{-1}	Σ_2^r, cm^{-1}	$\Sigma_{1\to2}^s$, cm^{-1}	Σ_1^ν, cm^{-1}	Σ_2^ν, cm^{-1}
A	1.3755E+00	3.8333E-01	2.4135E-02	6.6002E-02	1.5946E-02	4.7663E-03	8.3980E-02
B	1.4095E+00	3.8756E-01	2.4769E-02	7.4988E-02	1.4346E-02	4.7020E-03	8.4128E-02
C	1.3707E+00	3.8028E-01	2.3800E-02	8.0442E-02	1.5172E-02	5.8437E-03	1.1468E-01
D	1.3945E+00	3.8549E-01	2.4069E-02	9.4773E-02	1.3903E-02	6.1632E-03	1.2598E-01
E	1.3694E+00	3.7877E-01	2.3697E-02	8.7681E-02	1.4855E-02	6.3396E-03	1.2998E-01
G	1.3697E+00	3.7911E-01	2.3721E-02	8.5850E-02	1.4927E-02	6.2284E-03	1.2612E-01
R	1.0000E+00	3.3333E-01	4.0644E-02	5.2785E-02	2.4875E-02	0.0000E+00	0.0000E+00

Материален тип B се използва за области с въведен поглътител. Тип R се използва за отражателни нодове. Тип D заема слоевете от 5-ти до 9-ти включително в централната касета и съответства на горивна област с изгарящ поглътител.

Резултатите за НЗСМ при сравнение с еталонното решение са както следва:

– по k_{eff} относителната разлика е -6.8 pcm при референтна стойност 1.049526.

При разпределението на относителната мощност *по нодове*:

– максимална разлика: 1.21E-02 при референтна стойност 1.608;

– минимална разлика: -1.11E-02 при референтна стойност 0.873;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.59E-02

При разпределението на относителната мощност *по касети*:

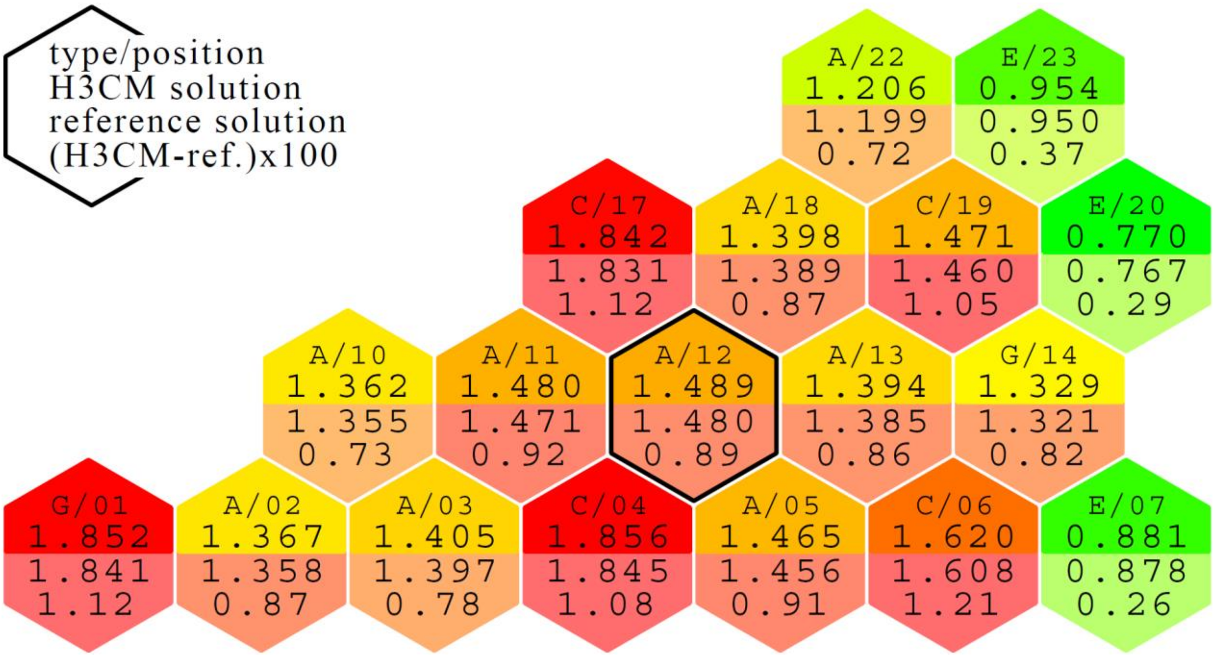
– максимална разлика: 0.28E-02 при референтна стойност 1.014;

– минимална разлика: -0.40E-02 при референтна стойност 0.698;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.24E-02

Външните итерации за задача FCM-101 са 148, а вътрешните итерации (в BiCGSTAB) са средно около 3-4 на една външна итерация за всяка от групите.

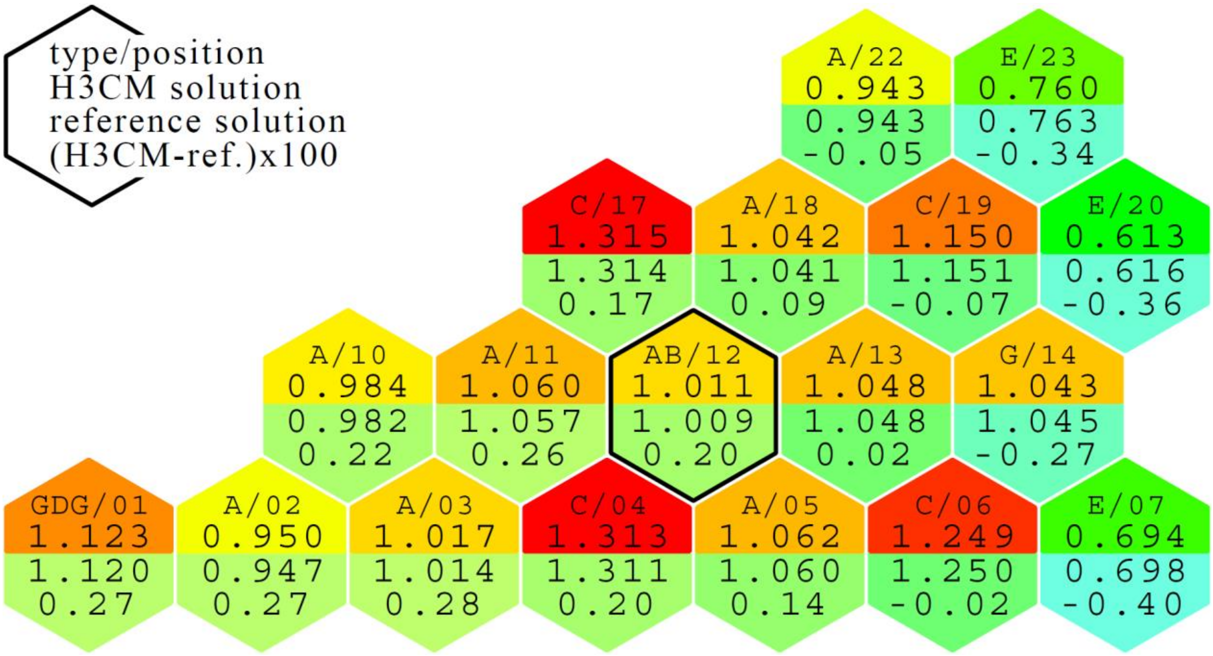
Максималното по модул отклонение е в третия слой на задачата. Разпределението на относителната мощност по нодове в този слой е представено на Фиг. III.5.



Фиг. III.5. Задача AER-FCM-101. Трети слой. Разпределение на относителната мощност по нодове (H3CM). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Означенията за типовете материали на Фиг. III.5 следват означенията в Табл. III.5. На Фиг. III.3 касетата в позиция 12 е с наполовина въведен сноп погълтители.

Разпределението на относителната мощност по касети за задача FCM-101 е представено на Фиг. III.6.



Фиг. III.6. Задача AER-FCM-101. Разпределение на относителната мощност по касети (H3CM). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Решението на задачата FCM-101 с програмата FRCZ дава следните резултати:

– по k_{eff} относителната разлика е 0.08 pcm при референтна стойност 1.049526.

При разпределението на относителната мощност *по нодове*:

– максимална разлика: 0.40E-02 при референтна стойност 1.608;

– минимална разлика: -0.37E-02 при референтна стойност 2.299;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.19E-02

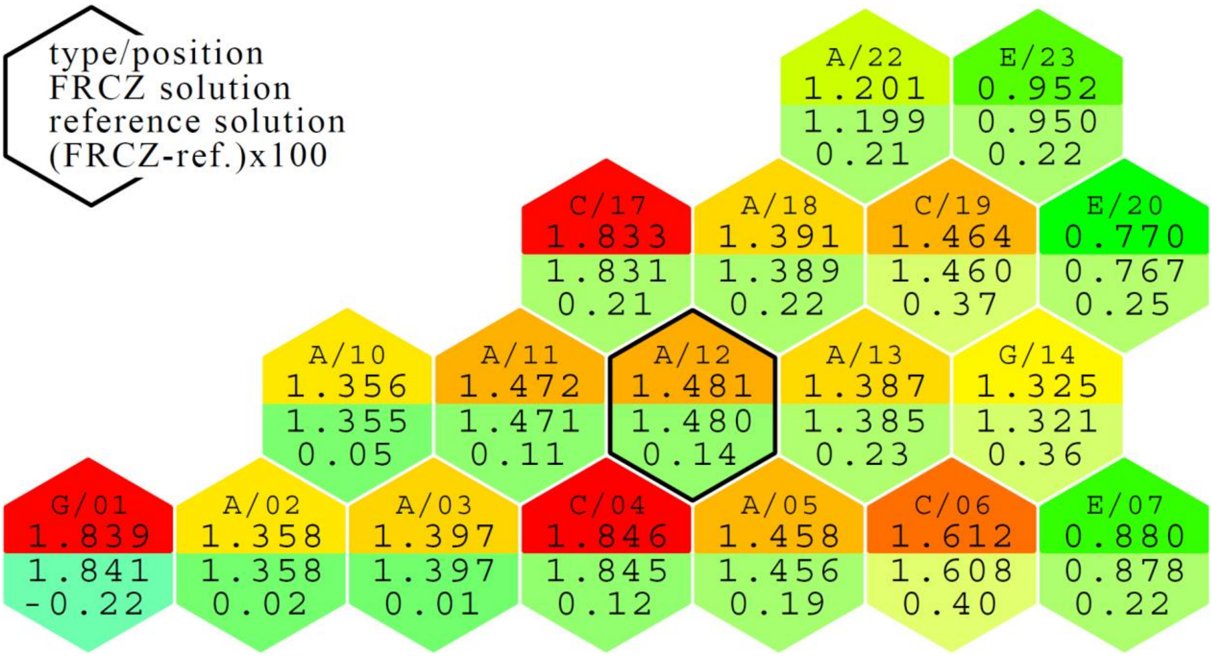
При разпределението на относителната мощност *по касети*:

– максимална разлика: 0.04E-02 при референтна стойност 1.151;

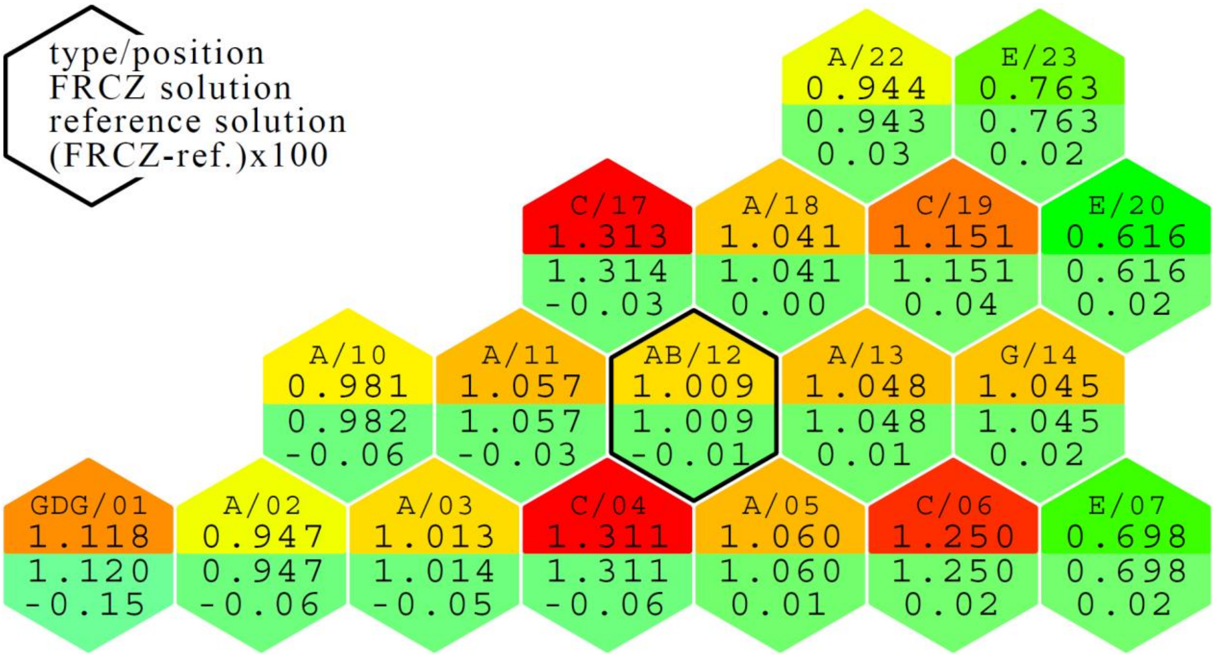
– минимална разлика: -0.15E-02 при референтна стойност 1.120;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.05E-02

Максималното по модул отклонение се намира в третия слой на задачата. Разпределението на относителната мощност по нодове в този слой е представено на Фиг. III.7.



Фиг. III.7. Задача AER-FCM-101. Трети слой. Разпределение на относителната мощността по нодове (FRCZ). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.8. Задача AER-FCM-101. Разпределение на относителната мощност по касети (FRCZ). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

По повод на тази тримерна стационарна задача за ВВЕР-1000 могат да се направят следните коментари:

- НЗСМ демонстрира отлична числена устойчивост и добра сходимост на вътрешните и външните итерации. Решението напълно съвпада с полученото с оригиналния метод HEXNEM3 [Christoskov and Petkov, 2013] и е по-точно от това с методите HEXNEM2 и HEXNEM1 [Bilodid et al., 2018].
- Задачата е успешна проверка на точността на хибридната схема в FRCZ, което е в подкрепа на нейната пригодност за генериране на референтни решения за други тестови задачи.

III.2.3. Условнокритична задача AER-FCM-001 за ВВЕР-440

Третата задача е AER-FCM-001 [Seidel, 1985]. Това е стационарна тримерна математическа еталонна задача за ВВЕР-440. Горивната област е оградена с отражателни нодове, на чиято външна граница се налагат условия от логаритмичен тип: $\alpha = J^{s/w} / \Phi^{s/w} = 0.46948$ за всички външни граници и енергетични групи. Пълната височина на активната зона е 250 cm, а пълният брой аксиални слоеве е 12, всеки с височина 25 cm. Първият и последният слоеве са отражателни. Коефициенти на прекъсване на потока не се прилагат. В 30-градусов сектор на симетрия в позиции 1 и 7 са въведени наполовина поглътители. Стъпката на решетката от касети е 14.7 cm.

Подобно на предходната задача еталонното решение е получено с програмата CRONOS и може да бъде намерено в [Maráczy et al., 1999].

В околностите на поглътителите на ВВЕР-440 се наблюдават големи вариации на потока. Задачата е един допълнителен тест за точността на програмните реализации НЗСМ и FRCZ.

Материалните константи, необходими за решаването на задача AER-FCM-001, са представени в Табл. III.6.

Табл. III.6. Задача AER-FCM-001. Материални типове и неутронни сечения

тип	D_1, cm	D_2, cm	Σ_1^r, cm^{-1}	Σ_2^r, cm^{-1}	$\Sigma_{1\to2}^s$, cm^{-1}	Σ_1^ν, cm^{-1}	Σ_2^ν, cm^{-1}
A	1.3466E+00	3.7169E-01	2.5255E-02	6.4277E-02	1.6893E-02	4.4488E-03	7.3753E-02
B	1.3377E+00	3.6918E-01	2.4709E-02	7.9361E-02	1.5912E-02	5.5337E-03	1.0581E-01
C	1.3322E+00	3.6502E-01	2.4358E-02	1.0010E-01	1.4888E-02	7.0391E-03	1.4964E-01
D	1.1953E+00	1.9313E-01	3.5636E-02	1.3498E-01	2.2264E-02	0.0000E+00	0.0000E+00
R	1.4485E+00	2.5176E-01	3.3184E-02	3.2839E-02	3.2262E-02	0.0000E+00	0.0000E+00
T	1.3413E+00	2.4871E-01	2.9301E-02	6.4655E-02	2.7148E-02	0.0000E+00	0.0000E+00

Материален тип D се използва за области с въведен поглътител. Тип R се използва за радиалните отражателни нодове, а тип T – за аксиалните.

Резултатите за НЗСМ при сравнение с еталонното решение са както следва:

– по k_{eff} относителната разлика е -19 pcm при референтна стойност 1.011325.

При разпределението на относителната мощност по нодове:

– максимална разлика: 1.13E-02 при референтна стойност 1.672;

– минимална разлика: -0.90E-02 при референтна стойност 1.459;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.44E-02

При разпределението на относителната мощност *по касети*:

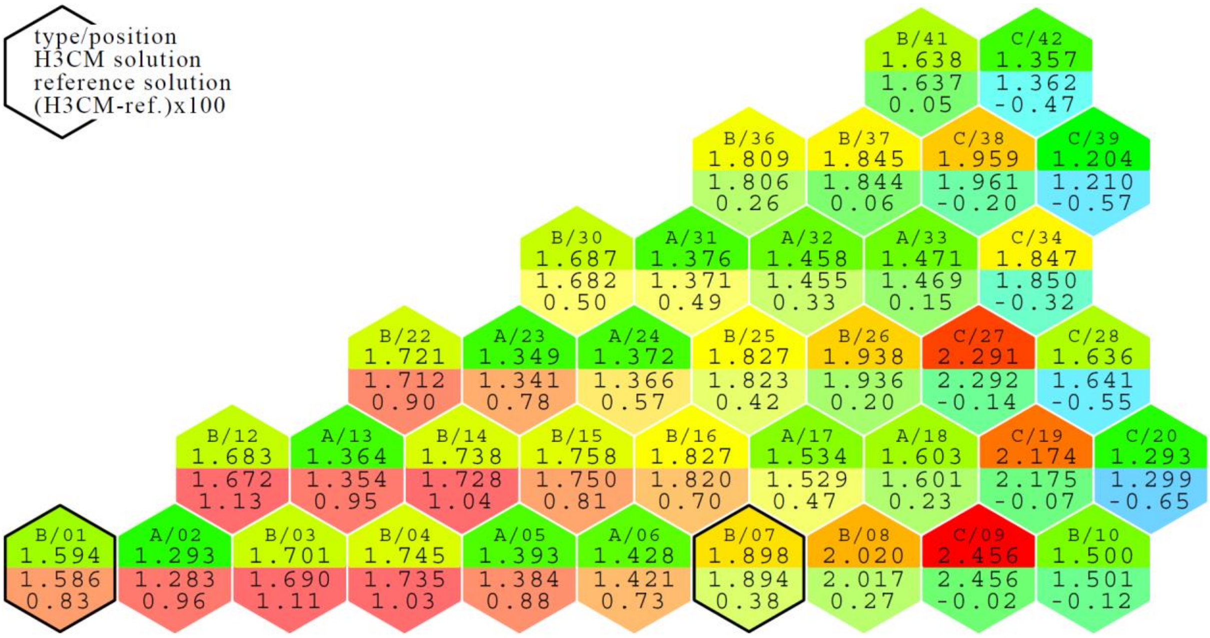
– максимална разлика: 0.55E-02 при референтна стойност 0.992;

– минимална разлика: -0.56E-02 при референтна стойност 0.807;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.34E-02

Външните итерации за задачата FCM-001 са 98, а средният брой вътрешни итерации (в BiCGSTAB) на една външна е типично около 4-5 за всяка от групите.

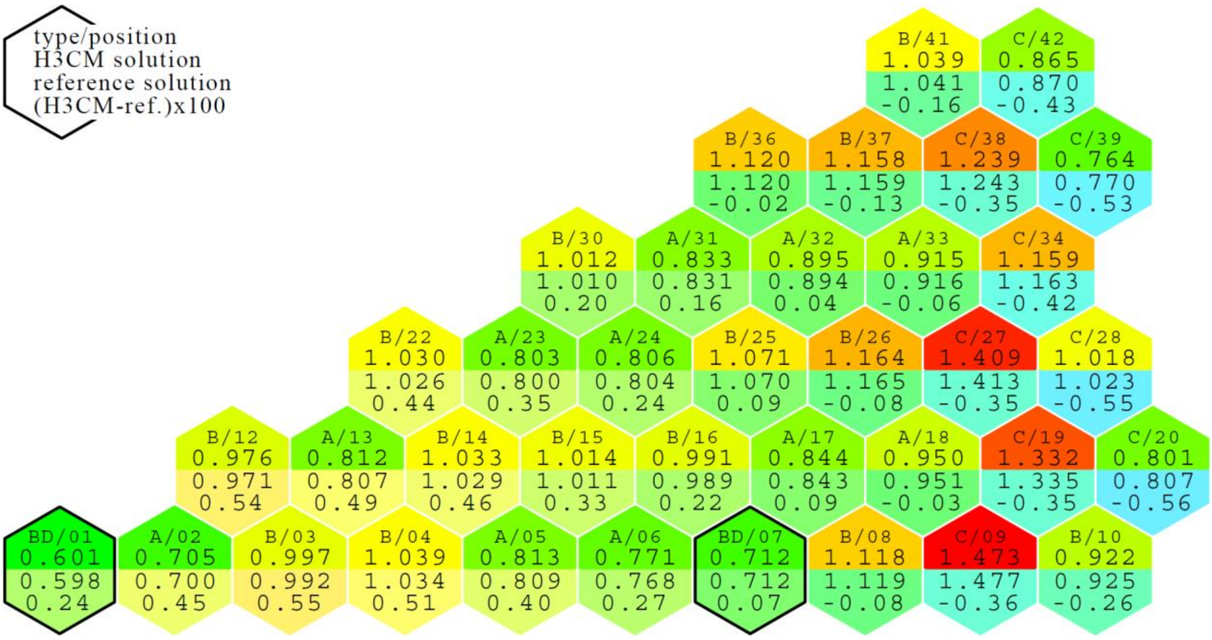
Максималното по модул отклонение се намира в петия слой на задачата. Разпределението на относителната мощност по нодове в този слой е представено на Фиг. III.9.



Фиг. III.9. Задача AER-FCM-001. Пети слой. Разпределение на относителната мощност по нодове (H3CM). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Означенията за типовете материали във Фиг. III.9 следват означенията в Табл. III.6. На Фиг. III.9 в позиции 1 и 7 до средата на активната зона са въведени поглътители.

Разпределението на относителната мощност по касети за задача FCM-001 е представено на Фиг. III.10.



Фиг. III.10. Задача AER-FCM-001. Разпределение на относителната мощност по касети (H3CM). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Решението на задачата FCM-001 с програмата FRCZ дава следните резултати:

– по k_{eff} относителната разлика е -10 pcm при референтна стойност 1.011325.

При разпределението на относителната мощност по нодове:

– максимална разлика: 0.64E-02 при референтна стойност 1.672;

– минимална разлика: -0.58E-02 при референтна стойност 1.610;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.22E-02

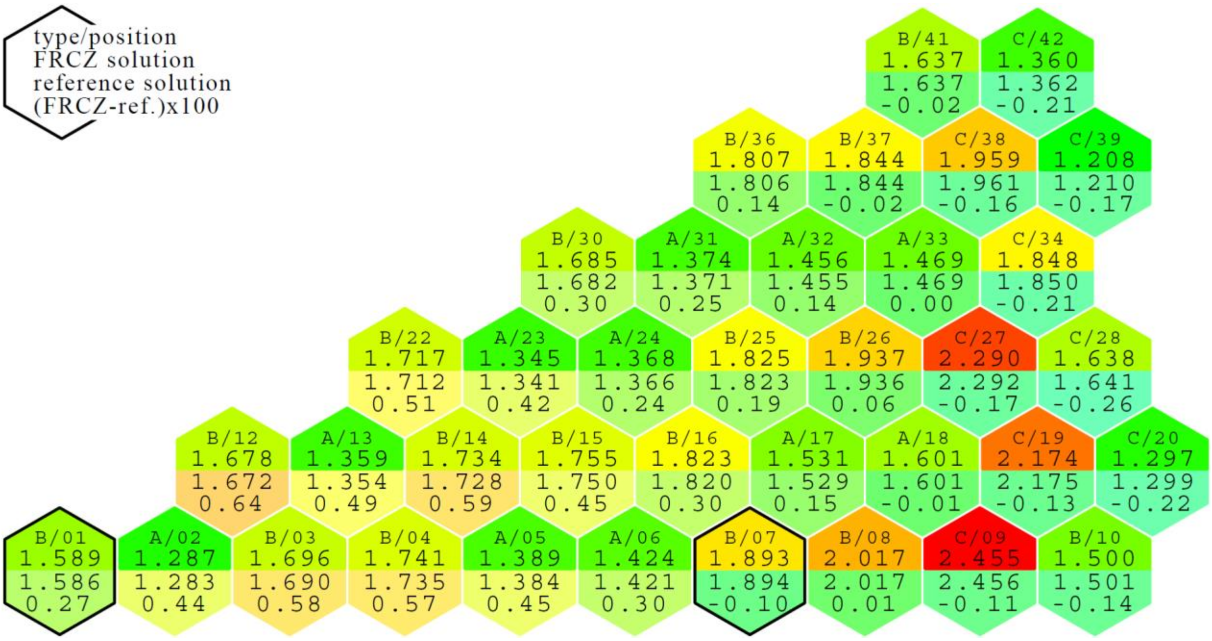
При разпределението на относителната мощност *по касети*:

– максимална разлика: 0.31E-02 при референтна стойност 0.971;

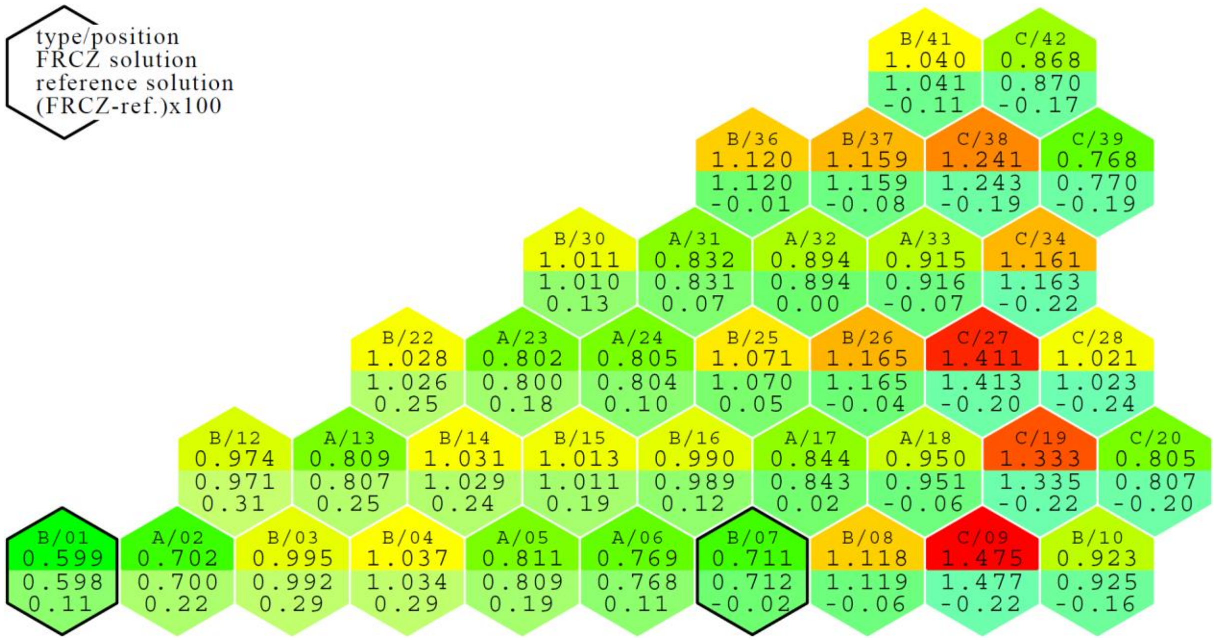
– минимална разлика: -0.24E-02 при референтна стойност 1.023;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.17E-02

Максималното по модул отклонение се намира в петия слой на задачата. Разпределението на относителната мощност по нодове в този слой е представено на Фиг. III.11, а по касети – на Фиг. III.12.



Фиг. III.11. Задача AER-FCM-001. Пети слой. Разпределение на относителната мощност по нодове (FRCZ). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.12. Задача AER-FCM-001. Разпределение на относителната мощност по касети (FRCZ). Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Резултатите от решените дотук тестови задачи позволяват да се направят следните изводи:

- Финоклетъчната програма FRCZ дава резултати много близки до еталонните и това е аргумент в полза на нейната пригодност за генериране на референтни решения за нодалната НЗСМ.
- Допълнителен аргумент е, че след мащабиране на сеченията за генерация на неутрони от делене, така че да се постигне точна критичност, FRCZ в нестационарния си вариант напълно възпроизвежда решението със стационарния вариант. Впрочем същото се отнася и за НЗСМ. Това означава, че при еднаква с НЗСМ организация на нестационарните пресмятания FRCZ може да бъде валидно средство за проверка на точността на представената в дисертацията новосъздадена нестационарна формулировка на метода HEXNEM3.
- ACMFD формулировката на HEXNEM3 (без модално разлагане) напълно запазва свойствата на оригиналния метод, а точността на решението, числената устойчивост и поведението в хода на итериране на практика съвпадат с тези при програмната реализация H3DA на оригиналния метод HEXNEM3 [Христосков, 2013].

III.2.4. Нестационарна задача AER-DYN-001 за ВВЕР-440

Четвъртата задача е AER-DYN-001. Подробно описание на задачата може да бъде намерено в [Keresztúri and Telbisz, 2000]. Това е нестационарна тримерна математическа задача за ВВЕР-440. Тъй като не съществува публикувано точно еталонно решение, за сравнение с НЗСМ ще се използват получените с програмата FRCZ резултати.

Конфигурацията на задачата съвпада с тази за FCM-001. Горивната област е оградена с отражателни нодове, на чиято външна граница се налагат същите условия от логаритмичен тип както при FCM-001. Пълната височина на активната зона е 250 cm, а пълният брой аксиални слоеве е 12, всеки с височина 25 cm. Първият и последният слоеве са отражателни. Коефициенти на прекъсване на потока не се прилагат. Дифузионните константи остават непроменени спрямо FCM-001 с изключение на сечението за генериране на неутрони от делене, което е представено в Табл. III.7.

Табл. III.7. Задача AER-DYN-001. Сечения за генериране на неутрони от делене

тип	Σ_1^ν, cm^{-1}	Σ_2^ν, cm^{-1}
A	4.4488E-03	7.3753E-02
B	5.5337E-03	1.0581E-01
C	7.0391E-03	1.4964E-01
D	0.0000E+00	0.0000E+00
R	0.0000E+00	0.0000E+00
T	0.0000E+00	0.0000E+00

Промяната на сеченията за генериране на неутрони от делене в DYN-001 спрямо тези от FCM-001 е въведена от авторите на нестационарната тестова задача, за да бъде постигнато критично състояние с програмата KIKO3D [Keresztúri and Jakab, 1991] при предписаното начално положение на органите за управление. Разбира се, направената корекция на сеченията не може да гарантира точна критичност при решаване на същата задача с други дифузионни програми. Стандартният подход, който е използван и тук за решаване на нестационарни тестови задачи, е при преход от стационарни към нестационарни пресмятания сечението за генериране на неутрони от делене да бъде разделено на ефективния коефициент на размножение, получен с HЗCM или FRCZ за предписаното начално състояние.

В задачата AER-DYN-001 се симулира изхвърляне на орган за регулиране в горещо състояние на нулева мощност и последващо въвеждане на аварийна защита. Очакваната по условие максимална реактивност е +0.7 – +0.8 $. Достигнатата максимална мощност не е твърде голяма, което позволява задачата да бъде решена без отчитане на реактивностни обратни връзки.

Неутронните скорости в бързата и топлинната групи са съответно 1.25E+7 и 2.50E+5 cm/s. Кинетичните параметри са 6-групови. Относителните дялове на закъсняващите неутрони и константите на разпадане на ядрата-предшественици са представени в Табл. III.8.

Табл. III.8. Задача AER-DYN-001. Данни за шестте групи закъсняващи неутрони

група	1	2	3	4	5	6
β	0.000247	0.001385	0.001222	0.002646	0.000832	0.000169
λ, s^{-1}	0.0127	0.0317	0.1150	0.3110	1.4000	3.8700

Според спецификацията на тестовата задача органите за регулиране са обединени в четири групи. Разпределението на позициите на органите за регулиране в 180-градусов сектор от активната зона (вж. Фиг. III.13) по групи е представено в Табл. III.9.

Табл. III.9. Задача AER-DYN-001. Позиции на органите за регулиране в 180-градусов сектор по групи

група	„21“	„23“	„25“	„26“
позиции	11, 17, 132, 138	2, 8, 14, 20, 73, 76, 182, 191	67, 70, 79, 82, 129, 135, 141, 185, 188	5

Началната височина за групи „21“ и „26“ е 50 cm над долния отражател на реактора. Органите за регулиране от групи „23“ и „25“ в началното състояние са напълно изведени от реактора.

В началното условнокритично състояние при AER-DYN-001 отклоненията на полученото с НЗСМ решение спрямо референтното решение, получено с FRCZ, са както следва:

– по k_{eff} относителната разлика е -11 pcm при референтна стойност 0.9993265.

При разпределението на относителната мощност *по нодове*:

– максимална разлика: 0.39E-2 при референтна стойност 1.222;

– минимална разлика: -0.90E-2 при референтна стойност 1.220;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.22E-2

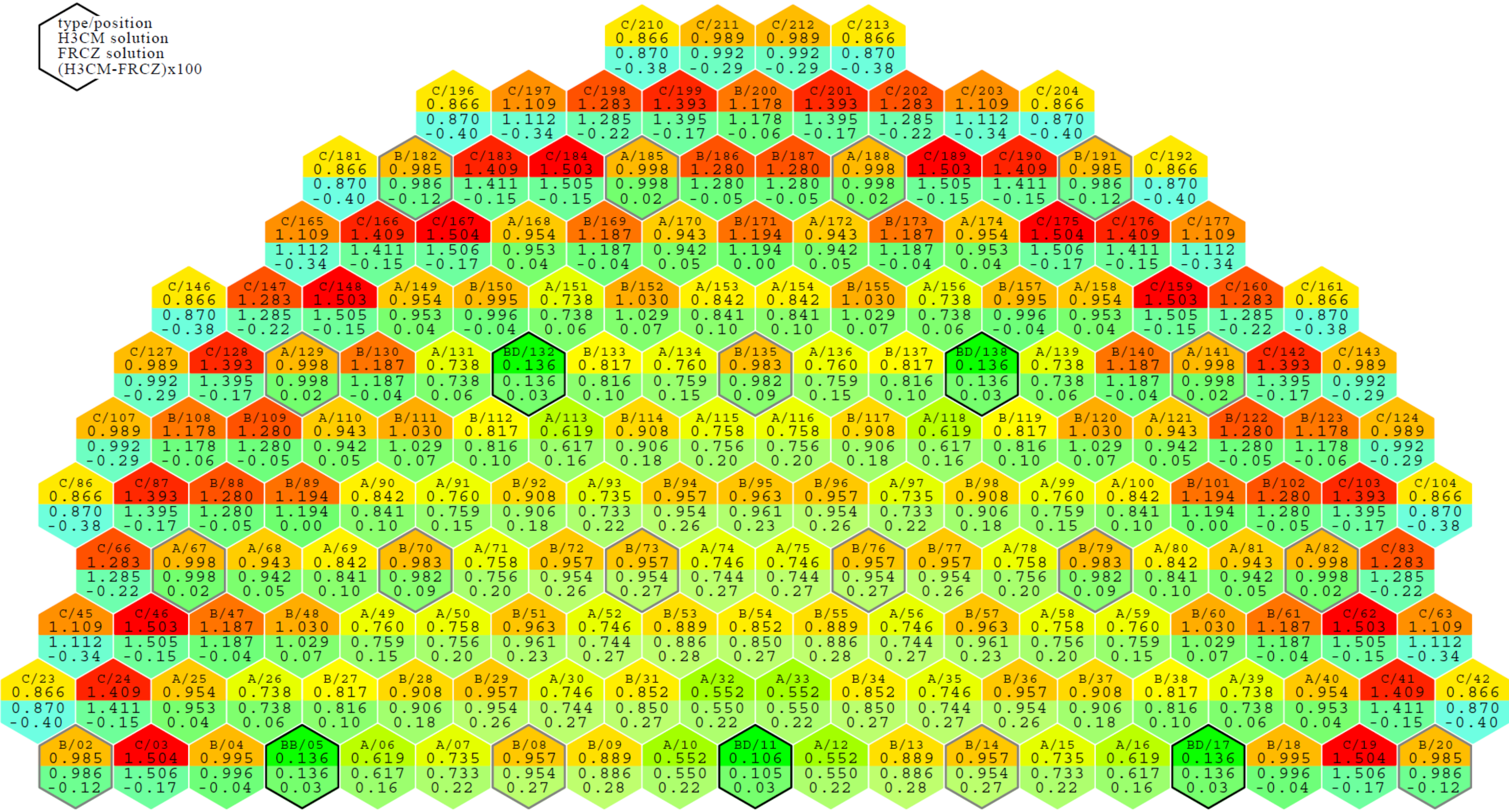
При разпределението на относителната мощност *по касети*:

– максимална разлика: 0.28E-02 при референтна стойност 0.886;

– минимална разлика: -0.40E-02 при референтна стойност 0.870;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.20E-02

Разпределението на относителната мощност по касети в началното условнокритично състояние е представено на Фиг. III.13. Въпреки че началната конфигурация има 30-градусова симетрия, тук е избрано представяне в 180-градусов сектор за съответствие с конфигурацията на нестационарната задача.



Фиг. III.13. Задача AER-DYN-001. Начално условнокритично състояние (t=0 s). Разпределение на относителната мощност по касети. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

На Фиг. III.13 и по-нататък позициите със сив контур съответстват на изцяло изведени от активната зона органи за регулиране. Позициите с черен контур съответстват на частично или изцяло въведени органи за регулиране.

Тъй като по време на движението на регулиращите органи някои от нодовете в задачата ще бъдат с частично въведен поглътител, е нужно дифузионните константи в тези нодове да бъдат хомогенизирани. Най-простият вариант за хомогенизиране в тези случаи е обемно претегляне от вида:

$$\Sigma_{vol} = \frac{\Sigma_{CR} V_{CR} + \Sigma_{noCR} V_{noCR}}{V_{CR} + V_{noCR}}, \qquad \text{(III.2.1)}$$

където Σ_{vol} е хомогенизираното сечение, Σ_{CR} е сечението за материала на поглътителя, Σ_{noCR} е сечението за горивния материал, а V е означение за обем. Дифузионният коефициент се третира като реципрочен на сечение.

Този вид хомогенизация обикновено води до надценяване на приноса на поглътителя в нодовете със смесен състав и до нефизичен ход на амплитудната функция $A = \frac{P}{P_0} = \frac{1}{P_0} \sum_n V_{node} \sum_{g=1}^{2} \Sigma_{Er,g}^n \bar{\Phi}_g^n$.

По-точно хомогенизиране на сеченията може да се постигне чрез претегляне по скорости на реакциите с използване на условнокритични оценки на скаларния поток:

$$\Sigma_{flux} = \frac{\Sigma_{CR} \Phi_{CR} V_{CR} + \Sigma_{noCR} \Phi_{noCR} V_{noCR}}{\Phi_{CR} V_{CR} + \Phi_{noCR} V_{noCR}} = \frac{f_w \Sigma_{CR} V_{CR} + \Sigma_{noCR} V_{noCR}}{f_w V_{CR} + V_{noCR}}, \qquad \text{(III.2.2)}$$

където Φ_{CR} е скаларният поток, пресметнат за условнокритично състояние, в което върхът на поглътителя е на долната граница на нода. Аналогично, Φ_{noCR} съответства на състояние, в което върхът на поглътителя съвпада с горната граница на нода.

За решаване на AER-DYN-001 коефициентите:

$$f_w = \frac{\Phi_{CR}}{\Phi_{noCR}} \qquad \text{(III.2.3)}$$

са получени чрез условнокритични пресмятания с програмата FRCZ и са общи за H3CM и FRCZ. Те са представени в Табл. III.10 за позициите в един 30-градусов сектор на симетрия, но с номерация според Фиг. III.13. Слоеве 1 и 12 са отражателни и за тях не се прилага хомогенизация.

Табл. III.10. Задача AER-DYN-001. Коефициенти f_w за хомогенизиране на дифузионните константи

надтоплинна група

слой / позиц.	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	0.2965	0.2454	0.5177	0.4700	0.4226	0.3910	0.3692	0.3540	0.3472	0.4095
5	0.2862	0.2227	0.4865	0.4532	0.4119	0.3830	0.3626	0.3482	0.3418	0.4032
8	0.2694	0.1872	0.4481	0.4351	0.4011	0.3753	0.3566	0.3429	0.3369	0.3982
11	0.2634	0.1743	0.4352	0.4295	0.3980	0.3732	0.3550	0.3416	0.3357	0.3966
67	0.3307	0.2759	0.5628	0.5072	0.4552	0.4207	0.3970	0.3806	0.3733	0.4401
70	0.2828	0.2139	0.4743	0.4469	0.4080	0.3801	0.3603	0.3462	0.3400	0.4009

топлинна група

слой / позиц.	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	0.2675	0.2216	0.4679	0.4249	0.3822	0.3536	0.3339	0.3201	0.3139	0.3711
5	0.2602	0.2027	0.4424	0.4119	0.3742	0.3479	0.3293	0.3162	0.3104	0.3671
8	0.2448	0.1704	0.4075	0.3955	0.3645	0.3409	0.3238	0.3114	0.3059	0.3624
11	0.2391	0.1584	0.3949	0.3895	0.3608	0.3382	0.3216	0.3094	0.3040	0.3603
67	0.2486	0.2076	0.4245	0.3829	0.3437	0.3177	0.2998	0.2874	0.2818	0.3328
70	0.2567	0.1943	0.4305	0.4053	0.3698	0.3444	0.3264	0.3136	0.3079	0.3642

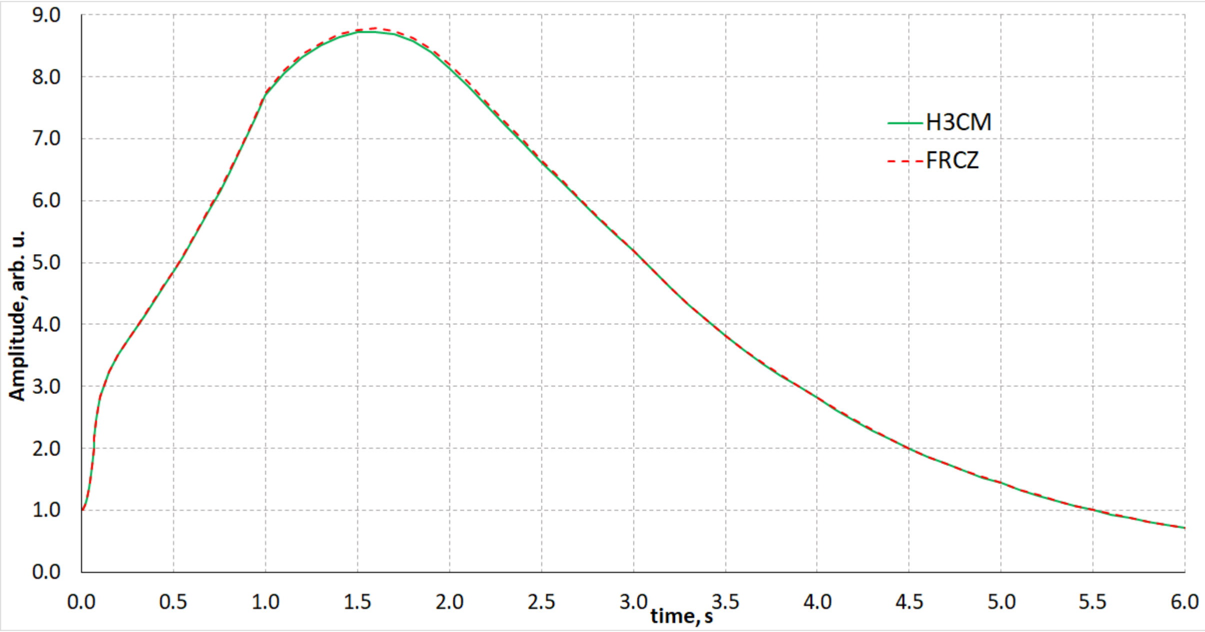
Предписаният за задачата DYN-001 преходен процес протича по следния начин:

– Органът за регулиране „26“, намиращ се в позиция 5 от Фиг. III.13, се изхвърля от активната зона за t=0.08 s с постоянна скорост. Поглътителят се движи заедно с разположената под него горивна наставка на касетата. Тази специфика на органите за регулиране на ВВЕР-440 изисква съответно преместване на материалните характеристики на горивната наставка, включително и на концентрациите на ядрата-предшественици на закъсняващи неутрони.

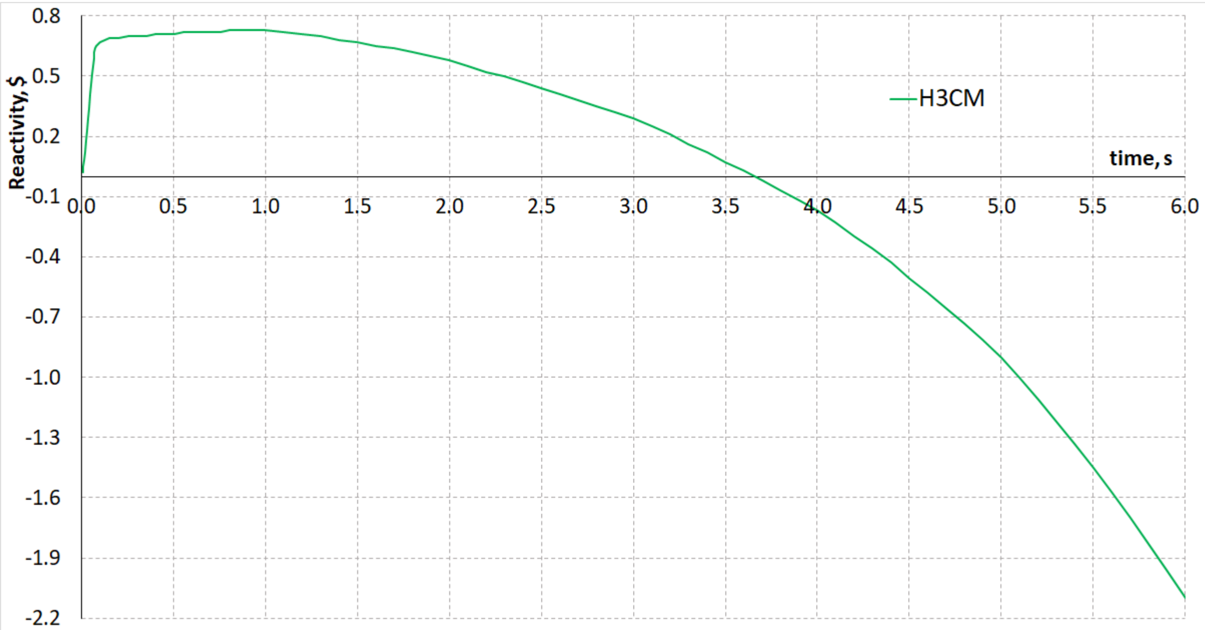
– Аварийната защита на реактора се задейства в момента t=1 s. Всички органи за регулиране, с изключение на „26“ в позиция 5, започват да се спускат в активната зона с постоянна скорост 25.0 cm/s.

– Преходният процес се проследява до t=6 s, когато поглътителите от група „21“ са напълно въведени (още при t=3 s), а тези от групи „23“ и „25“ са въведени до 125 cm над долния отражател.

Ходът на амплитудната функция и на реактивността са представени на Фиг. III.14 и Фиг. III.15.



Фиг. III.14. Задача AER-DYN-001. Ход на амплитудната функция (H3CM vs FRCZ)



Фиг. III.15. Задача AER-DYN-001. Ход на реактивността (H3CM)

Максималното относително отклонение по амплитудна функция на H3CM от FRCZ е -0.7 %. Максималната стойност на амплитудната функция за H3CM е 8.730 и се получава в момента t=1.6 s. Максималната реактивност е +0.73 $ в момента t=1.0 s.

По време на изхвърлянето до t=0.08 s стъпката по време е 5E-3 s; след това до t=0.1 s стъпката е 1E-2 s; след това до t=1.0 s стъпката е 5E-2 s; след това до края на процеса t=6.0 s стъпката е 1E-1 s.

За H3CM и задачата AER-DYN-001 средният брой външни итерации (по амплитудна функция, величини {ω} и сдвояващи коефициенти) на една стъпка по време е около 6-7. Средният брой вътрешни итерации (в BiCGSTAB) на една външна е около 30.

В Табл. III.11 са представени отклоненията на H3CM от FRCZ по относителна мощност за различни моменти от преходния процес.

Табл. III.11. Задача AER-DYN-001. Отклонения по относителна мощност. (H3CM–FRCZ)

по нодове

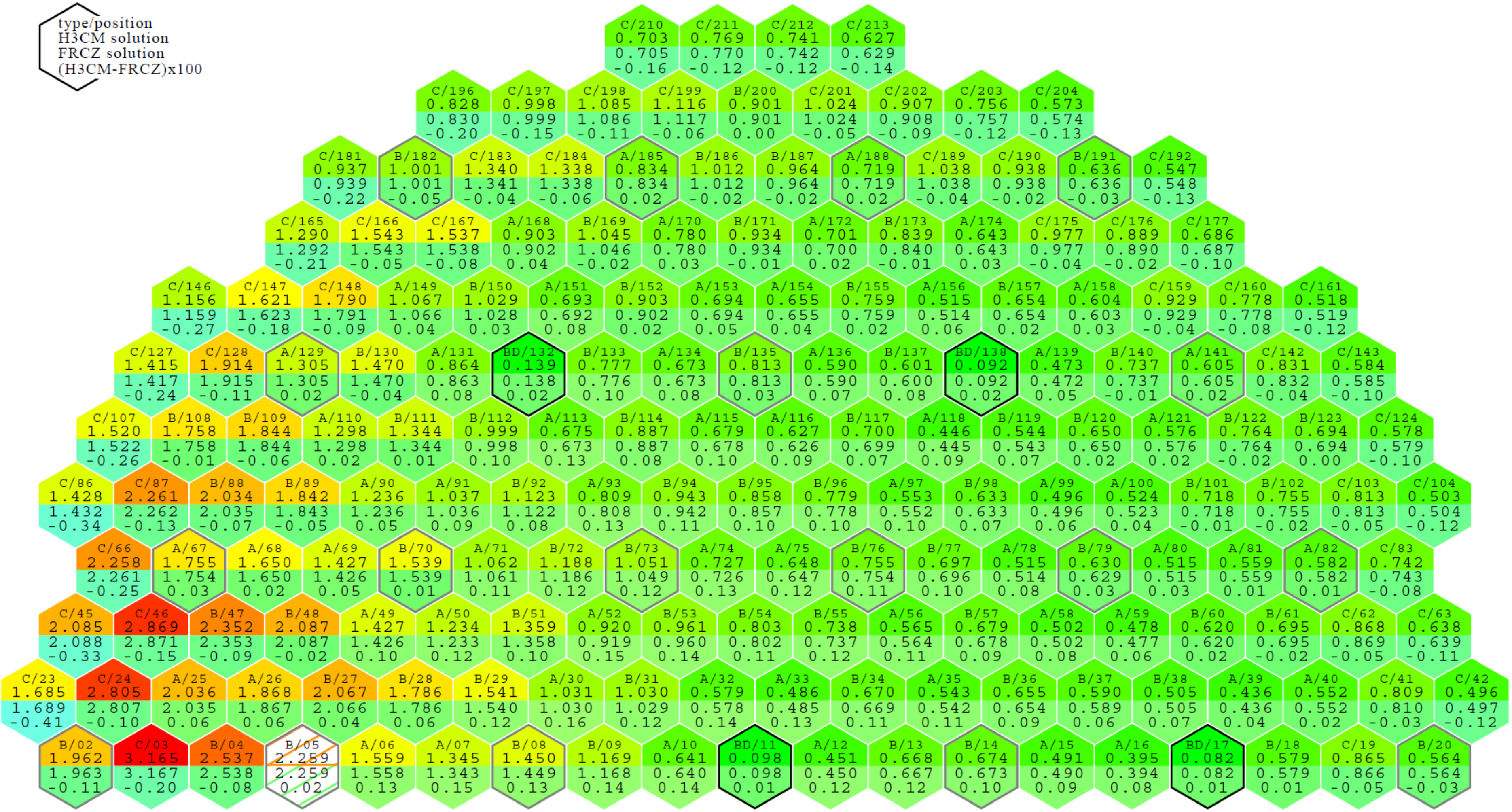
t, s	0.04	0.08	1.0	3.0	6.0
max×100	0.36	0.26	0.20	0.26	0.56
min×100	-0.40	-0.63	-0.86	-1.05	-1.32
rms×100	0.13	0.12	0.15	0.17	0.23

по касети

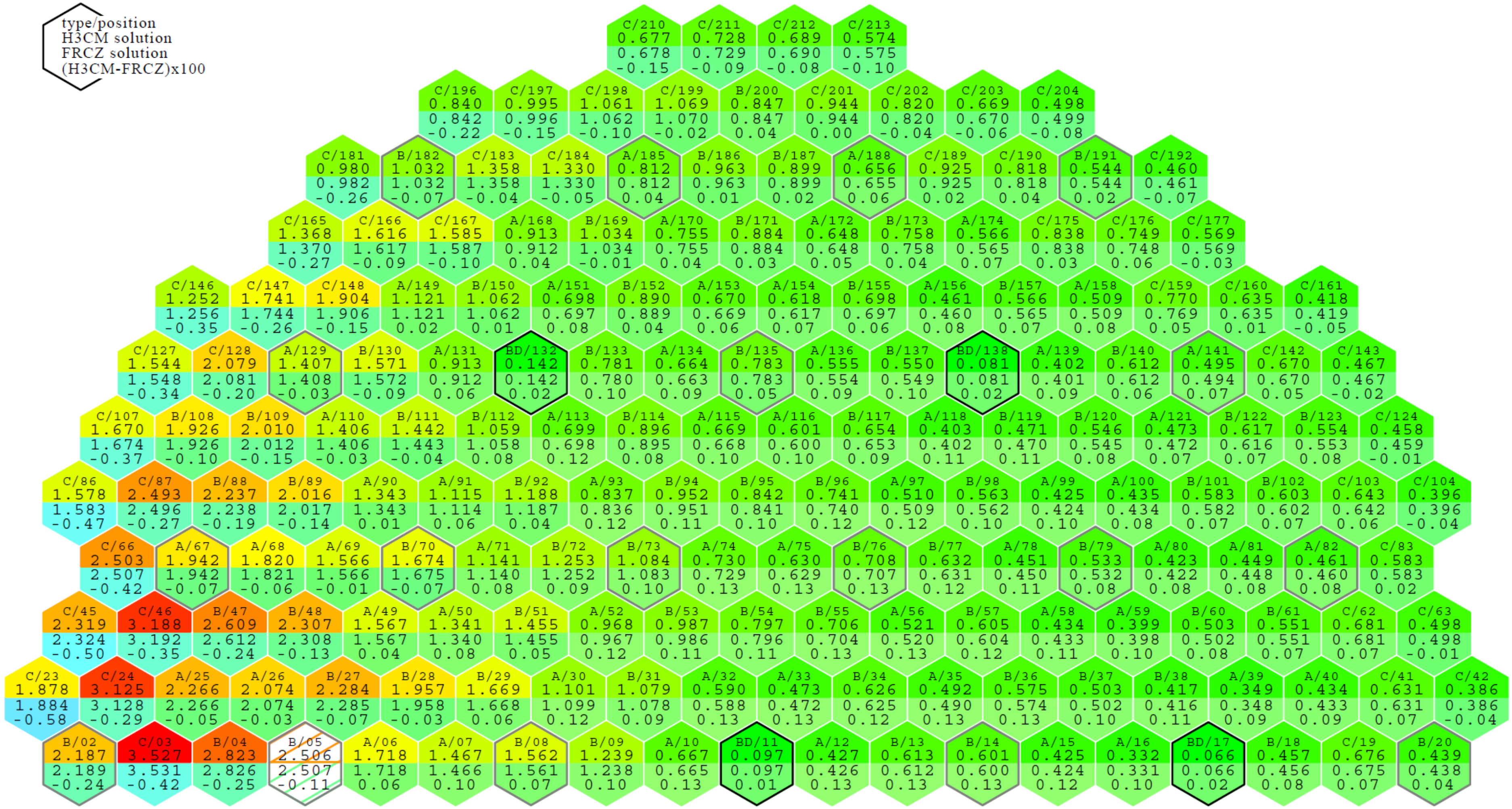
t, s	0.04	0.08	1.0	3.0	6.0
max×100	0.16	0.16	0.13	0.14	0.11
min×100	-0.27	-0.41	-0.52	-0.61	-0.52
rms×100	0.11	0.11	0.14	0.15	0.13

Разпределенията на относителната мощност по касети за моментите t=0.08 s, t=1.0 s и t=6.0 s са представени на Фиг. III.16, Фиг. III.17 и Фиг. III.18. Позицията на изхвърления орган за регулиране е защрихована.

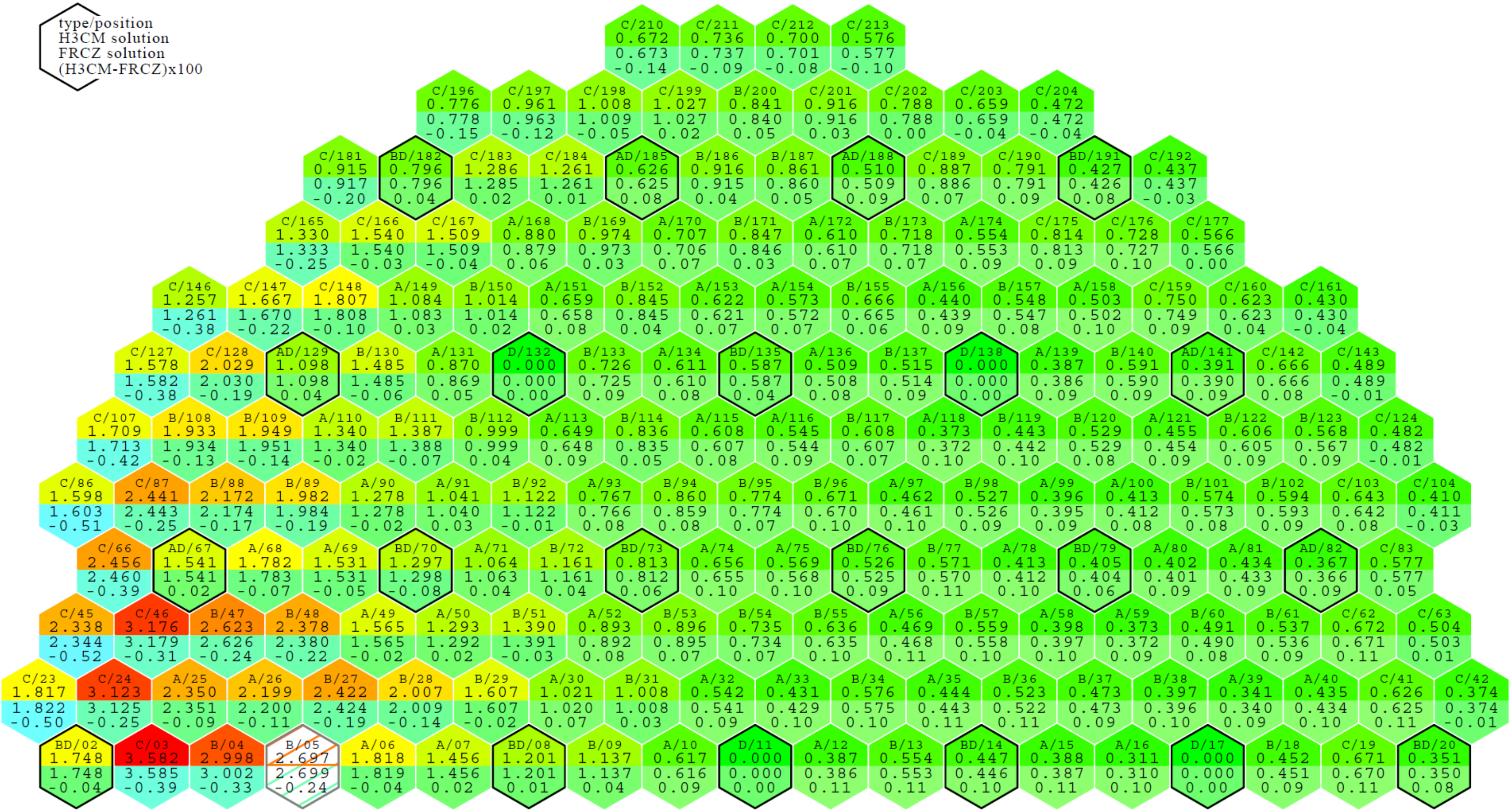
С отчитане на твърдостта на породената от нестационарната двугрупова дифузионна задача система от диференциални уравнения, на особеностите на ВВЕР-440, при който се наблюдават големи вариации на неутронния поток в околностите на органите за регулиране, и на сложния преходен процес при AER-DYN-001, трябва изрично да се изтъкне, че методът HEXNEM3 в модална ACMFD формулировка проявява много добра сходимост и числена устойчивост, при което получените с неговата програмна реализация H3CM резултати са в много добро съгласие с референтното финоклетъчно решение с FRCZ.



Фиг. III.16. Задача AER-DYN-001. Разпределение на относителната мощност по касети в момента *t*=0.08 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.17. Задача AER-DYN-001. Разпределение на относителната мощност по касети в момента *t*=1.0 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.18. Задача AER-DYN-001. Разпределение на относителната мощност по касети в момента t=6.0 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

III.2.5. Нестационарна задача AER-DYN-002 за ВВЕР-440

Петата задача е AER-DYN-002. Подробно описание на задачата може да бъде намерено в [Grundmann, 2000]. Това е нестационарна тримерна математическа задача за ВВЕР-440. Подобно на предходната задача, за нея не съществува публикувано точно еталонно решение. Затова за сравнение с НЗСМ ще се използват получените с програмата FRCZ резултати.

Преходният процес в задачата DYN-002 симулира изхвърляне на орган за регулиране от активната зона на ВВЕР-440. За разлика от предходната задача, тук аварийна защита не се задейства. Неограниченото нарастване на топлинната мощност се спира от отрицателната доплерова реактивностна обратна връзка по температура на горивото.

Според спецификацията на задачата нагряването на ядреното гориво се приема за адиабатно. Реактивностната обратната връзка по температура на горивото е чрез връзката:

$$\Sigma_{f,2}^{n}\left(t\right)=\Sigma_{f,2}^{n,0}\left[1+\gamma\left(\sqrt{T_{f}^{n}\left(t\right)}-\sqrt{T_{f,0}}\right)\right], \qquad \text{(III.2.4)}$$

където $\Sigma_{f,2}^{n}$ е сечението за делене в топлинната група, *n* е нодален индекс, $T_{f,0}=260\ {}^{\circ}C$ е началната температура на горивото, а $\gamma=-7.228\cdot10^{-4}$ е константа с размерност $1/\sqrt{{}^{\circ}C}$. Приема се, че γ и $T_{f,0}$ са глобални константи за активната зона.

Важни за задачата характеристики на активната зона и горивото са представени в Табл. III.12.

Табл. III.12. Задача AER-DYN-002. Характеристики на активната зона и горивото

Стъпка на решетката от касети	14.7 cm
Височина на активната зона	250 cm
Брой горивни елементи в касетата	126
Външен диаметър на горивната таблетка	0.76 cm
Вътрешен диаметър на горивната таблетка	0.14 cm
Плътност на горивния материал	10.4 g/cm^3
Специфичен топлинен капацитет на горивото	0.3 J/(g °C)

За да се постигне желаната от авторите на задачата максимална реактивност (близо +2 $) е увеличено двугруповото сечение за поглъщане на неутрони за материала на поглътителя (тип D) – съответно 0.2 и 0.8 cm^{-1}, а дяловете на закъсняващите неутрони са мащабирани така, че β да се намали от 0.65 % на 0.5 % Аналогично на предходната задача, сеченията за генериране на неутрони от делене са леко модифицирани спрямо тези в FCM-001 (умножени по 1.0043), така че да се постигне начална критичност при предписаното положение на органите за регулиране. Всички останали неутронни сечения остават непроменени. Модифицираните сечения за DYN-002 са представени в Табл. III.13.

Табл. III.13. Задача AER-DYN-002. Неутронни сечения

тип	Σ_1^{ν}, cm^{-1}	Σ_2^{ν}, cm^{-1}	Σ_1^{r}, cm^{-1}	Σ_2^{r}, cm^{-1}
A	4.4681E-03	7.4070E-02	2.5255E-02	6.4277E-02
B	5.5576E-03	1.0626E-01	2.4709E-02	7.9361E-02
C	7.0693E-03	1.5029E-01	2.4358E-02	1.0010E-01
D	0.0000E+00	0.0000E+00	2.2226E-01	8.0000E-01

Друга съществена разлика спрямо предходната задача е използването на албедни гранични условия (вместо отражателни нодове) на радиалната и аксиалната граници на активната зона. В условието на задачата са дефинирани две диагонални албедни матрици – по една за радиалния и аксиалния отражатели. Те са представени в Табл. III.14.

Табл. III.14. Задача AER-DYN-002. Албедни гранични условия

отражател	$1 \to 1$	$2 \to 2$
радиален	0.18732	-0.081293
аксиален	0.19984	-0.012173

Тук албедните коефициенти свързват средния за външната стена нетен ток със средния за стената скаларен поток, т.е. $\alpha_g = J_g^{s/w} \big/ \Phi_g^{s/w}$.

Неутронните скорости в бързата и топлинната групи остават непроменени, съответно 1.25E+7 и 2.50E+5 cm/s. Кинетичните параметри са представени в Табл. III.15.

Табл. III.15. Задача AER-DYN-002. Кинетични параметри

група	1	2	3	4	5	6
β	0.000190	0.001065	0.000940	0.002035	0.000640	0.000130
λ, s^{-1}	0.0127	0.0317	0.1150	0.3110	1.4000	3.8700

Позициите на органите за регулиране са според Фиг. III.21. Началната височина на поглътителите е 50 cm над дъното на активната зона.

Описанието на преходния процес е както следва:

– При начално горещо състояние на нулева мощност органът за регулиране в позиция 4 (Фиг. III.21) се изхвърля от активната зона за 0.16 s с постоянна скорост. Началната мощност на реактора е 1.375 kW.

– Горивото се нагрява адиабатно и се прилага реактивностната обратна връзка (III.2.4).

В Табл. III.16 са представени коефициентите f_w (III.2.3), използвани при решаването на AER-DYN-002 с HЗCM и FRCZ.

Табл. III.16. Задача AER-DYN-002. Коефициенти f_w за хомогенизиране на дифузионните константи по слоеве (от 1-ви до 10-ти)

група	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0.1714	0.1376	0.1178	0.1122	0.1229	0.1334	0.1368	0.1363	0.1342	0.1416
2	0.0439	0.0363	0.0313	0.0298	0.0327	0.0356	0.0365	0.0364	0.0358	0.0376

Условието на задачата изисква преходният процес да се проследи до момента t=2.0 s. За да се опише добре ходът на амплитудната функция, е необходимо да се правят малки стъпки по време (напр. Δt=0.001 s). За целите на настоящото изследване преходният процес е проследен до t=0.4 s. Този момент също е значително след пика на мощността и характеризира достатъчно добре решението на задачата. Причина за този избор е големият изчислителен ресурс необходим на FRCZ. По същата причина, за настоящата задача финоклетъчното решение с FRCZ е с увеличена до около 6 mm стъпка на разбиване на шестостенните нодове на триъгълни призми. Според направените допълнителни изследвания това не се отразява съществено на точността на финоклетъчното решение, но многократно съкращава изчислителното време за получаване на референтно решение за НЗСМ.

В началното условнокритично състояние разликите между полученото с НЗСМ решение и референтното решение с FRCZ са както следва:

– по k_{eff} относителната разлика е -13 pcm при референтна стойност 0.9981274.

При разпределението на относителната мощност *по нодове*:

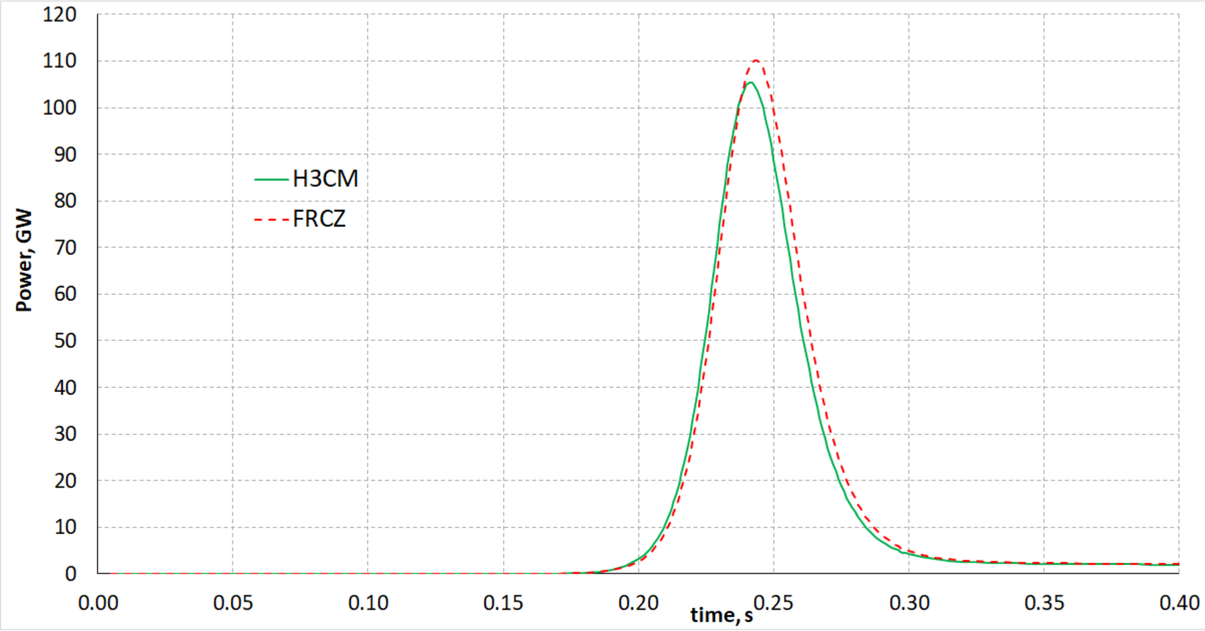
– максимална разлика: 0.69E-2 при референтна стойност 1.058;
– минимална разлика: -0.80E-2 при референтна стойност 0.795;
– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.28E-2

При разпределението на относителната мощност *по касети*:

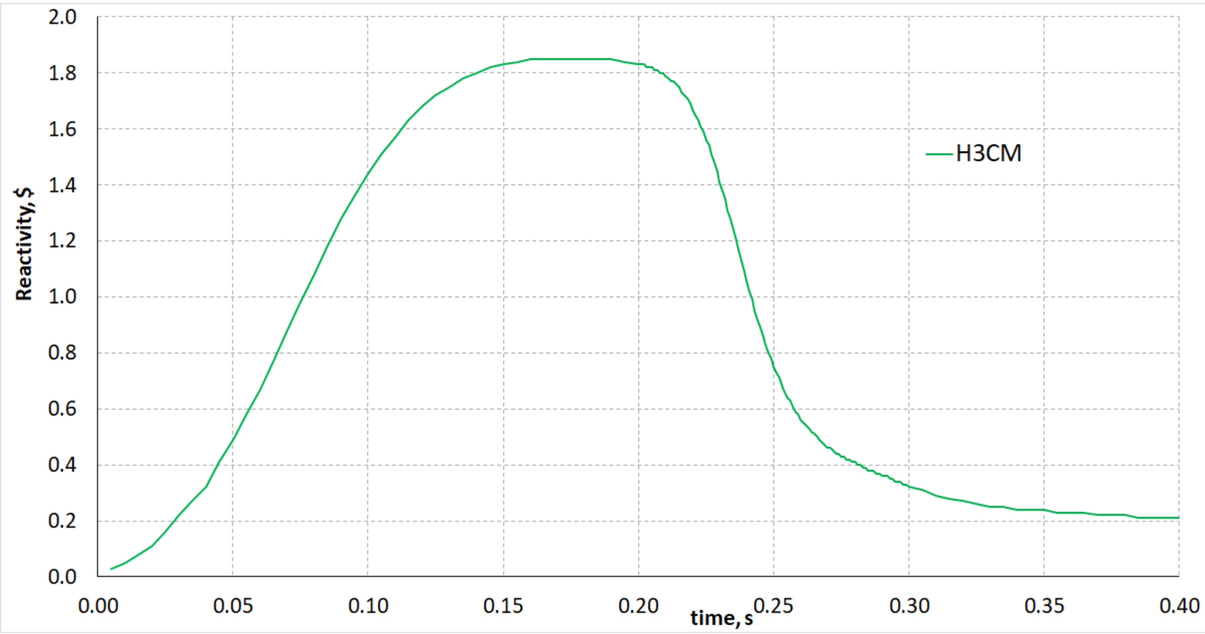
– максимална разлика: 0.12E-02 при референтна стойност 1.275;
– минимална разлика: -0.23E-02 при референтна стойност 0.843;
– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.08E-02

Разпределението на относителната мощност по касети за началното условнокритично състояние е представено на Фиг. III.21.

Ходът на пълната мощност и на реактивността са представени на Фиг. III.19 и Фиг. III.20.



Фиг. III.19. Задача AER-DYN-002. Ход на пълната мощност (H3CM vs FRCZ)



Фиг. III.20. Задача AER-DYN-002. Ход на реактивността (H3CM)

Максималната мощност при H3CM е 105.4 GW и се достига в момента t=0.241 s. При FRCZ максималната мощност е 110.1 GW и се достига в момента t=0.243 s. Максималната достигната реактивност за процеса е +1.85 $. Максималната достигната температура на горивото (в момента t=0.4 s) за H3CM е 2176 °C, а за FRCZ е 2155 °C.

По време на изхвърлянето и след това до t=0.2 s стъпката по време е 5E-3 s; след това до t=0.3 s стъпката е 1E-3 s; след това до края на процеса t=0.4 s стъпката е 5E-3 s.

За H3CM и задачата AER-DYN-002 средният брой външни итерации (по амплитудна функция, величини {ω}, сдвояващи коефициенти, температура на горивото и реактивностна обратна връзка чрез (III.2.4)) са типично около 5-6 на една стъпка по време. Вътрешните итерации (в BiCGSTAB) са средно около 25 на една външна итерация.

В Табл. III.17 са представени отклоненията на H3CM от FRCZ по относителна мощност за различни моменти от преходния процес.

Табл. III.17. Задача AER-DYN-002. Отклонения по относителна мощност. (H3CM–FRCZ)

по нодове

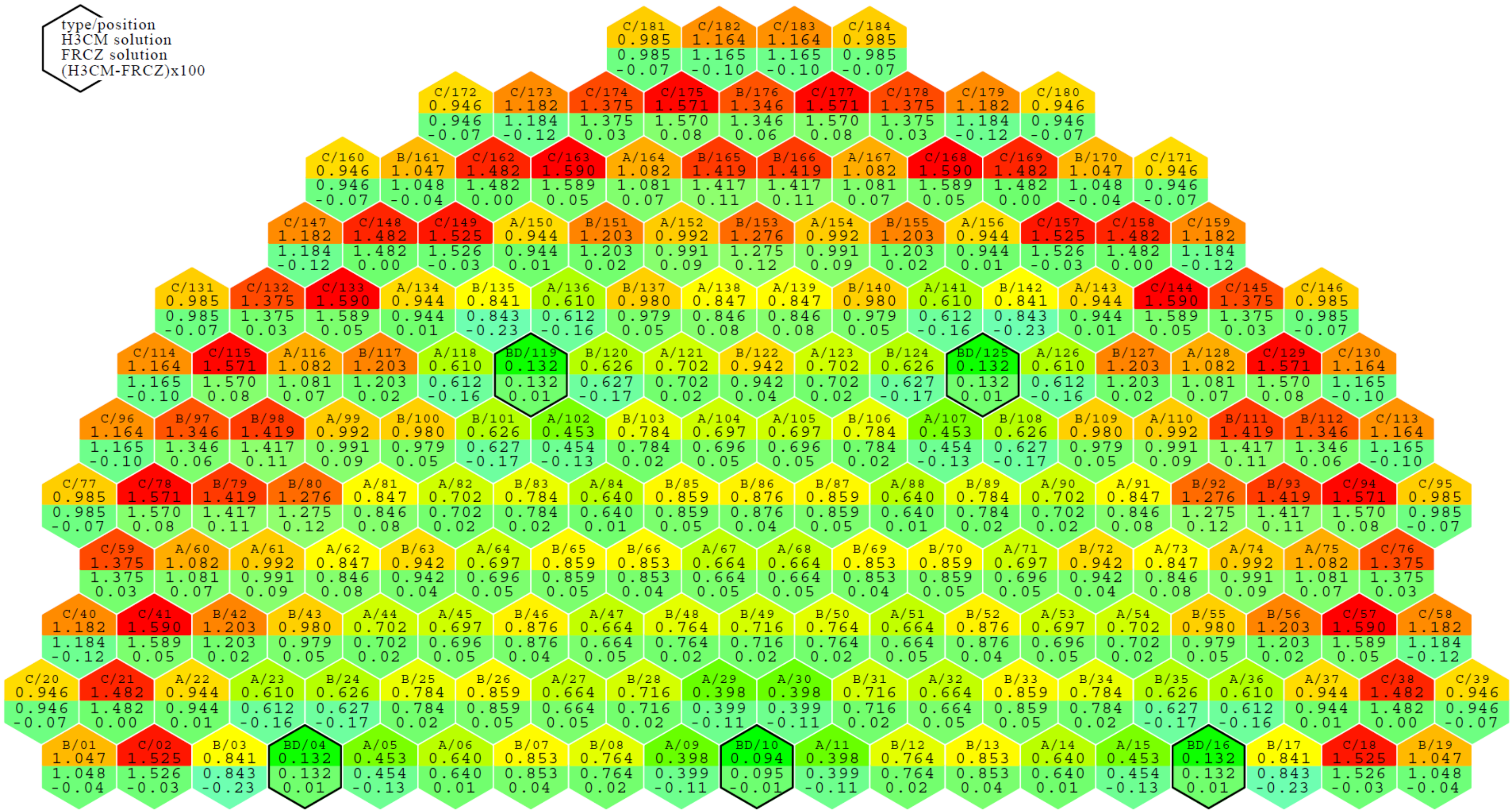
t, s	0.16	0.24 (P_{max})	0.4
max×100	2.25	1.66	0.90
min×100	-2.48	-2.59	-2.12
rms×100	0.47	0.51	0.36

по касети

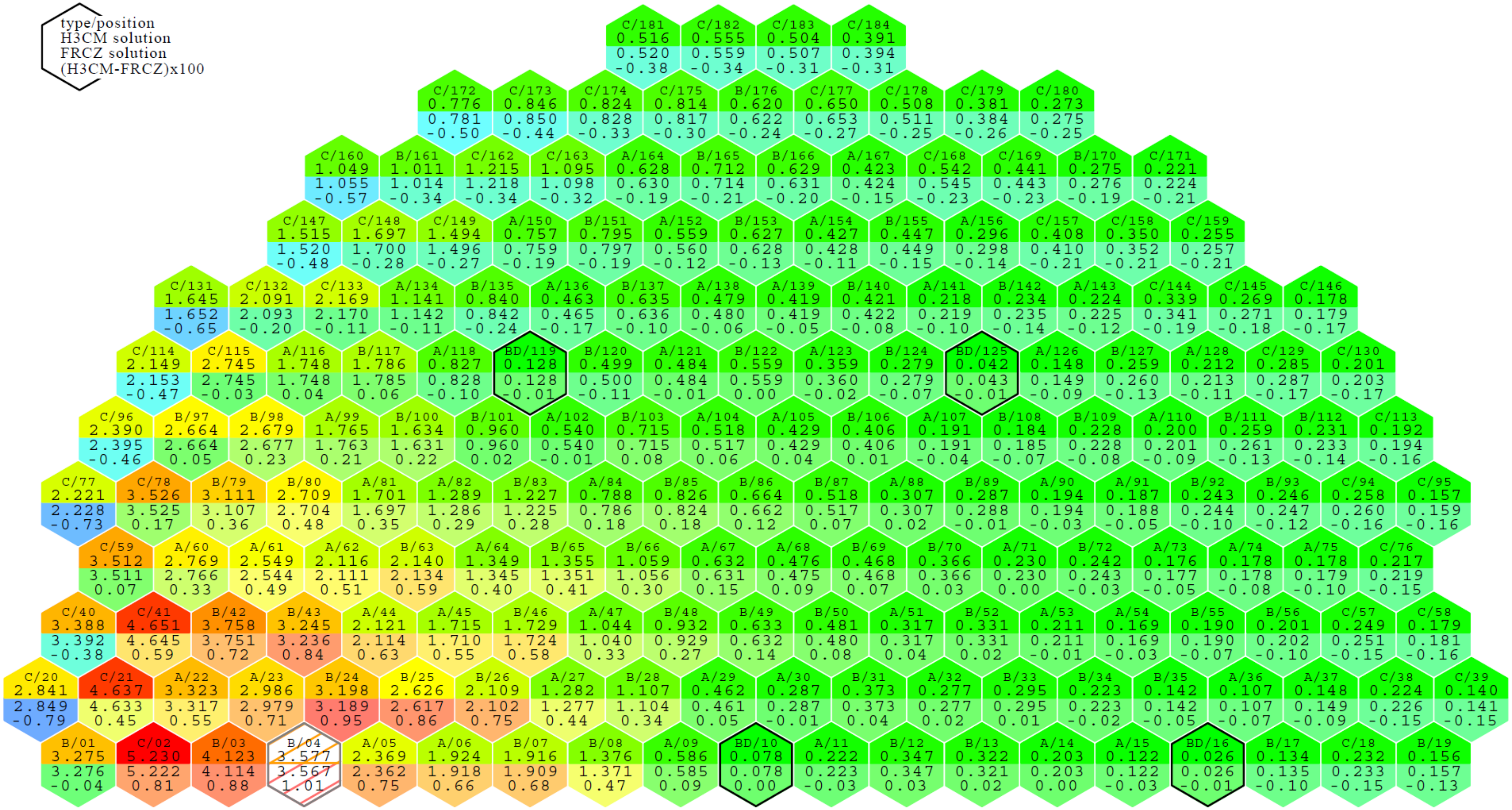
t, s	0.16	0.24 (P_{max})	0.4
max×100	1.01	0.69	0.54
min×100	-0.79	-1.12	-0.91
rms×100	0.32	0.29	0.24

Разпределението на относителната мощност по касети за моментите t=0.16 s, t=0.24 s (максимум на мощността) и t=0.4 s са представени на Фиг. III.22, Фиг. III.23 и Фиг. III.24. Позицията на изхвърления орган за регулиране е защрихована.

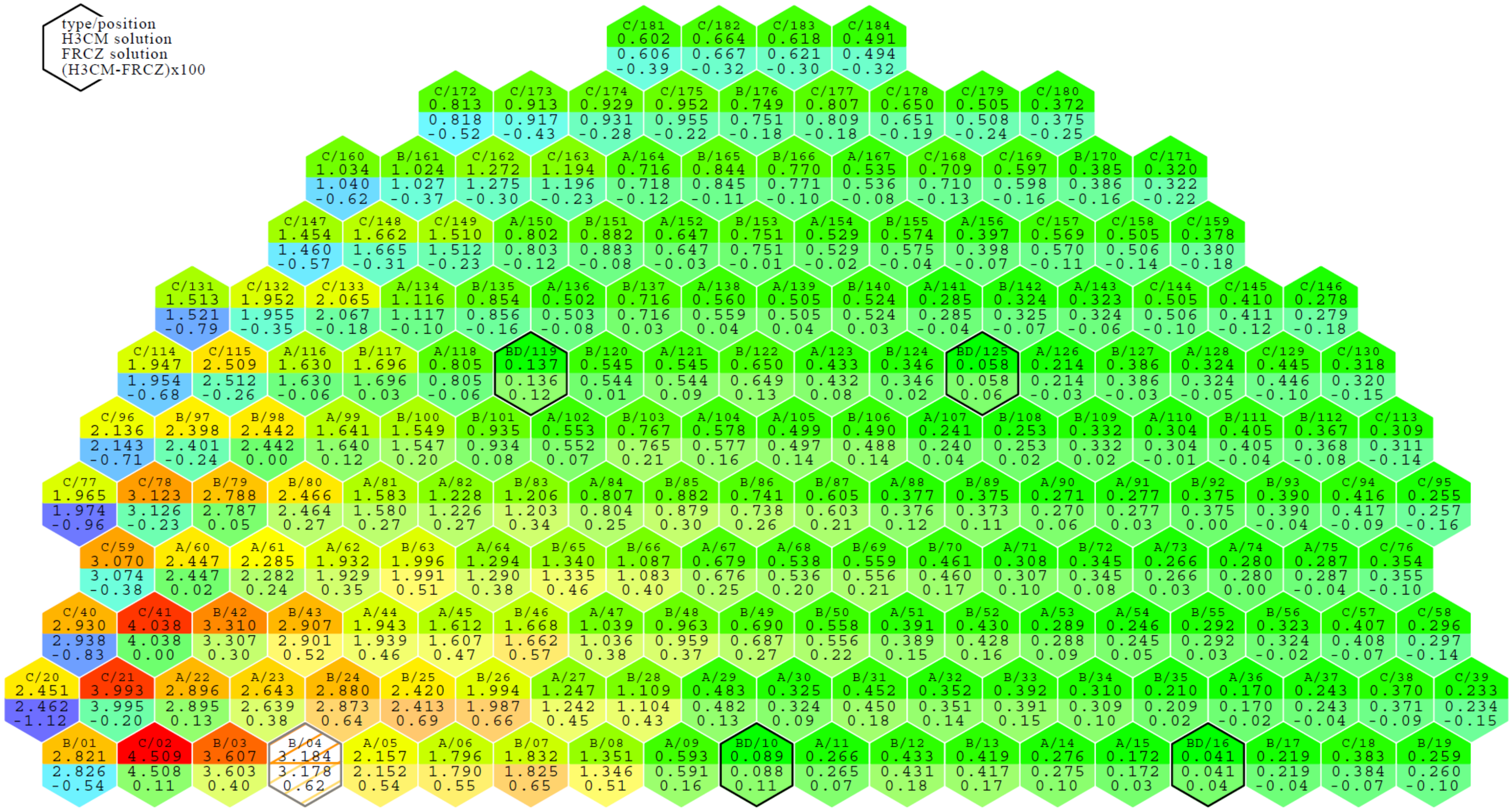
Максимални отклонения от референтното решение се натрупват в деветия аксиален слой на задачата. Разпределението на относителната мощност в този слой за моментите t=0.16 s, t=0.24 s (максимум на мощността) и t=0.4 s са представени на Фиг. III.25, Фиг. III.26 и Фиг. III.27.



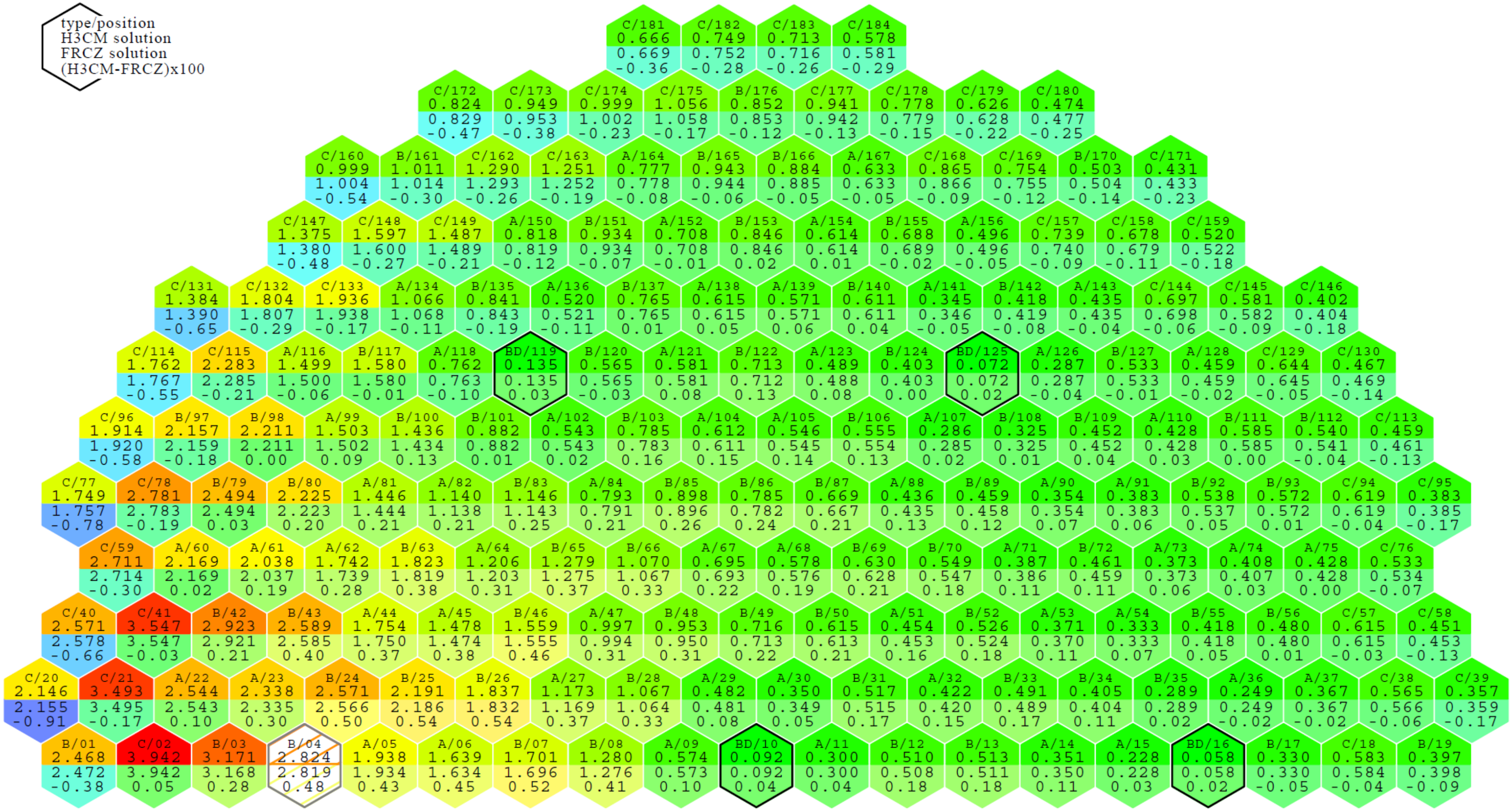
Фиг. III.21. Задача AER-DYN-002. Начално условнокритично състояние (*t*=0 s). Разпределение на относителната мощност по касети. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



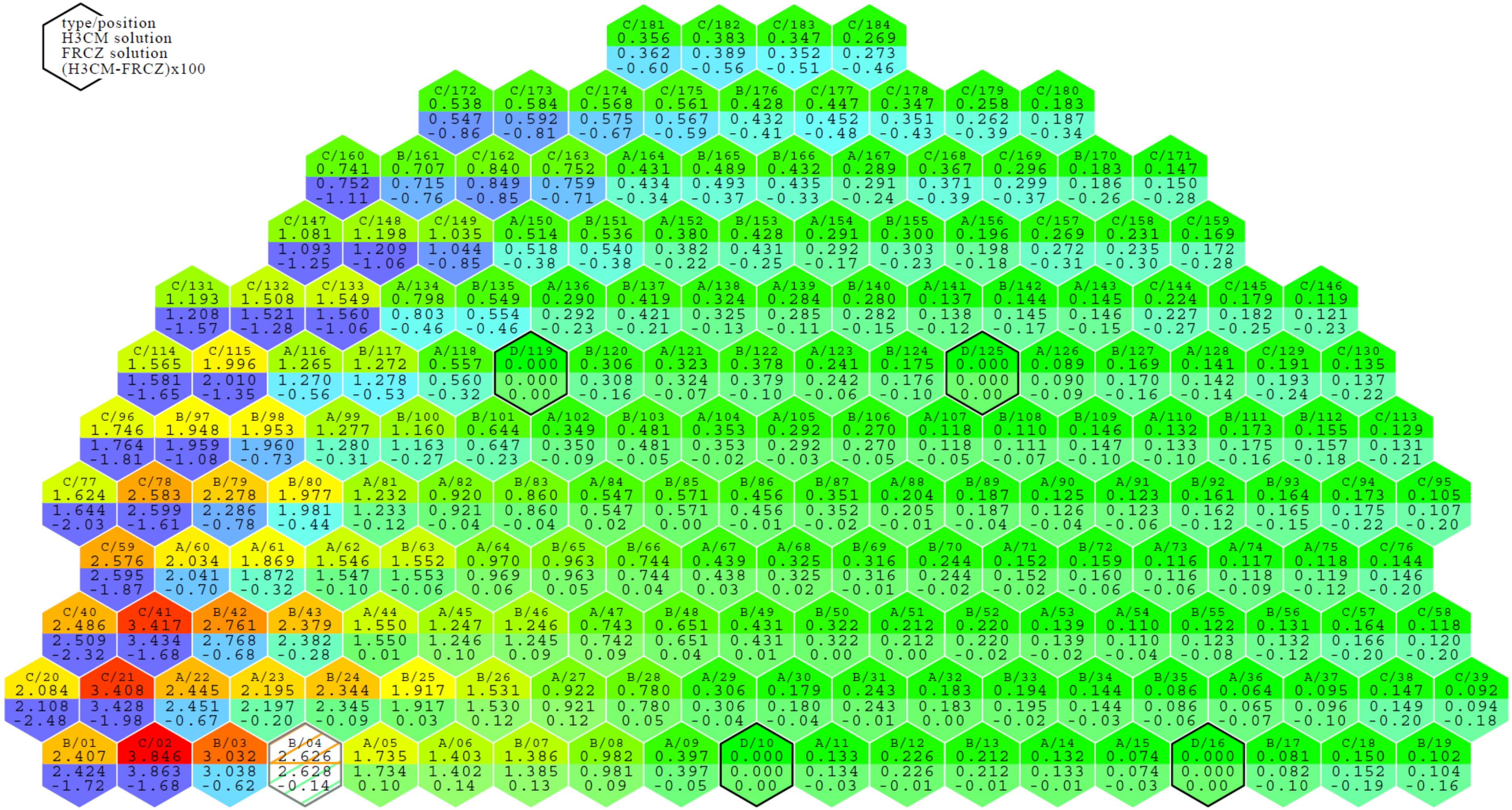
Фиг. III.22. Задача AER-DYN-002. Разпределение на относителната мощност по касети в момента t=0.16 s.
H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



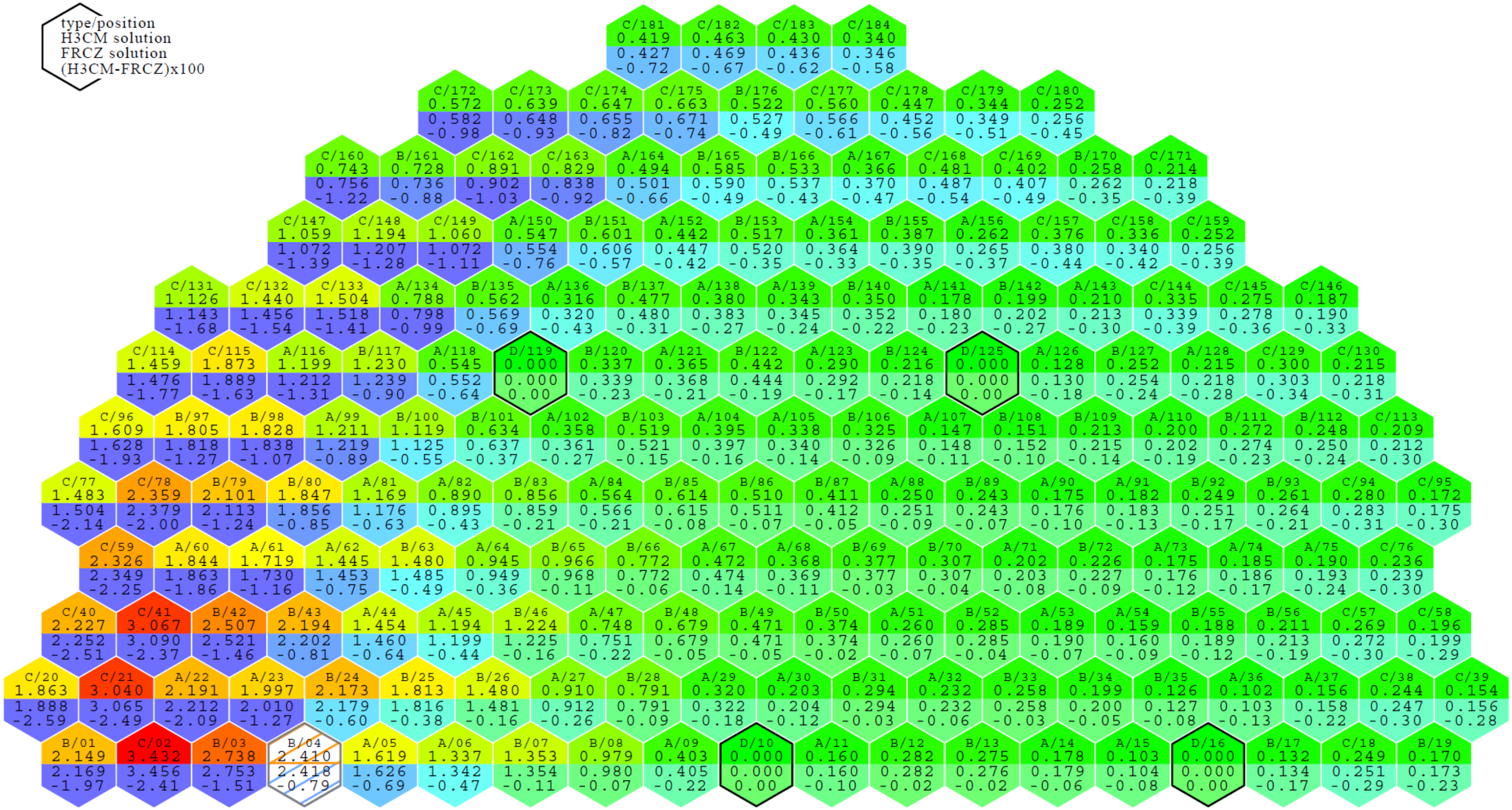
Фиг. III.23. Задача AER-DYN-002. Разпределение на относителната мощност по касети в момента t=0.24 s (максимум на мощността). H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



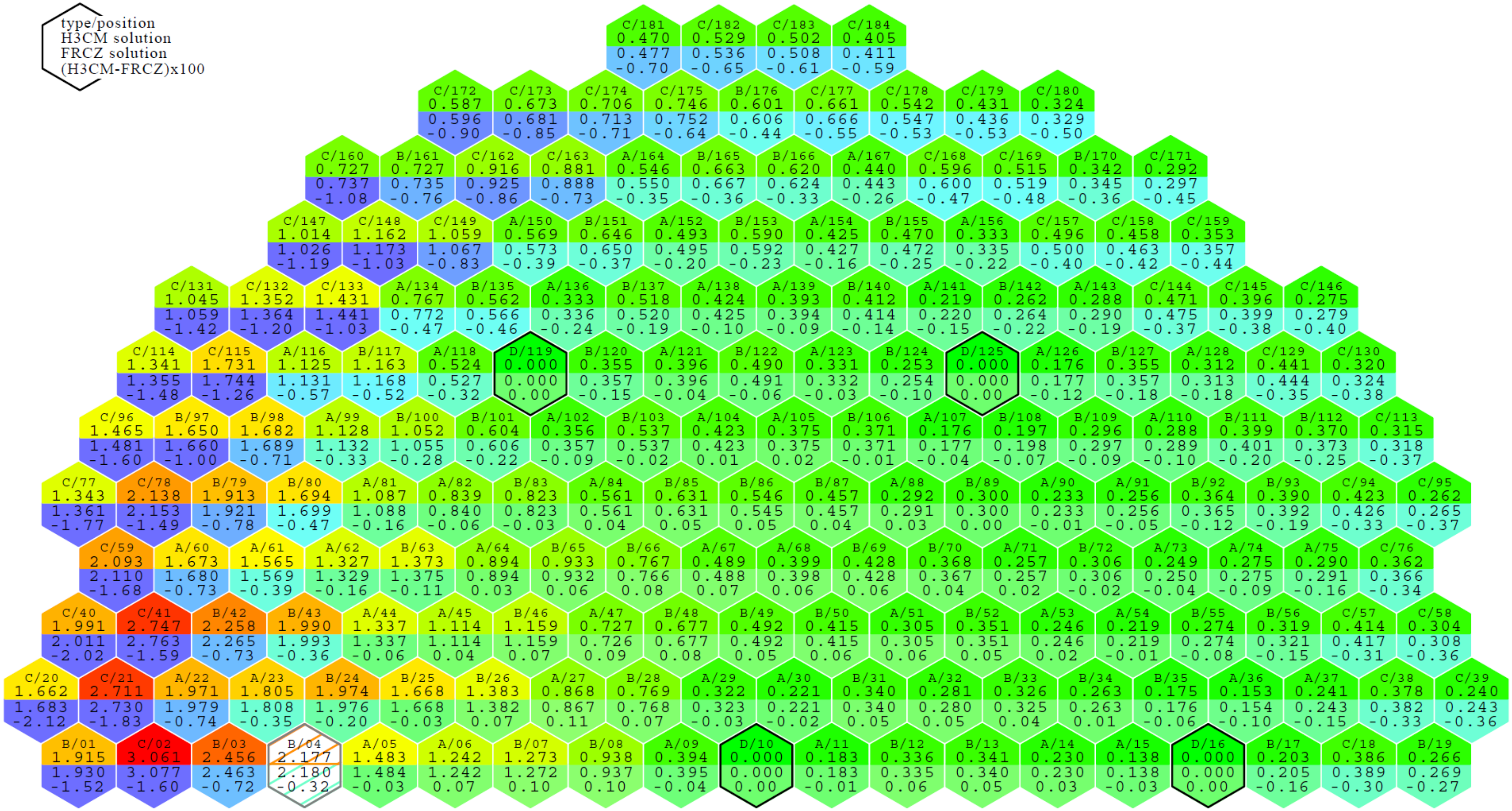
Фиг. III.24. Задача AER-DYN-002. Разпределение на относителната мощност по касети в момента t=0.4 s.
H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.25. Задача AER-DYN-002. Девети аксиален слой. Разпределение на относителната мощност по нодове в момента *t*=0.16 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.26. Задача AER-DYN-002. Девети аксиален слой. Разпределение на относителната мощност по нодове в момента t=0.24 s (максимум на мощността). H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.27. Задача AER-DYN-002. Девети аксиален слой. Разпределение на относителната мощност по нодове в момента t=0.4 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Задачата AER-DYN-002 е изключително чувствителна към началното отклонение от критичност и към въведената реактивност след изхвърляне на органа за регулиране от активната зона, при което ефектите от варирането на тези параметри върху еволюцията на пространственото разпределение допълнително се усложняват от обратните връзки.

Относителната разлика между НЗСМ и FRCZ в максимума на мощността на Фиг. III.19 е -4.3 % и е проява на по-бързото нагряване на горивото при решението с НЗСМ. Това обяснява и малко по-ранното настъпване на максимума. С отчитане на спецификите на тази задача, разликите от няколко процента в амплитудата и от около 2 ms в позицията на максимума могат да се разглеждат като много добро съвпадение между двете решения.

За отбелязване е също, че в околността на изхвърления орган за регулиране отклоненията на НЗСМ от FRCZ по относителна мощност по касети са положителни (Фиг. III.22, III.23 и III.24), докато по относителна мощност по нодове в девети аксиален слой тези отклонения са отрицателни (Фиг. III.25, III.26 и III.27). Подобно разпределение на отклоненията, макар и по-слабо изразено, се наблюдава още в началното условнокритично състояние и е очаквано то да се наследи при преходния процес.

Средноквадратичното отклонение на разликите по относителна нодална мощност е винаги под 1.0E-2, което е признак за достатъчно добро съгласие между НЗСМ и FRCZ. Максималните достигнати разлики от около -2.5E-2 също са приемливи за такава задача, и то особено ако се отчете, че в повечето нодове, където отклоненията надхвърлят по модул 1.0E-2, относителната мощността е по-голяма от 1.0.

III.2.6. Нестационарна задача DYN-B за ВВЕР-1000

За целите на настоящото изследване, на основата на неутронните сечения и зареждането на активната зона при двумерните задачи B1–BB за ВВЕР-1000 беше съставена нестационарната тримерна математическа тестова задача DYN-B. Преходният процес е без реактивностни обратни връзки и по сценарий и максимална достигната реактивност наподобява задачата DYN-001.

Стъпката на решетката от горивни касети за DYN-B е 23.7178 cm. Пълната височина на активната зона е 354 cm, като за решаване на задачата тя е разделена на 15 слоя по 23.6 cm. Броят на горивните касети е 163. Външните гранични условия са съгласувани с тези от задачите B1–BB, но са опростени. На основата на решението с НЗСМ на задача B2 са изготвени логаритмични гранични условия ($J^s = \alpha\Phi^s$) за двете енергетични групи. Коефициентите α, които са представени в Табл. III.18, са получени от отношението на осреднените за пълната външна гранична повърхност на задачата нетен ток и скаларен поток за съответните енергетични групи. Тези гранични условия са използвани за радиалните и аксиалните граници.

Табл. III.18. Задача DYN-B. Коефициенти за логаритмични гранични условия

група	*надтоплинна*	*топлинна*
α	1.0357E-01	8.7792E-02

Неутронните сечения остават непроменени спрямо използваните в задачите B1–BB (Табл. III.1) с изключение на сечението за поглъщане при материалните типове B и D за горивни области с въведен поглътител. За целите на DYN-B тези сечения са умножени с коефициент 1.04. Коефициенти на прекъсване не се прилагат.

Кинетичните параметри за DYN-B са същите, както при задача DYN-002 (Табл. III.15).

Коефициентите f_w (III.2.3) за хомогенизиране на сеченията в горивните нодове с частично въведен поглътител са осреднени за всички пръти и слоеве. Получени са два коефициента съответно за надтоплинната и топлинната групи:

$$f_w^1 = 0.58454$$

$$f_w^2 = 0.47191$$

Това опростяване в случая не води до видим ефект върху хода на амплитудната функция.

Разпределението на позициите на органите за регулиране в 180-градусов сектор от активната зона (вж. Фиг. III.28) по групи е представено в Табл. III.19.

Табл. III.19. Задача DYN-B. Позиции на органите за регулиране в 180-градусов сектор по групи

група	„3“	„4“	„5“	„8“	„9“	„10“
позиции	15, 72, 76	26, 65, 80	7, 58	19, 22, 31, 34, 37	42, 51, 78	4, 10, 45, 48

Началната височина за групи 3-та, 4-та и 9-та е 23.6 cm; на групи 5-та и 8-ма е 354 cm (напълно изведени); на група 10-та е 0.0 cm (напълно въведена). Всички височини са спрямо дъното на активната зона.

В началното условнокритично състояние при DYN-B отклоненията на полученото с HЗСМ решение спрямо референтното решение, получено с FRCZ, са както следва:

– по k_{eff} относителната разлика е -4.5 pcm при референтна стойност 1.0162647.

При разпределението на относителната мощност *по нодове*:

– максимална разлика: 0.24E-2 при референтна стойност 2.520;

– минимална разлика: -0.48E-2 при референтна стойност 4.274;

– средноквадратично отклонение *по нодове*: 0.08E-2

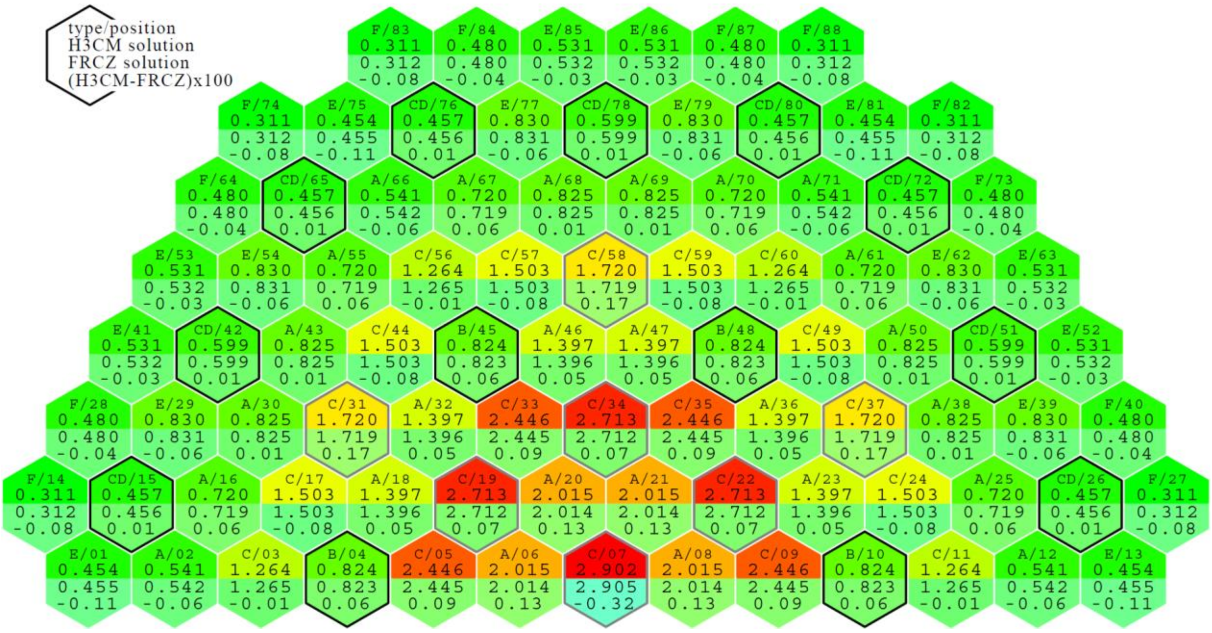
При разпределението на относителната мощност *по касети*:

– максимална разлика: 0.17E-2 при референтна стойност 2.712;

– минимална разлика: -0.32E-2 при референтна стойност 2.905;

– средноквадратично отклонение *по касети*: 0.08E-2

Разпределението на относителната мощност по касети в началното условнокритично състояние е представено на Фиг. III.28 в 180-градусов сектор.



Фиг. III.28. Задача DYN-B. Начално условнокритично състояние (t=0.0 s). Разпределение на относителната мощност по касети. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

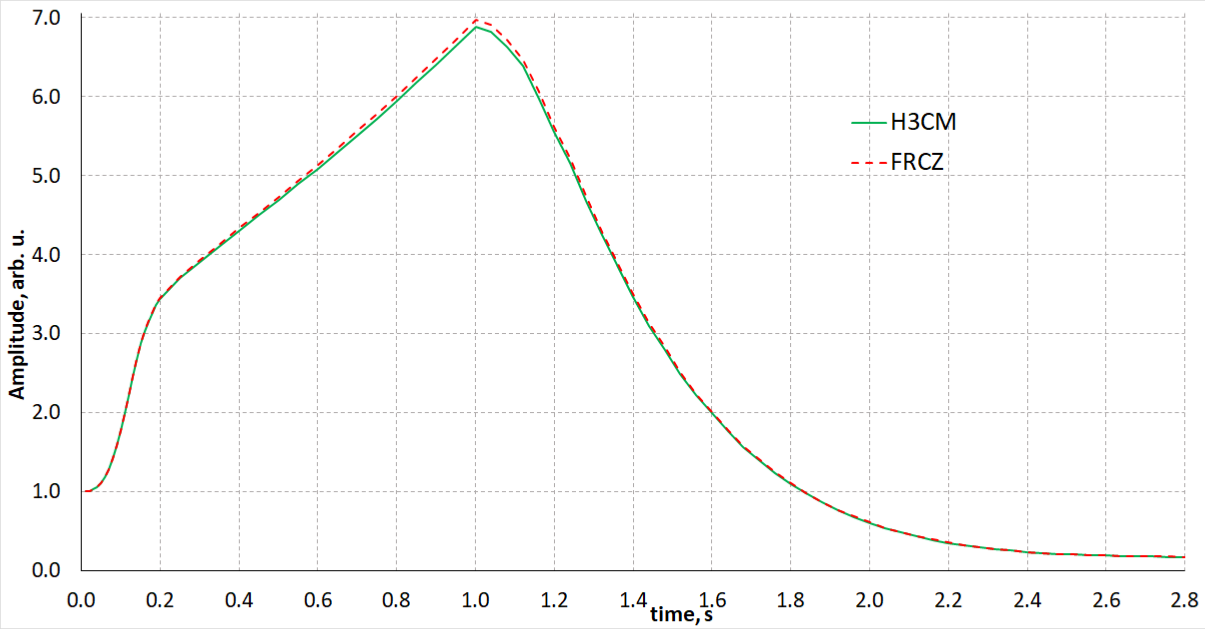
Преходният процес за DYN-B протича по следния начин:

– Органът за регулиране, намиращ се в позиция 4 от Фиг. III.28, се изхвърля от активната зона за t=0.15 s с постоянна скорост.

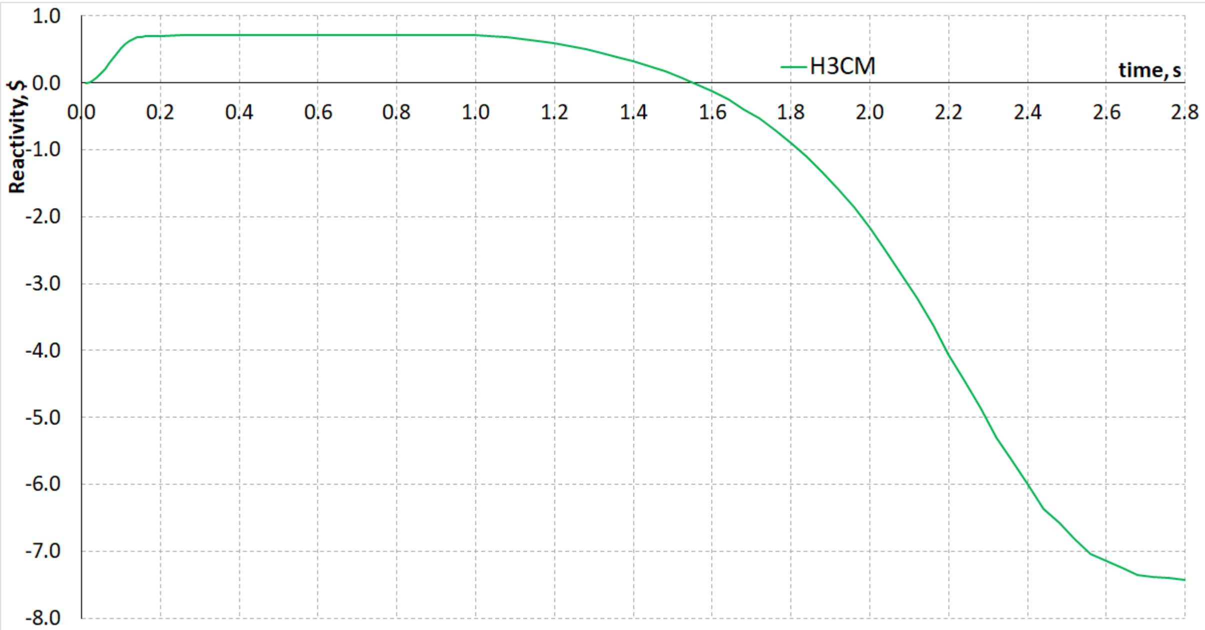
– В момента t=1.0 s органите за регулиране от всички групи (с изключение на 10-та, която е вече напълно въведена) започват да се спускат в активната зона с постоянна скорост. Групи 5-та и 8-ма, които са първоначално изведени от активната зона, достигат дъното за 1.8 s. Групи 3-та, 4-та и 9-та, които са на височина 23.6 cm достигат дъното за 0.12 s.

– Преходният процес се проследява до t=2.8 s, когато всички поглътители без изхвърления са напълно въведени.

Ходът на амплитудната функция и на реактивността са представени на Фиг. III.29 и Фиг. III.30.



Фиг. III.29. Задача DYN-B. Ход на амплитудната функция (H3CM vs FRCZ)



Фиг. III.30. Задача DYN-B. Ход на реактивността (H3CM)

Максималното относително отклонение по амплитудна функция на H3CM от FRCZ е -1.3 %. Максималната стойност на амплитудната функция за H3CM е 6.887 и се достига в момента t=1.0 s. Максималната положителна реактивност е +0.71 $ в момента t=1.0 s.

По време на изхвърлянето и след това до t=0.2 s стъпката по време е 1E-2 s; след това до t=1.0 s стъпката е 5E-2 s; след това до края на процеса t=2.8 s стъпката е 4E-2 s.

За H3CM и задачата DYN-B средният брой външни итерации (по амплитудна функция, величини {ω} и сдвояващи коефициенти) на една стъпка по време е около 5. Средният брой вътрешни итерации (в BiCGSTAB) на една външна е около 25.

В Табл. III.20 са представени отклоненията на H3CM от FRCZ по относителна мощност за различни моменти от преходния процес.

Табл. III.20. Задача DYN-B. Отклонения по относителна мощност (H3CM–FRCZ)

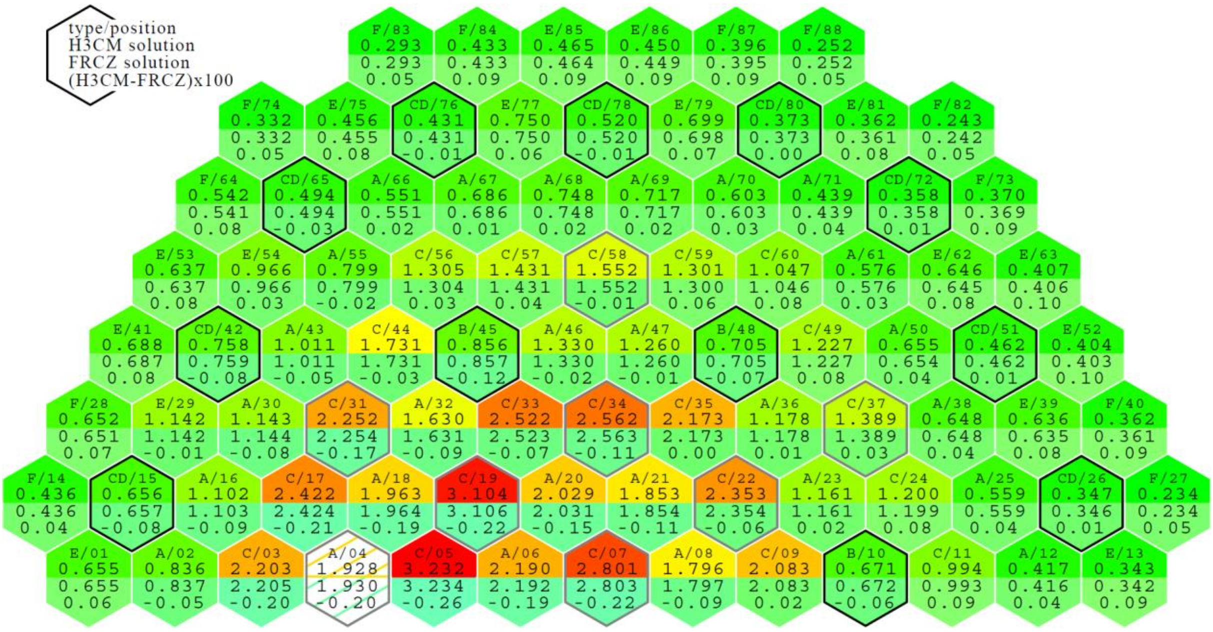
по нодове

t, s	0.15	1.0	1.6	2.8
max×100	0.13	0.14	0.17	0.28
min×100	-0.43	-0.44	-0.55	-0.90
rms×100	0.10	0.10	0.12	0.16

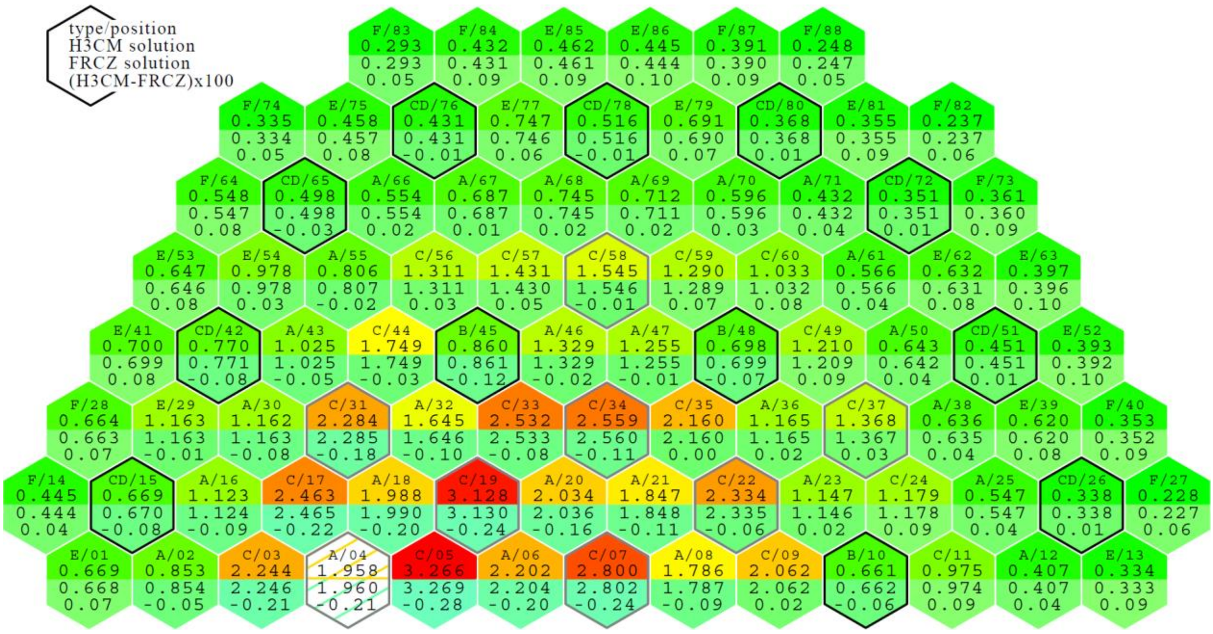
по касети

t, s	0.15	1.0	1.6	2.8
max×100	0.10	0.10	0.11	0.20
min×100	-0.26	-0.28	-0.28	-0.52
rms×100	0.09	0.09	0.10	0.15

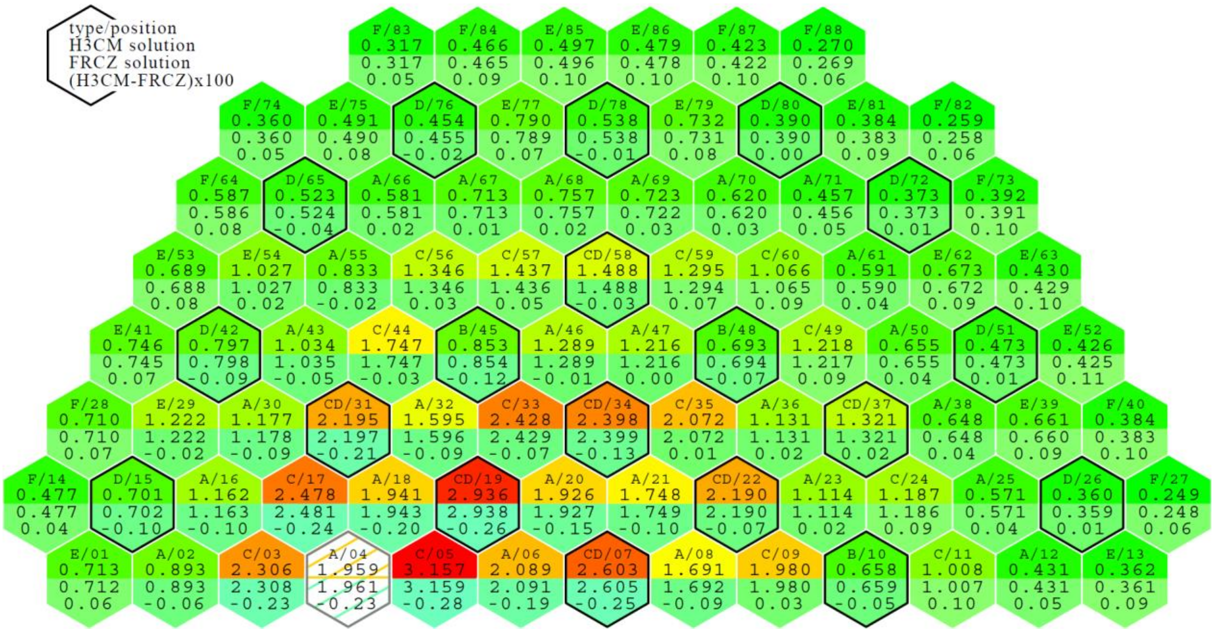
Разпределенията на относителната мощност по касети за моментите t=0.15 s, t=1.0 s, t=1.6 s и t=2.8 s са представени на Фиг. III.31, Фиг. III.32, Фиг. III.33 и Фиг. III.34. Позицията на изхвърления орган за регулиране е защрихована.



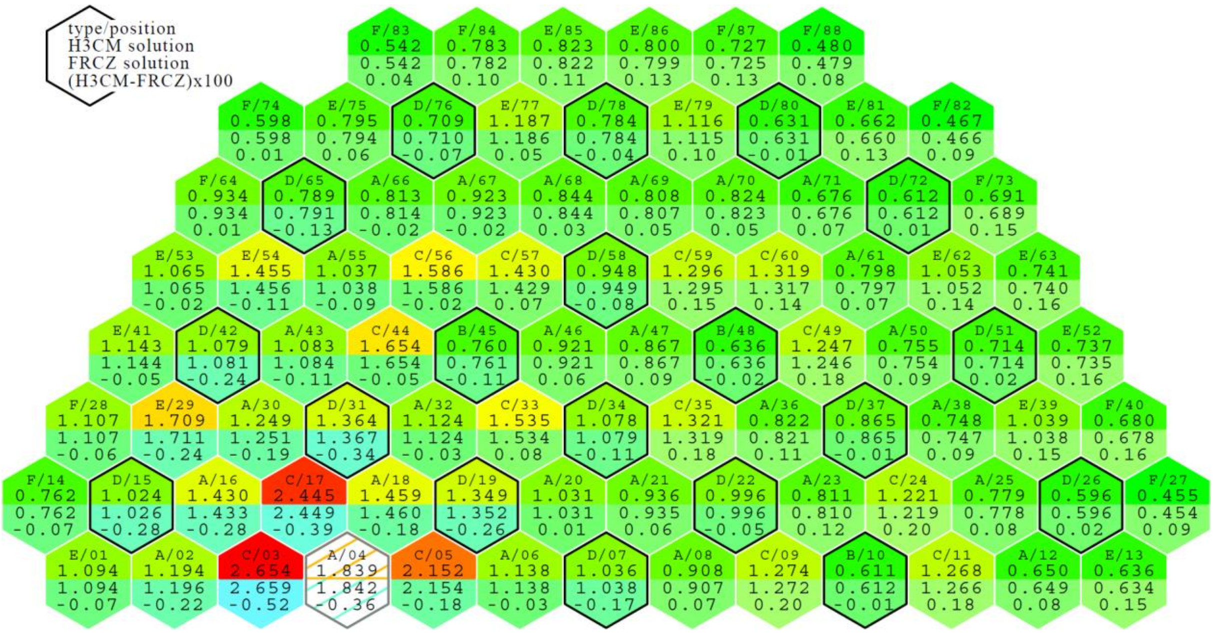
Фиг. III.31. Задача DYN-B. Разпределение на относителната мощност по касети в момента t=0.15 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.32. Задача DYN-B. Разпределение на относителната мощност по касети в момента *t*=1.0 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.33. Задача DYN-B. Разпределение на относителната мощност по касети в момента *t*=1.6 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика



Фиг. III.34. Задача DYN-B. Разпределение на относителната мощност по касети в момента *t*=2.8 s. H3CM vs FRCZ. Цветен код: горе – мощност, долу – разлика

Резултатите от задача DYN-B потвърждават доброто съгласие между H3CM и FRCZ и за преходни процеси при ВВЕР-1000, където стъпката на решетката от горивни касети е значително по-голяма от тази на ВВЕР-440, а конфигурацията на активната зона и устройството на органите за регулиране се различават съществено.

Доколкото такова добро съгласие между решения, получени по два напълно различни метода, не може да бъде случайно, то заедно с аналогичните резултати за предходните две нестационарни тестови задачи може да се приеме за успешна проверка на точността на реализираната в H3CM нестационарната модална ACMFD формулировка на метода HEXNEM3. Потвърждава се и много добрата сходимост и числена устойчивост на тази реализация.

iv. Заключение

Създадена е нова формулировка на нодалния метод HEXNEM3 за решаване на неутронната преносна задача в двугрупово дифузионно приближение, специално предназначена за решаване на нестационарни задачи.

Главна характеристика на тази формулировка е въведеното за пръв път при фамилията от методи HEXNEM модално разлагане, което позволява съвместно решаване на двугруповата задача, от своя страна нужно за безконфликтно и ефикасно прилагане на неявната диференчна схема по време, изисквана за осигуряване на устойчивост на решението на твърдата система от диференциални уравнения, породена от нестационарното дифузионно уравнение.

Следствие от модалното разлагане е необходимостта от построяване на допълнителен модел за пространственото разпределение на мода, съответстващ на отрицателна собствена стойност на хомогенното хелмхолцово уравнение. Този нов за HEXNEM3 модел запазва общите характеристики на метода по отношение на точност и изчислителна тежест. Особеностите на модела и нужните за прилагането му аналитични изрази са изведени и подробно описани в настоящата дисертация.

Друг важен и относително самостоятелен нов резултат е въвеждането на аналитична CMFD схема (ACMFD) за HEXNEM3, която да замени техниката на сдвояване по парциални токове, приложена в оригиналната реализация на метода. Конструирането на тази схема също е описано в дисертацията. Техниката ACMFD позволява формиране на явна линейна алгебрична система от балансни уравнения за средните скаларни потоци, което води до редица удобства при нейното решаване и в частност улеснява съвместното решаване на балансните уравнения за пълната тримерна задача.

За изследване и удостоверяване на свойствата на новосъздадената модална ACMFD формулировка на HEXNEM3 са решени няколко условнокритични и нестационарни тестови задачи. За получаване на референтни решения за част от тях е създадена специализирана финоклетъчна дифузионна програма с нодална схема в аксиално направление. Показано е, че програмната реализация на новата модална ACMFD формулировка на HEXNEM3 демонстрира добра сходимост, числена устойчивост и резултати близки до референтните решения.

v. Литература

Adams M.L., Wareing T.A., Walters W.F., 1988. *Characteristic methods in thick diffusive problems*, Nucl Sci Eng 130:18

Alcouffe R.E., Larsen E.W., Miller W.F. Jr, Wienke B.R., 1979. *Computational efficiency of numerical methods for the multigroup, discrete-ordinates neutron transport equations: the slab geometry case*, Nucl Sci Eng 71:111

Aragonés J.M., Ahnert C., Garcia-Herranz N., 2007. *The Analytic Coarse-Mesh Finite Difference Method for Multigroup and Multidimensional Diffusion Calculations*, Nuclear Science and Engineering, 157:1, 1-15

Aronson R., 1986. *PN vs. double-PN approximations for highly anisotropic scattering*, Transport Theory and Statistical Physics 15(6):829-840, October

Azmy Y.Y., 1992. *Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation*, Ann Nucl Energy 19:593

Azmy Y., Sartori E., 2010. *Nuclear Computational Science: A Century in Review*, Springer, Dordrecht

Bell G.I., Glasstone S., 1970. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold, New York

Bilodid Y., Grundmann U., Kliem S., 2018. *The HEXNEM3 nodal flux expansion method for the hexagonal geometry in the code DYN3D*, Annals of Nuclear Energy, Vol. 116, pp. 187-194

Carlson B.G., Lathrop K.D., 1968. *Transport theory – the method of discrete ordinates*, In: Greenspan H., Kelber C.N., Okrent D. (eds) Computing methods in reactor physics. Gordon & Breach, New York

Chandrasekhar S., 1960. *Radiative transfer*, Dover, New York. First published by Oxford University Press, London (1950)

Chao Y., 1999. *Theoretical Analysis of the Coarse Mesh Finite Difference Representation in Advanced Nodal Methods*, The Proceedings of M&C’99-Madrid, Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, September 27–30, 1, 117-126

Cho N.Z., Kim Y.H., Park K.W., 1997. *Extension of Analytic Function Expansion Nodal Method to Multigroup Problems in Hexagonal-Z Geometry*, Nuclear Science and Engineering: 126, 35-47

Christoskov I., Petkov P., 2013. *A Development of the HEXNEM Nodal Expansion Method*, Annals of Nuclear Energy, Vol. 51, pp. 235-239

Davison B., 1957. *Neutron transport theory*. Oxford University Press, London

Duderstadt J.J., and Hamilton L.J., 1976. *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley & Sons

Fletcher J.K., 1983. *The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics*. Nucl Sci Eng 116:73

Gelbard E.M., 1960. *Application of spherical harmonics method to reactor problems*, WARDBT- 20. Bettis Atomic Power Laboratory

Gelbard E.M., 1961. *Simplified spherical harmonics equations and their use in shielding problems*, WAPD-T 1182 (Rev. 1). Bettis Atomic Power Laboratory

Grundmann U., 1999. *HEXNEM – a Nodal Method for the Solution of the Neutron Diffusion Equation in Hexagonal Geometry*, In: Proceedings of the M&C099 – Conference on Mathematics and Computations in Nuclear Applications, pp. 1086–1095, Madrid, September 27-30.

Grundmann U., 1999. *AER Benchmark Specification Sheet – Test ID: AER-DYN-001*, (http://aerbench.kfki.hu/aerbench/Dyn002.doc)

Grundmann U., Hollstein F., 1999. *A Two-Dimensional Intranodal Flux Expansion Method for Hexagonal Geometry*, Nuclear science and engineering: the journal of the American Nuclear Society 13(2):201-212

Grundmann U., Rohde U., Mittag S., Kliem S., 2005. *DYN3D Version 3.2, Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors (LWR) with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements. Description of Models and Methods*, Institute of Safety Research, Fosrchungszentrum Rossendorf, Wissentschaftlich-Technische Berichte FZR-434, ISSN 1437-322X

Hageman L.A. and Young D.M., 1981. *Applied Iterative Methods*, Academic Press, New York

Hansen K.F., Kang C.M., 1975. *Finite element methods in reactor physics analysis*, Adv Nucl Sci Tech 8:173

Hassitt A., 1968. *Diffusion theory in two and three dimensions*, In: Greenspan H, Kelber CN, Okrent D (eds) Computing methods in reactor physics, Chap. 2. Gordon & Breach, New York

Henry A.F., 1975. *Nuclear Reactor Analysis*, The MIT Press; Cambridge, Massachusetts and London, England

Jalili Bahabadi M.H., Pazirandeh A., Athari M., 2016. *Analytic function expansion nodal (AFEN) method for solving multigroup neutron simplified P3 (SP3) equations in hexagonal-z geometry*, Annals of Nuclear Energy 98 74–80

Kamenov K., Antov A., Kamenov A., Spasova V., 2013. *Experience from the HELHEX code package validation at the Kozloduy NPP*, 10. International conference on WWER fuel performance, modelling and experimental support, Sandanski (Bulgaria)

Keepin G.R., 1965. *Physics of nuclear kinetics*, Addison-Wesley Series in Nuclear Science and Engineering. Addison-Wesley, Reading, MA

Keresztúri A., Jakab L., 1991. *A Nodal Method for Solving the Time-Depending Diffusion Equation in the IQS Approximation*, KFKI-1991-35/G report

Keresztúri A., Telbisz M., 2000. *AER Benchmark Specification Sheet – Test ID: AER-DYN-001*, (http://aerbench.kfki.hu/aerbench/Dyn001.doc)

Koebke K., 1978. *A New Approach to Homogenization and Group Condensation*, Lugano, IAEA-TECDOC-231

Kolev N., Lenain R., Magnaud C., 1999. *AER Benchmark Specification Sheet – Test ID: AER-FCM-101*, (http://aerbench.kfki.hu/aerbench/FCM101.doc)

Kolev S., Christoskov I., 2018. *A CMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Two-group Neutron Diffusion Equation*, Comptes rendus de l'Acade'mie bulgare des Sciences, Vol. 71, No2, pp. 176-184

Kolev S., Christoskov I., 2019[a]. *A CMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Neutron Diffusion Equation Through Modal Decomposition*, AIP Conference Proceedings 2075, 070003

Kolev S., Christoskov I., 2019[b]. *A Modal ACMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Time-dependent Neutron Diffusion Equation*, Annals of Nuclear Energy Vol. 130, pp. 331–337

Lautard J., Loubiere S., Fedon-Magnaud C., 1990. *CRONOS: A Modular Computational System for Neutronic Core Calculations*, IAEA Spec. Mtg. on Advanced Calculation Methods for Power Reactors, Cadarache, France, September 10-14

Lawrence R.D., 1986. *Progress in Nodal Methods for the Solution of the Neutron Diffusion and Transport Equations*, Progress in Nuclear Energy, Vol. 17, No. 3, pp. 271-301

Lee D., Downar T.J., 2004. *A Nodal and Finite Difference Hybrid Method for Pin-by-Pin Heterogeneous Three-Dimensional Light Water Reactor Diffusion Calculations*, Nuclear Science and Engineering: 146, 319–339

Lewis E.E., Miller W.F. Jr, 1984. *Computational methods of neutron transport*, Wiley, New York

Lohan R., 1933. Linear Algebra and its Applications, 265 (1997), 123-145. *Das Entwicklungsverfahren zum Ausgleichen geodaetischer Netze nach Boltz im Matrizenkalkuel*, Zeitschriftfiir angewandte Mathematilc und Mechanik, 13 (1933), 59-60.

Maráczy Cs., Kolev N.P., Magnaud C., Lenain R., 1999. *Test ID: AER-FCM-001*, (http://aerbench.kfki.hu/aerbench/FCM001.doc)

Petkov P.T., Georgieva I.S., 1987. *HEXAB2DB - a Code for Calculation of the Pin-Wise Power Distribution in the WWER-440 Core*, XVI Symposium of VMK, Moscow

Petkov P.T., Mittag S., 2003. *Two-dimensional Heterogeneous Transport Theory Hot Zero-power Benchmarks for the WWER-1000 Reactors*, Proc. XIII Symposium of AER, Sep. 22-26, Dresden, Germany, pp.77-88

Saad Y, 2011. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, SIAM

Schulz G., 1996. *Solutions of a 3D VVER-1000 Benchmark*, Proc. 6-th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Safety, Kirkkonummi, Finland

Seidel F., 1985. *Diffusion Calculations for VVER-440 2D and 3D Test Problem*, Proc. of the 14th Symp. of Temporary International Collective (TIC), Warsaw, Poland, 23-27 vol.1, p.216

Semenza L.A., Lewis E.E., Rossow EC, 1972. *Application of the finite element method to the multigroup neutron diffusion equation*. Nucl Sci Eng 47:302

Smith K.S., 1986. *Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis*. Prog. Nucl. Energy 17, 303– 335

Smith K.S., 1994. *Practical and efficient iterative method for LWR fuel assembly homogenization*. United States: N. p., Web.

Sutton T.M., Aviles B.N., 1996. *Diffusion Theory Methods for Spatial Kinetics Calculations*, Progress in Nuclear Energy, Vol. 30, No. 2, pp. 119-182

TehHuang S., Lewis E.E., 1972. *Asymptotic PN and double PN approximations*, Journal of Nuclear Energy Volume 26, Issue 5, May, Pages 231-236

Van der Vorst H.A., 1992. *Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*, SIAM J. Sci. and Stat. Comput. 13 (2): 631–644

Walters W.F., O'Dell R.D., 1980. *Nodal methods for discrete-ordinates transport problems in (x-y) geometry*. In: Proc. ANS topical conference. Advances in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems, 27–29 April. 1, 115. Munich

Yamoah S., Akaho E.H.K., Nyarko B.J.B., 2013. *An accurate solution of point reactor neutron kinetics equations of multi-group of delayed neutrons*, Annals of Nuclear Energy Volume 54, April, Pages 104-108

Петков П.Т., Христосков И., Петков П.В., 2013. *Разработване, тестване, валидиране и въвеждане в експлоатация на софтуер за стационарни 3-мерни потвелни пресмятания на неутронно-физични характеристики на активната зона на ВВЕР-1000 и на софтуер за подготовка на съответна библиотека малогрупови константи за различни типове касети и поглъщащи елементи за ВВЕР-1000 чрез съвременна спектрална програма*, Договор № 298000010/19.06.2009 г. между „АЕЦ Козлодуй" ЕАД и НИС на СУ „Св. Климент Охридски"

Петков П.Т., 2013. *Кодиране и тестване при разработчика на стационарната малогрупова тримерна финоклетъчна дифузионна програма HEX3DP и интегрирането ѝ с HEX3DA*, отчет за АЕЦ „Козлодуй" ЕАД

Христосков И., 2013. *Кодиране и тестване при разработчика на стационарната малогрупова тримерна едроклетъчна дифузионна програма HEX3DA*, отчет за АЕЦ „Козлодуй" ЕАД

vi. Библиография

Публикации и участия в конференции във връзка с дисертацията

Kolev S., Christoskov I., 2018. *A CMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Two-group Neutron Diffusion Equation*, Comptes rendus de l'Acade'mie bulgare des Sciences, Vol. 71, No2, pp. 176-184

Kolev S., Christoskov I., 2019[a]. *A CMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Neutron Diffusion Equation Through Modal Decomposition*, AIP Conference Proceedings 2075, 070003

Kolev S., Christoskov I., 2019[b]. *A Modal ACMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Time-dependent Neutron Diffusion Equation*, Annals of Nuclear Energy Vol. 130, pp. 331–337

Kolev S., Christoskov I., A CMFD Formulation of the HEXNEM3 Method for Solving the Neutron Diffusion Equation Through Modal Decomposition, доклад на 10th Jubilee Conference of the Balkan Physical Union (BPU10), 26-30.08.2018, София

Kolev S., Christoskov I., ACMFD formulation of the HEXNEM3 method for solving the time-dependent neutron diffusion equation via modal decomposition, доклад на 28th Symposium of AER (Atomic Energy Research) on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, 08-12.10.2018, Olomouc, Czech Republic

Други публикации

Колев С., Приложение на експоненциално модифицирано Гаусово разпределение за моделиране на формата на алфа-пикове в алфа-спектри, Annual of Sofia University „St. Kliment Ohridski", Faculty of Physics, Vol. 110, 2017, pp 121-128

IV. Приложение

IV.1. Извод на ACMFD изразите

IV.1.1. Двумерна задача

Нека отправна точка бъдат връзките (1-10) по-долу за примерната ос x:

$$\Phi_1^{s,n} = r_{1,1}^n d_1^n + r_{1,4}^n d_4^n + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n} \tag{1}$$

$$\Phi_4^{s,m} = r_{4,1}^m d_1^m + r_{4,4}^m d_4^m + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m} \tag{2}$$

$$\Phi_1^{w,n} = r_{7,7}^n d_7^n + r_{7,10}^n d_{10}^n + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n} \tag{3}$$

$$\Phi_4^{w,m} = r_{10,7}^m d_7^m + r_{10,10}^m d_{10}^m + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m} \tag{4}$$

$$\bar{\Phi}^n = \gamma^n d_1^n + \gamma^n d_4^n + \gamma^n \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^n + \bar{P}^n \tag{5}$$

$$\bar{\Phi}^m = \gamma^m d_1^m + \gamma^m d_4^m + \gamma^m \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^m + \bar{P}^m \tag{6}$$

$$\Phi_1^{s,n} = \Phi_4^{s,m} \tag{7}$$

$$\Phi_1^{w,n} = \Phi_4^{w,m} \tag{8}$$

$$J_1^{s,n} = -J_4^{s,m} = J_n^{s,m} \tag{9}$$

$$J_1^{w,n} = -J_4^{w,m} = J_n^{w,m} \tag{10}$$

Последователно се получава:

от (5) и (6):

$$d_4^n = \frac{1}{\gamma^n}\left(\bar{\Phi}^n - \bar{P}^n\right) - d_1^n - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^n$$

$$d_1^m = \frac{1}{\gamma^m}\left(\bar{\Phi}^m - \bar{P}^m\right) - d_4^m - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^m$$

заместваме в (1) и (2):

$$\Phi_1^{s,n} = r_{1,1}^n d_1^n + r_{1,4}^n \left(\frac{1}{\gamma^n}\left(\bar{\Phi}^n - \bar{P}^n\right) - d_1^n - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^n \right) + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$\Phi_4^{s,m} = r_{4,1}^m \left(\frac{1}{\gamma^m}\left(\bar{\Phi}^m - \bar{P}^m\right) - d_4^m - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^m \right) + r_{4,4}^m d_4^m + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$\Phi_1^{s,n} = \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right) d_1^n + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{\Phi}^n - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$\Phi_4^{s,m} = \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right) d_4^m + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{\Phi}^m - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$\Phi_1^{s,n} = -\left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)\left(\frac{J_1^n}{D^n} + \tilde{P}_1^{c,n}\right) + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{\Phi}^n - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$\Phi_4^{s,m} = -\left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)\left(\frac{J_4^m}{D^m} + \tilde{P}_4^{c,m}\right) + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{\Phi}^m - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$\Phi_1^{s,n} = -\left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)\frac{J_1^n}{D^n} + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{\Phi}^n \underbrace{-r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n}_{\mathrm{dsum}_1^n} + \underbrace{\tilde{P}_1^{f,n} - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)\tilde{P}_1^{c,n}}_{\mathrm{Psum}_1^n}$$

$$\Phi_4^{s,m} = -\left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)\frac{J_4^m}{D^m} + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{\Phi}^m \underbrace{-r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m}_{\mathrm{dsum}_4^m} + \underbrace{\tilde{P}_4^{f,m} - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)\tilde{P}_4^{c,m}}_{\mathrm{Psum}_4^m}$$

Нека:

$$C_1^{J,n} = -\left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)$$

$$C_4^{J,m} = -\left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)$$

$$C_1^{\Phi,n} = \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}$$

$$C_4^{\Phi,m} = \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}$$

Поради структурата на матрицата $\hat{\mathbf{R}}$ коефициентите $\left\{C_k^{J/\Phi}\right\}$ са едни и същи за всички оси и долният индекс може да бъде изпуснат.

Нека:

$$T_1^n = \mathrm{dsum}_1^n + \mathrm{Psum}_1^n$$

$$T_4^m = \mathrm{dsum}_4^m + \mathrm{Psum}_4^m,$$

където:

$$\mathrm{dsum}_1^n = -r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n$$

$$\mathrm{dsum}_4^m = -r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1\\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m$$

$$\mathrm{Psum}_1^n = \tilde{P}_1^{f,n} - C_1^{\Phi,n}\bar{P}^n + C_1^{J,n}\tilde{P}_1^{c,n}$$

$$\mathrm{Psum}_4^m = \tilde{P}_4^{f,m} - C_4^{\Phi,m}\bar{P}^m + C_4^{J,m}\tilde{P}_4^{c,m}$$

Следователно:

$$\Phi_1^{s,n} = C_1^{J,n}\frac{J_1^n}{D^n} + C_1^{\Phi,n}\bar{\Phi}^n + T_1^n$$

$$\Phi_4^{s,m} = C_4^{J,m}\frac{J_4^m}{D^m} + C_4^{\Phi,m}\bar{\Phi}^m + T_4^m$$

Така от вътрешните гранични условия (7) и (9) следва:

$$C_1^{J,n}\frac{J_n^{s,m}}{D^n} + C_1^{\Phi,n}\bar{\Phi}^n + T_1^n = C_4^{J,m}\frac{-J_n^{s,m}}{D^m} + C_4^{\Phi,m}\bar{\Phi}^m + T_4^m$$

$$C_1^{J,n}\frac{J_n^{s,m}}{D^n} + C_4^{J,m}\frac{J_n^{s,m}}{D^m} = C_4^{\Phi,m}\bar{\Phi}^m + T_4^m - \left(C_1^{\Phi,n}\bar{\Phi}^n + T_1^n\right)$$

$$\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)J_n^{s,m} = \left(C_4^{\Phi,m} + \frac{T_4^m}{\bar{\Phi}^m}\right)\bar{\Phi}^m - \left(C_1^{\Phi,n} + \frac{T_1^n}{\bar{\Phi}^n}\right)\bar{\Phi}^n$$

$$J_n^{s,m} = \frac{\left(C_4^{\Phi,m} + \frac{T_4^m}{\bar{\Phi}^m}\right)}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^m - \frac{\left(C_1^{\Phi,n} + \frac{T_1^n}{\bar{\Phi}^n}\right)}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^n$$

$$J_n^{s,m} = \tilde{D}_{nm}^{s,m}\bar{\Phi}^m - \tilde{D}_{nm}^{s,n}\bar{\Phi}^n$$

На практика се работи с изрази от вида:

$$J_n^{s,m} = \frac{C_4^{\Phi,m}}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^m + \frac{T_4^m}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)} - \frac{C_1^{\Phi,n}}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)}\bar{\Phi}^n - \frac{T_1^n}{\left(\frac{C_1^{J,n}}{D^n} + \frac{C_4^{J,m}}{D^m}\right)}$$

За момента на тока от (3) и (4) имаме:

$$\Phi_1^{w,n} = -r_{7,7}^n\left(\frac{J_7^n}{D^n} + \tilde{P}_7^{c,n}\right) + \sum_{i\neq 1,4,7} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n}$$

$$\Phi_4^{w,m} = -r_{10,10}^m\left(\frac{J_{10}^m}{D^m} + \tilde{P}_{10}^{c,m}\right) + \sum_{i\neq 1,4,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m}$$

$$\Phi_1^{w,n} = -r_{7,7}^n\frac{J_7^n}{D^n} + \sum_{i\neq 1,4,7} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n} - r_{7,7}^n\tilde{P}_7^{c,n}$$

$$\Phi_4^{w,m} = -r_{10,10}^m\frac{J_{10}^m}{D^m} + \sum_{i\neq 1,4,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m} - r_{10,10}^m\tilde{P}_{10}^{c,m}$$

Нека:

$$\mathrm{dsum}_1^n = \sum_{i\neq 1,4,7} r_{7,i}^n d_i^n$$

$$\mathrm{dsum}_4^m = \sum_{i\neq 1,4,10} r_{10,i}^m d_i^m$$

$$\mathrm{Psum}_1^n = \tilde{P}_7^{f,n} - r_{7,7}^n\tilde{P}_7^{c,n}$$

$$\mathrm{Psum}_4^m = \tilde{P}_{10}^{f,m} - r_{10,10}^m\tilde{P}_{10}^{c,m}$$

Така:

$$\Phi_1^{w,n} = -r_{7,7}^n \frac{J_7^n}{D^n} + \mathrm{dsum}_1^n + \mathrm{Psum}_1^n$$

$$\Phi_4^{w,m} = -r_{10,10}^m \frac{J_{10}^m}{D^m} + \mathrm{dsum}_4^m + \mathrm{Psum}_4^m$$

От вътрешните гранични условия (8) и (10) следва:

$$-r_{7,7}^n \frac{J_n^{w,m}}{D^n} + \mathrm{dsum}_1^n + \mathrm{Psum}_1^n = -r_{10,10}^m \frac{-J_n^{w,m}}{D^m} + \mathrm{dsum}_4^m + \mathrm{Psum}_4^m$$

$$r_{10,10}^m \frac{J_n^{w,m}}{D^m} + r_{7,7}^n \frac{J_n^{w,m}}{D^n} = \underbrace{\mathrm{dsum}_1^n + \mathrm{Psum}_1^n}_{T_1^n} - \underbrace{\left(\mathrm{dsum}_4^m + \mathrm{Psum}_4^m\right)}_{T_4^m}$$

$$\left(\frac{r_{10,10}^m}{D^m} + \frac{r_{7,7}^n}{D^n}\right) J_n^{w,m} = T_1^n - T_4^m$$

$$J_n^{w,m} = \frac{T_1^n}{\dfrac{r_{10,10}^m}{D^m} + \dfrac{r_{7,7}^n}{D^n}} - \frac{T_4^m}{\dfrac{r_{10,10}^m}{D^m} + \dfrac{r_{7,7}^n}{D^n}}$$

Вижда се, че изразите за моментите на токовете не зависят явно от средните потоци.
На външната граница за условия от логаритмичен тип се получава:

$$J_1^{s,n} = \alpha \Phi_1^{s,n}$$

$$\frac{J_1^{s,n}}{\alpha} = C_1^{J,n} \frac{J_1^n}{D^n} + C_1^{\Phi,n} \bar{\Phi}^n + T_1^n$$

$$\left(\frac{1}{\alpha} - \frac{C_1^{J,n}}{D^n}\right) J_1^{s,n} = C_1^{\Phi,n} \bar{\Phi}^n + T_1^n$$

$$J_1^{s,n} = \left(\frac{C_1^{\Phi,n} + \dfrac{T_1^n}{\bar{\Phi}^n}}{\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_1^{J,n}}{D^n}}\right) \bar{\Phi}^n$$

$$J_1^{s,n} = \tilde{D}_1^n \bar{\Phi}^n$$

Или:

$$J_1^{s,n} = \frac{C_1^{\Phi,n}}{\left(\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_1^{J,n}}{D^n}\right)} \bar{\Phi}^n + \frac{T_1^n}{\left(\dfrac{1}{\alpha} - \dfrac{C_1^{J,n}}{D^n}\right)}$$

За момента на тока:

$$J_1^{w,n} = \alpha \Phi_1^{w,n}$$

$$\Phi_1^{w,n} = r_{7,7}^n d_7^n + \sum_{i \neq 1,4,7} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n}$$

$$\Phi_1^{w,n} = -r_{7,7}^n \frac{J_7^n}{D^n} + T_1^n$$

$$\frac{J_1^{w,n}}{\alpha} = -r_{7,7}^n \frac{J_1^{w,n}}{D^n} + T_1^n$$

$$\left(\frac{1}{\alpha} + \frac{r_{7,7}^n}{D^n}\right) J_7^n = T_1^n$$

$$J_7^n = \frac{T_1^n}{\left(\frac{1}{\alpha} + \frac{r_{7,7}^n}{D^n}\right)}$$

където: $J_7^n = J_1^{w,n}$ поради $\mathbf{J}^n = \begin{pmatrix} \mathbf{J}^{s,n} \\ \mathbf{J}^{w,n} \end{pmatrix}$.

Изводът на ACMFD изразите за останалите оси е аналогичен.

IV.1.2. Аксиална задача

За потока на долната граница се получава:

$$\begin{aligned}
\Phi_d &= a_1 e_d^+ + a_2 e_d^- + P_d \\
&= \frac{1}{e_d^+ e_u^- - e_d^- e_u^+}\left[\left(d_d e_u^- - d_u e_d^-\right) e_d^+ + \left(d_d e_u^+ - d_u e_d^+\right) e_d^-\right] + P_d \\
&= \frac{1}{e_d^+ e_u^- - e_d^- e_u^+}\left[d_d\left(e_d^+ e_u^- + e_d^- e_u^+\right) - 2 d_u e_d^- e_d^+\right] + P_d \\
&= \frac{1}{e_d^+ e_u^- - e_d^- e_u^+}\left[d_d\left(e_d^+ e_u^- + e_d^- e_u^+\right) - 2\left(d_d + \kappa\left(z_u - z_d\right)\left(\bar{\Phi} - \bar{P}\right)\right) e_d^- e_d^+\right] + P_d \\
&= \frac{1}{e_d^+ e_u^- - e_d^- e_u^+}\left[d_d\left(e_d^+ e_u^- + e_d^- e_u^+ - 2 e_d^- e_d^+\right) - 2\kappa\left(z_u - z_d\right)\left(\bar{\Phi} - \bar{P}\right) e_d^- e_d^+\right] + P_d
\end{aligned}$$

Отделно, тъй като:

$$e_d^+ e_u^- - e_d^- e_u^+ = -\exp\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right) + \exp\left(-\kappa\left(z_u - z_d\right)\right) = -2\sinh\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right);$$

$$\begin{aligned}
e_d^+ e_u^- + e_d^- e_u^+ - 2 e_d^- e_d^+ &= \exp\left(-\kappa\left(z_u - z_d\right)\right) + \exp\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right) - 2 \\
&= -2\left(1 - \cosh\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right)\right)
\end{aligned};$$

$$\frac{1 - \cosh\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right)}{\sinh\left(\kappa\left(z_u - z_d\right)\right)} = -\tanh\left(\frac{\kappa\left(z_u - z_d\right)}{2}\right),$$

след заместване за долния граничен поток се получава:

$$\Phi_d = P_d - d_d \tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right) + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}(\bar{\Phi} - \bar{P})$$

$$= P_d + \frac{1}{\kappa}\left(\frac{J_d}{D} + P'(x_d)\right)\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right) + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}(\bar{\Phi} - \bar{P})$$

$$= \frac{2}{\kappa}\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right)\frac{J_d}{2D} + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}\bar{\Phi}$$

$$+P_d + \frac{2}{\kappa}\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right)\frac{1}{2}P'(x_d) - \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}\bar{P}$$

Аналогично за потока на горната граница се получава:

$$\Phi_u = P_u + d_u \tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right) + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}(\bar{\Phi} - \bar{P})$$

$$= P_u - \frac{1}{\kappa}\left(\frac{J_u}{D} + P'(x_u)\right)\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right) + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}(\bar{\Phi} - \bar{P})$$

$$= -\frac{2}{\kappa}\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right)\frac{J_u}{2D} + \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}\bar{\Phi}$$

$$+P_u - \frac{2}{\kappa}\tanh\left(\frac{\kappa(z_u - z_d)}{2}\right)\frac{1}{2}P'(x_u) - \frac{\kappa(z_u - z_d)}{\sinh(\kappa(z_u - z_d))}\bar{P}$$

IV.1.3. Двумерна задача за модовете

За удобство ще бъдат изведени ACMFD изразите за оста *x* за два съседни нода *n* и *m*. Номерацията на изразите по-долу важи само за настоящия раздел.

Част от работните изрази за модовете в съседните нодове (имайки предвид структурата на матриците $\hat{\mathbf{R}}$ и $\left(\hat{\mathbf{Q}}^{c}\right)^{-1}$) са следните:

$$f_1^{s,n} = r_{1,1}^n d_1^n + r_{1,4}^n d_4^n + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n} \tag{1}$$

$$f_4^{s,m} = r_{4,1}^m d_1^m + r_{4,4}^m d_4^m + \sum_{i \neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m} \tag{2}$$

$$\bar{f}^{\,n} = \gamma^n d_1^n + \gamma^n d_4^n + \gamma^n \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^n + \bar{P}^n \tag{3}$$

$$\bar{f}^{\,m} = \gamma^m d_1^m + \gamma^m d_4^m + \gamma^m \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq 1,4}}^{6} d_i^m + \bar{P}^m \tag{4}$$

От тях се изразяват средните стойности на модовете за общата стена чрез средните стойности за нодовете и производните на общата стена.

От (3) и (4) следва:

$$d_4^n = \frac{1}{\gamma^n}\left(\bar{f}^n - \bar{P}^n\right) - d_1^n - \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n$$

$$d_1^m = \frac{1}{\gamma^m}\left(\bar{f}^m - \bar{P}^m\right) - d_4^m - \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m$$

След заместване в (1) и (2):

$$f_1^{s,n} = r_{1,1}^n d_1^n + r_{1,4}^n \left(\frac{1}{\gamma^n}\left(\bar{f}^n - \bar{P}^n\right) - d_1^n - \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n \right) + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$f_4^{s,m} = r_{4,1}^m \left(\frac{1}{\gamma^m}\left(\bar{f}^m - \bar{P}^m\right) - d_4^m - \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m \right) + r_{4,4}^m d_4^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$f_1^{s,n} = \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right) d_1^n + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{f}^n - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$f_4^{s,m} = \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right) d_4^m + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{f}^m - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$f_1^{s,n} = \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)\left(g_1^{s,n} - \tilde{P}_1^{c,n}\right) + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{f}^n - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n + \tilde{P}_1^{f,n}$$

$$f_4^{s,m} = \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)\left(g_4^{s,m} - \tilde{P}_4^{c,m}\right) + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{f}^m - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m + \tilde{P}_4^{f,m}$$

$$f_1^{s,n} = \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right) g_1^{s,n} + \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{f}^n \underbrace{- r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n}_{\mathrm{dsum}_1^n} + \underbrace{\tilde{P}_1^{f,n} - \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}\bar{P}^n - \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)\tilde{P}_1^{c,n}}_{\mathrm{Psum}_1^n}$$

$$f_4^{s,m} = \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right) g_4^{s,m} + \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{f}^m \underbrace{- r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m}_{\mathrm{dsum}_4^m} + \underbrace{\tilde{P}_4^{f,m} - \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}\bar{P}^m - \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)\tilde{P}_4^{c,m}}_{\mathrm{Psum}_4^m}$$

Нека:

$$C_1^{d,n} = \left(r_{1,1}^n - r_{1,4}^n\right)$$

$$C_4^{d,m} = \left(r_{4,4}^m - r_{4,1}^m\right)$$

$$C_1^{a,n} = \frac{r_{1,4}^n}{\gamma^n}$$

$$C_4^{a,m} = \frac{r_{4,1}^m}{\gamma^m}$$

Поради структурата на $\hat{\mathbf{R}}$ коефициентите $\left\{C_k^{d/a}\right\}$ са едни и същи за всички оси и долният индекс може да бъде изпуснат.

Нека:

$$t_1^n = \mathrm{dsum}_1^n + \mathrm{Psum}_1^n$$

$$t_4^m = \mathrm{dsum}_4^m + \mathrm{Psum}_4^m,$$

където:

$$\mathrm{dsum}_1^n = -r_{1,4}^n \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{1,i}^n d_i^n$$

$$\mathrm{dsum}_4^m = -r_{4,1}^m \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq 1,4}}^{6} d_i^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{4,i}^m d_i^m$$

$$\mathrm{Psum}_1^n = \tilde{P}_1^{f,n} - C_1^{a,n}\bar{P}^n - C_1^{d,n}\tilde{P}_1^{c,n}$$

$$\mathrm{Psum}_4^m = \tilde{P}_4^{f,m} - C_4^{a,m}\bar{P}^m - C_4^{d,m}\tilde{P}_4^{c,m}$$

Следователно:

$$f_1^{s,n} = C_1^{d,n} g_1^n + C_1^{a,n}\bar{f}^n + t_1^n$$

$$f_4^{s,m} = C_4^{d,m} g_4^m + C_4^{a,m}\bar{f}^m + t_4^m$$

За моментите аналогично са в сила връзките:

$$f_1^{w,n} = r_{7,7}^n d_7^n + r_{7,10}^n d_{10}^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n}$$

$$f_4^{w,m} = r_{10,7}^m d_7^m + r_{10,10}^m d_{10}^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m}$$

$$f_1^{w,n} = r_{7,7}^n \left(g_7^n - \tilde{P}_7^{c,n}\right) + r_{7,10}^n d_{10}^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n}$$

$$f_4^{w,m} = r_{10,7}^m d_7^m + r_{10,10}^m \left(g_{10}^m - \tilde{P}_{10}^{c,m}\right) + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m}$$

$$f_1^{w,n} = r_{7,7}^n g_7^n + r_{7,10}^n d_{10}^n + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{7,i}^n d_i^n + \tilde{P}_7^{f,n} - r_{7,7}^n \tilde{P}_7^{c,n}$$

$$f_4^{w,m} = r_{10,10}^m g_{10}^m + r_{10,7}^m d_7^m + \sum_{i\neq 1,4,7,10} r_{10,i}^m d_i^m + \tilde{P}_{10}^{f,m} - r_{10,10}^m \tilde{P}_{10}^{c,m}$$

Нека:

$$C_w^{d,n} = r_{7,7}^n$$

$$C_w^{d,m} = r_{10,10}^m$$

$$t_7^n = \mathrm{dsum}_7^n + \mathrm{Psum}_7^n,$$

$$t_{10}^m = \mathrm{dsum}_{10}^m + \mathrm{Psum}_{10}^m$$

където:

$$\mathrm{dsum}_7^n = \sum_{i\neq 1,4,7} r_{7,i}^n d_i^n$$

$$\mathrm{dsum}_{10}^m = \sum_{i\neq 1,4,10} r_{10,i}^m d_i^m$$

$$\mathrm{Psum}_7^n = \tilde{P}_7^{f,n} - r_{7,7}^n \tilde{P}_7^{c,n}$$

$$\mathrm{Psum}_{10}^m = \tilde{P}_{10}^{f,m} - r_{10,10}^m \tilde{P}_{10}^{c,m}$$

Следователно:

$$f_1^{w,n} = C_w^{d,n} g_7^n + t_7^n$$
$$f_4^{w,m} = C_w^{d,m} g_{10}^m + t_{10}^m$$

IV.2. Построяване на полиномите за двумерната задача

Построяването на полиномите за двумерната задача е направено на основата на идеи и разсъждения, използвани за конструирането на полиномната компонента за метода HEXNEM3, описан в [Христосков, 2013]. Същият полиномен базис се използва и в програмата DYN3D [Grundmann et al., 2005].

1) Нека $p_0(x',y')$ е полином от нулева степен:

$$p_0(x',y') = \frac{1}{N_0}$$

$$N_0^2 = \iint_{F'_{hex}} p_0^2(x',y')dx'dy'$$

$$= \iint_{F'_{hex}} dx'dy' = \int_{-1}^{0} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy' + \int_{0}^{1} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'$$

$$= 2\int_{-1}^{0} dx'\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right) + 2\int_{0}^{1} dx'\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)$$

$$= \left(\frac{4}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \left(\frac{4}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = 2\sqrt{3} = F'_{hex} = \frac{F_{hex}}{h^2}$$

2) Нека $p_1(x',y')$ е полином от първа степен по x':

$$p_1(x',y') = \frac{x'}{N_1}$$

Чрез пряка проверка се установява ортогоналността с $p_0(x',y')$:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'dy'\, p_0(x',y')p_1(x',y') = \iint_{F'_{hex}} dx'\,x'\,dy' = \int_{-1}^{0} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy' + \int_{0}^{1} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'$$

$$= 2\int_{-1}^{0} dx'\,x'\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right) + 2\int_{0}^{1} dx'\,x'\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)$$

$$= \underbrace{\frac{4}{\sqrt{3}}\int_{-1}^{1} dx'\,x'}_{(=0)} + \underbrace{\frac{2}{\sqrt{3}}\left(\int_{-1}^{0} dx'\,x'^2 - \int_{0}^{1} dx'\,x'^2\right)}_{\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{3}=0\right)} = 0$$

$$
\begin{aligned}
N_1^2 &= \iint\limits_{F'_{hex}} p_1^2(x',y')dx'\,dy' \\
&= \iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,x'^2\,dy' = 2\int_{-1}^{0} dx'\,x'^2\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)+2\int_{0}^{1} dx'\,x'^2\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right) \\
&= \frac{4}{\sqrt{3}}\int_{-1}^{1} dx'\,x'^2+\frac{2}{\sqrt{3}}\left(\int_{-1}^{0} dx'\,x'^3-\int_{0}^{1} dx'\,x'^3\right) \\
&= \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{2}{3}+\frac{2}{\sqrt{3}}\left(-\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\right)=\frac{5}{9}\sqrt{3}
\end{aligned}
$$

3) Нека $p_2(x',y')$ е полином от първа степен по y':

$$
p_2(x',y')=\frac{y'}{N_2}
$$

Чрез пряка проверка се установява ортогоналността с $p_0(x',y')$:

$$
\begin{aligned}
\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_0(x',y')p_2(x',y') &= \iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,y' = \int_{-1}^{0} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y' + \int_{0}^{1} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y' \\
&= \frac{1}{2}\int_{-1}^{0} dx'\left[\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2-\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2\right] \\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{0}^{1} dx'\left[\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2-\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2\right] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

и с $p_1(x',y')$

$$
\begin{aligned}
\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_1(x',y')p_2(x',y') &= \iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,x'\,dy'\,y' = \int_{-1}^{0} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y' + \int_{0}^{1} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y' \\
&= \frac{1}{2}\int_{-1}^{0} dx'\,x'\left[\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2-\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2\right] \\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{0}^{1} dx'\,x'\left[\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2-\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^2\right] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$$N_2^2 = \iint\limits_{F'_{hex}} p_2^2(x', y')dx'\,dy'$$

$$= \iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,y'^2 = \frac{2}{3}\int\limits_{-1}^{0} dx'\left(\frac{2}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 + \frac{2}{3}\int\limits_{0}^{1} dx'\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3$$

$$= \frac{2}{3}\sqrt{3}\int\limits_{\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} dzz^3 - \frac{2}{3}\sqrt{3}\int\limits_{\frac{2}{\sqrt{3}}}^{\frac{1}{\sqrt{3}}} dzz^3 = \frac{4}{\sqrt{3}}\int\limits_{\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} dzz^3$$

$$= \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{1}{4}\left(\frac{16}{9} - \frac{1}{9}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{15}{9} = \frac{5}{9}\sqrt{3}$$

4) Нека $p_3(x', y')$ е полином от втора степен по x' и y' с общ вид:

$$p_3(x', y') = \frac{1}{N_3}\left(\alpha + \beta_1 x'^2 + \beta_2 y'^2 + \gamma x'\,y'\right)$$

Условията за ортогоналност на $p_3(x', y')$ с предходните полиноми изискват пресмятането на следните интеграли:

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'dy' = 2\sqrt{3}$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'dx'dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'y'dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'^2dx'dy' = \frac{5}{9}\sqrt{3}$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'y'^2dy' = \frac{5}{9}\sqrt{3}$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'dx'y'dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'^3dx'dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'y'^3dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'^2dx'y'dy' = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} x'dx'y'^2dy' = 0$$

Първите шест резултата вече бяха получени. Остават:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\, x'^3\, dy' = \int_{-1}^{0} dx'\, x'^3 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy' + \int_{0}^{1} dx'\, x'^3 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'$$

$$= 2\left[\int_{-1}^{0} dx'\, x'^3 \left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right) + \int_{0}^{1} dx'\, x'^3 \left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)\right]$$

$$= \frac{4}{\sqrt{3}}\int_{-1}^{1} dx'\, x'^3 + \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\int_{-1}^{0} dx'\, x'^4 - \int_{0}^{1} dx'\, x'^4\right]$$

$$= 0 + \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\frac{1}{5}-\frac{1}{5}\right] = 0$$

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\, dy'\, y'^3 = \int_{-1}^{0} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y'^3 + \int_{0}^{1} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y'^3$$

$$= \int_{-1}^{0} dx' \times 0 + \int_{0}^{1} dx' \times 0 = 0$$

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\, x'^2\, dy'\, y' = \int_{-1}^{0} dx'\, x'^2 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y' + \int_{0}^{1} dx'\, x'^2 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y'$$

$$= \int_{-1}^{0} dx'\, x'^2 \times 0 + \int_{0}^{1} dx'\, x'^2 \times 0 = 0$$

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\, x'\, dy'\, y'^2 = \int_{-1}^{0} dx'\, x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y'^2 + \int_{0}^{1} dx'\, x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\, y'^2$$

$$= \frac{2}{3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\, x' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 + \int_{0}^{1} dx'\, x' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3\right]$$

$$= \frac{2}{3}\sqrt{3}\left[\int_{-1}^{0} dx' \left(+\frac{x'}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 - \int_{0}^{1} dx' \left(-\frac{x'}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3\right]$$

$$= \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\begin{array}{l} \int_{-1}^{0} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{x'}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 - \frac{2}{\sqrt{3}}\int_{-1}^{0} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 \\ -\left[\int_{0}^{1} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{x'}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 - \frac{2}{\sqrt{3}}\int_{0}^{1} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3\right] \end{array}\right]$$

$$= \frac{2}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{3}\int_{\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} dz z^4 + \sqrt{3}\int_{\frac{2}{\sqrt{3}}}^{\frac{1}{\sqrt{3}}} dz z^4 - \frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{3}\int_{\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} dz z^3 - \frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{3}\int_{\frac{2}{\sqrt{3}}}^{\frac{1}{\sqrt{3}}} dz z^3\right] = 0$$

Изискването за ортогоналност с $p_0(x', y')$ води до следното уравнение за коефициентите в $p_3(x', y')$:

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\; p_0(x',y')p_3(x',y') = \iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(\alpha + \beta_1 x'^2 + \beta_2 y'^2 + \gamma x' y'\right)$$

$$= 2\sqrt{3}\alpha + \frac{5}{9}\sqrt{3}(\beta_1 + \beta_2) = 0$$

Изискванията за ортогоналност с $p_1(x',y')$ и $p_2(x',y')$ са изпълнени и не налагат допълнителни ограничения за $p_3(x',y')$:

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\; p_1(x',y')p_3(x',y') = \frac{1}{N_1}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,x'\left(\alpha + \beta_1 x'^2 + \beta_2 y'^2 + \gamma x' y'\right)$$

$$= \frac{1}{N_1}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(\alpha x' + \beta_1 x'^3 + \beta_2 x' y'^2 + \gamma x'^2 y'\right) = \frac{1}{N_1}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(0+0+0+0\right) = 0$$

$$\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\; p_2(x',y')p_3(x',y') = \frac{1}{N_2}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,y'\left(\alpha + \beta_1 x'^2 + \beta_2 y'^2 + \gamma x' y'\right)$$

$$= \frac{1}{N_2}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(\alpha y' + \beta_1 x'^2 y' + \beta_2 y'^3 + \gamma x' y'^2\right) = \frac{1}{N_1}\iint\limits_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(0+0+0+0\right) = 0$$

Следователно единствено условие за коефициентите в $p_3(x',y')$ е следното уравнение:

$$2\sqrt{3}\alpha + \frac{5}{9}\sqrt{3}(\beta_1 + \beta_2) = 0\,.$$

Сред неговите решения са:

а) $\beta_1 = \beta_2 = k$ и $\alpha = -\frac{5}{9}k$.

б) $\beta_1 = k$, $\beta_2 = -\beta_1$ и $\alpha = 0$.

Стойността на $k \neq 0$ е без значение, защото ще се компенсира от подлежащата на определяне нормировка. Различните по модул стойности на β_1 и β_2 ще нарушат симетриите, изисквани от геометрията на задачата. От друга страна, ако вариант б) не бъде включен в разглежданията, на полиномната част на представянето на потока ще бъде наложена силно ограничаваща нефизична симетрия.

Например, при $k = 1$ и $\gamma = 0$ (стойността на γ може да бъде произволна) вариантът а) е:

$$p_3(x',y') = \frac{1}{N_3}\left(x'^2 + y'^2 - \frac{5}{9}\right)$$

Изискването за нормировка е:

$$N_3^2 = \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy' \left(x'^2 + y'^2 - \frac{5}{9} \right)^2$$

$$= \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy' \left(x'^4 + y'^4 + \left(\frac{5}{9}\right)^2 + 2x'^2\,y'^2 - 2\frac{5}{9}x'^2 - 2\frac{5}{9}y'^2 \right)$$

$$= \left(\frac{5}{9}\right)^2 2\sqrt{3} - \left(\frac{5}{9}\right)^2 2\sqrt{3} - \left(\frac{5}{9}\right)^2 2\sqrt{3} + \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy' \left(x'^4 + y'^4 + 2x'^2\,y'^2 \right)$$

$$= -\left(\frac{5}{9}\right)^2 2\sqrt{3} + \iint_{F'_{hex}} dx'\,x'^4\,dy' + \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,y'^4 + 2\iint_{F'_{hex}} dx'\,x'^2\,dy'\,y'^2$$

където допълнително:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\,x'^4\,dy' = \int_{-1}^{0} dx'\,x'^4 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy' + \int_{0}^{1} dx'\,x'^4 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'$$

$$= 2\int_{-1}^{0} dx'\,x'^4 \left(\frac{2}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}}x' \right) + 2\int_{0}^{1} dx'\,x'^4 \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}x' \right)$$

$$= \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{-1}^{1} dx'\,x'^4 + \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\int_{-1}^{0} dx'\,x'^5 - \int_{0}^{1} dx'\,x'^5 \right)$$

$$= \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{2}{5} + \frac{2}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{6} - \frac{1}{6} \right) = \frac{8}{5\sqrt{3}} - \frac{2}{3\sqrt{3}} = \frac{14}{15\sqrt{3}}$$

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,y'^4 = \int_{-1}^{0} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^4 + \int_{0}^{1} dx' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^4$$

$$= \frac{2}{5} \left[\int_{-1}^{0} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}}x' \right)^5 + \int_{0}^{1} dx' \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}x' \right)^5 \right]$$

$$= \frac{2}{5}\sqrt{3} \left[\int_{\frac{1}{\sqrt{3}}}^{\frac{2}{\sqrt{3}}} dz z^5 - \int_{\frac{2}{\sqrt{3}}}^{\frac{1}{\sqrt{3}}} dz z^5 \right] = \frac{4}{5}\sqrt{3}\,\frac{1}{6} \left[\frac{64}{27} - \frac{1}{27} \right] = \frac{4}{30}\frac{63}{27}\sqrt{3} = \frac{14}{15\sqrt{3}}$$

$$2\iint_{F'_{hex}} dx'\,x'^2\,dy'\,y'^2 = 2\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^2 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^2 + \int_{0}^{1} dx'\,x'^2 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^2\right]$$

$$= \frac{4}{3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^2\left(\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3 + \int_{0}^{1} dx'\,x'^2\left(\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'\right)^3\right]$$

$$= \frac{4}{3}\left[\begin{array}{l}\int_{-1}^{0} dx'\,x'^2\left(\frac{8}{3\sqrt{3}}+3\frac{4}{3}\frac{1}{\sqrt{3}}x'+3\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{3}x'^2+\frac{1}{3\sqrt{3}}x'^3\right)\\ +\int_{0}^{1} dx'\,x'^2\left(\frac{8}{3\sqrt{3}}-3\frac{4}{3}\frac{1}{\sqrt{3}}x'+3\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{3}x'^2-\frac{1}{3\sqrt{3}}x'^3\right)\end{array}\right]$$

$$= \frac{4}{3}\left[\begin{array}{l}\frac{8}{3\sqrt{3}}\int_{-1}^{1} dx'\,x'^2+\frac{4}{\sqrt{3}}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^3-\int_{0}^{1} dx'\,x'^3\right]\\ +\frac{2}{\sqrt{3}}\int_{-1}^{1} dx'\,x'^4+\frac{1}{3\sqrt{3}}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^5-\int_{0}^{1} dx'\,x'^5\right]\end{array}\right]$$

$$= \frac{4}{3}\left[\begin{array}{l}\frac{8}{3\sqrt{3}}\frac{2}{3}+\frac{4}{\sqrt{3}}\left[-\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\right]\\ +\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{2}{5}+\frac{1}{3\sqrt{3}}\left[-\frac{1}{6}-\frac{1}{6}\right]\end{array}\right]$$

$$= \frac{4}{3}\left[\frac{16}{9\sqrt{3}}-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{4}{5\sqrt{3}}-\frac{1}{9\sqrt{3}}\right] = \frac{4}{3\sqrt{3}}\left[\frac{15}{9}-\frac{6}{5}\right] = \frac{4}{3\sqrt{3}}\frac{21}{45} = \frac{2}{3}\frac{14}{15\sqrt{3}}$$

Така, за нормировката на полинома се получава:

$$N_3^2 = -\left(\frac{5}{9}\right)^2 2\sqrt{3}+\frac{14}{15\sqrt{3}}+\frac{14}{15\sqrt{3}}+\frac{2}{3}\frac{14}{15\sqrt{3}}$$

$$= \frac{8}{3}\frac{14}{15}\frac{\sqrt{3}}{3}-\frac{50}{81}\sqrt{3} = \frac{86}{405}\sqrt{3}$$

При $k=1$ и $\gamma=0$ (стойността на γ може да бъде произволна) вариантът б) е:

$$p_4(x',y') = \frac{1}{N_4}\left(x'^2-y'^2\right)$$

Проверка за ортогоналност е нужна само с $p_3(x',y')$:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_3(x',y')p_4(x',y') = \frac{1}{N_3}\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^2+y'^2-\frac{5}{9}\right)\left(x'^2-y'^2\right)$$

$$= \frac{1}{N_3}\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^4-y'^4\right)-\frac{1}{N_3}\frac{5}{9}\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^2-y'^2\right) = 0-0=0$$

Изискването за нормировка е:

$$N_4^2 = \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^2 - y'^2\right)^2$$
$$= \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^4 + y'^4 - 2x'^2\,y'^2\right)$$
$$= \frac{14}{15\sqrt{3}} + \frac{14}{15\sqrt{3}} - \frac{2}{3}\frac{14}{15\sqrt{3}} = \frac{4}{3}\frac{14}{15\sqrt{3}} = \frac{4}{9}\frac{14}{15}\sqrt{3} = \frac{56}{135}\sqrt{3}$$

Третата принципна възможност е $k = 0$, $\alpha = 0$ и $\gamma \neq 0$. Тя също трябва да бъде включена в модела за потока, защото внася в него допълнителни свойства. От друга страна, съчетаването на $\gamma \neq 0$ с ненулеви стойности на α и/или $\beta_{1,2}$ не внася допълнителни свойства в модела и не е нужно (точно както и включването в полинома от втора степен на самостоятелни първи степени на x' или y'). Очевидно, ненулевата стойност на γ може да бъде произволна. Така, при $\gamma = 1$:

$$p_5(x', y') = \frac{1}{N_5} x'\,y'$$

Проверка за ортогоналност е нужна с $p_3(x', y')$ и $p_4(x', y')$:

$$\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_3(x', y')p_5(x', y') = \frac{1}{N_3} \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^2 + y'^2 - \frac{5}{9}\right)x'\,y'$$
$$= \frac{1}{N_3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^3 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y' + \int_{0}^{1} dx'\,x'^3 \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'\right]$$
$$+ \frac{1}{N_3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^3 + \int_{0}^{1} dx'\,x' \int_{-\frac{2}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}x'}^{\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{\sqrt{3}}x'} dy'\,y'^3\right]$$
$$- \frac{5}{9}\frac{1}{N_3} \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,x'\,y'$$
$$= \frac{1}{N_3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x'^3 \times 0 + \int_{0}^{1} dx'\,x'^3 \times 0\right]$$
$$+ \frac{1}{N_3}\left[\int_{-1}^{0} dx'\,x' \times 0 + \int_{0}^{1} dx'\,x' \times 0\right]$$
$$-0 = 0$$
$$\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_4(x', y')p_5(x', y') = \frac{1}{N_4} \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\left(x'^2 - y'^2\right)x'\,y'$$
$$= 0 - 0 = 0$$

Изискването за нормировка е:

$$N_5^2 = \iint_{F'_{hex}} dx'\,x'^2\,dy'\,y'^2 =$$
$$\frac{1}{9}\frac{14}{15}\sqrt{3} = \frac{14}{135}\sqrt{3}$$

В следващата таблица са представени полиномите и нормировъчните коефициенти към тях.

Табл. IV.1. Ортогонален базис от полиноми за двумерната задача

i	$p_i(x', y')$	$\frac{1}{N_i}$	забележка
0	$\frac{1}{N_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2\sqrt{3}}}$	
1	$\frac{x'}{N_1}$	$\frac{3}{\sqrt{5\sqrt{3}}}$	
2	$\frac{y'}{N_2}$	$\frac{3}{\sqrt{5\sqrt{3}}}$	$N_2 = N_1$
3	$\frac{x'^2+y'^2-\frac{5}{9}}{N_3}$	$\frac{9\sqrt{5}}{\sqrt{2}\sqrt{43\sqrt{3}}}$	
4	$\frac{x'^2-y'^2}{N_4}$	$\frac{3\sqrt{3}\sqrt{5}}{2\sqrt{2}\sqrt{7\sqrt{3}}}$	
5	$\frac{x'y'}{N_5}$	$\frac{3\sqrt{3}\sqrt{5}}{\sqrt{2}\sqrt{7\sqrt{3}}}$	$N_5 = \frac{1}{2}N_4$

IV.3. Построяване на полиномите за едномерната задача

Нека полиномите се търсят спрямо локална за съответния нод координатна система, като началото на тази система е в центъра на нода. Тогава:

$$z_d = -\frac{H_n}{2}$$

$$z_u = \frac{H_n}{2}$$

Така за полиномите последователно се получава:

нека $p_0(z) = \frac{1}{N_0}$, тогава от $\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_0^2(z)dz = 1$ следва $N_0 = \sqrt{H_n}$;

нека $p_1(z) = \frac{z}{N_1}$; условието за ортогоналност с $p_0(z)$ е изпълнено;

от $\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_1^2(z)dz = \frac{1}{N_1^2}\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} z^2 dz = 1$ следва $N_1 = \frac{\sqrt{H_n^3}}{2\sqrt{3}}$;

нека $p_2(z) = \left(\alpha + \beta z + \gamma z^2\right)$; от $\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_0(z)p_2(z)dz = \frac{1}{N_0}\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} \left(\alpha + \beta z + \gamma z^2\right)dz = 0$

Получава се $\gamma = -\dfrac{12\alpha}{H_n^2}$; от $\int\limits_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_1(z)p_2(z)dz = \dfrac{1}{N_1}\int\limits_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} \left(\alpha z + \beta z^2 + \gamma z^3\right)dz = 0$

следва $\beta = 0$, а от $\int\limits_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_2^2(z)dz = \int\limits_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} \left(\alpha - \dfrac{12\alpha}{H_n^2}\right)^2 dz = 1$ следва $\alpha = \dfrac{\sqrt{5}}{2\sqrt{H_n}}$.

Окончателно полиномите са следните:

$$p_0(z) = \frac{1}{\sqrt{H_n}};$$

$$p_1(z) = \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{H_n}}\frac{z}{H_n};$$

$$p_2(z) = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\left(\frac{1}{2} - 6\frac{z^2}{H_n^2}\right).$$

IV.4. Коефициенти в полиномното разложение на аксиалната утечка

Решава се задачата:

$$\sum_{k=0}^{6}\left[\sum_{i=0}^{5} p_{i,k}l_i - L_k\right]^2 \to \min$$

Стойностите на $p_{i,k}, k = 1,...,6$ са съгласно Таблица IV.4 и определенията към нея, а стойностите на $p_{i,0}$ са както следва:

$$p_{0,0} = \frac{1}{N_0}\frac{1}{F'_{hex}}\iint_{F'_{hex}} dx'\,dy' = \frac{1}{N_0}\frac{1}{F'_{hex}}F'_{hex} = \frac{1}{N_0}$$

$p_{i,0} = 0, i = 1,...,5$ (поради ортогоналността на полиномите)

Най-напред, нека:

$$l_0 p_{0,0} = L_0 \Rightarrow l_0 = N_0 L_0$$

Това е целесъобразно, най-вече защото нодалната схема дава точна оценка на L_0.

Остатъкът от задачата е:

$$\sum_{k=1}^{6}\left[\sum_{i=1}^{5} p_{i,k}l_i - \left(L_k - p_{0,k}l_0\right)\right]^2 \to \min$$

За намиране на минимума се решава следната система от уравнения относно $l_i, i = 1,...,5$:

$$\frac{\partial}{\partial l_j}\sum_{k=1}^{6}\left[\sum_{i=1}^{5} p_{i,k}l_i - \left(L_k - p_{0,k}l_0\right)\right]^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{5}\left[\sum_{k=1}^{6} p_{j,k}p_{i,k}\right]l_i = \sum_{k=1}^{6} p_{j,k}\left(L_k - p_{0,k}l_0\right)$$

или в съкратен запис:

$$\sum_{i=1}^{5} a_{ji} l_i = b_j \ (i, j = 1,\dots,5) \qquad (1)$$

Величините $a_{ji} \equiv \sum_{k=1}^{6} p_{j,k} p_{i,k}$ и $b_j \equiv \sum_{k=1}^{6} p_{j,k}(L_k - p_{0,k} l_0) = \sum_{k=1}^{6} p_{j,k} L_k - a_{j0} l_0$ са както следва:

Табл. IV.2. Матрица на коефициентите в (1)

a_{ji}	0	1	2	3	4	5
0	$6\alpha^2$	0	0	$6\frac{5}{9}\alpha\gamma$	0	0
1	0	$12\beta^2$	0	0	0	0
2	0	0	$12\beta^2$	0	0	0
3	$6\frac{5}{9}\alpha\gamma$	0	0	$6\left(\frac{5}{9}\gamma\right)^2$	0	0
4	0	0	0	0	$12\left(\frac{4}{9}\delta\right)^2$	0
5	0	0	0	0	0	$12\left(\frac{4}{9}\delta\right)^2$

(В сиво са величините, нужни само за формиране на b_j. Определенията на $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ са съгласно поясненията към таблица IV.4.)

Табл. IV.3. Вектор на десните части в (1)

j	b_j
1	$\beta(2L_1 + L_2 - L_3 - 2L_4 - L_5 + L_6)$
2	$\sqrt{3}\beta(L_2 + L_3 - L_5 - L_6)$
3	$\frac{5}{9}\gamma(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6) - 6\frac{5}{9}\alpha\gamma l_0$
4	$\frac{4}{9}\delta(2L_1 - L_2 - L_3 + 2L_4 - L_5 - L_6)$
5	$\sqrt{3}\frac{4}{9}\delta(L_2 - L_3 + L_5 - L_6)$

Така, уравненията (1) имат явния вид:

$$12\beta^2 l_1 = \beta\left(2L_1 + L_2 - L_3 - 2L_4 - L_5 + L_6\right)$$
$$12\beta^2 l_2 = \sqrt{3}\beta\left(L_2 + L_3 - L_5 - L_6\right)$$
$$6\left(\frac{5}{9}\gamma\right)^2 l_3 = \frac{5}{9}\gamma\left(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6\right) - 6\frac{5}{9}\alpha\gamma l_0$$
$$12\left(\frac{4}{9}\delta\right)^2 l_4 = \frac{4}{9}\delta\left(2L_1 - L_2 - L_3 + 2L_4 - L_5 - L_6\right)$$
$$12\left(\frac{4}{9}\delta\right)^2 l_5 = \sqrt{3}\frac{4}{9}\delta\left(L_2 - L_3 + L_5 - L_6\right)$$

Или, след заместване на съответните означения:

$$\frac{6}{N_1} l_1 = \left(2L_1 + L_2 - L_3 - 2L_4 - L_5 + L_6\right)$$
$$\frac{2\sqrt{3}}{N_2} l_2 = \left(L_2 + L_3 - L_5 - L_6\right)$$
$$\left(\frac{10}{3}\frac{1}{N_3}\right) l_3 = \left(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6\right) - 6L_0$$
$$\left(\frac{16}{3}\frac{1}{N_4}\right) l_4 = \left(2L_1 - L_2 - L_3 + 2L_4 - L_5 - L_6\right)$$
$$\left(\frac{8}{3\sqrt{3}}\frac{1}{N_5}\right) l_5 = \left(L_2 - L_3 + L_5 - L_6\right)$$

Окончателният резултат за коефициентите в представянето на напречната утечка е:

$$l_0 = N_0 L_0$$
$$l_1 = \frac{N_1}{6}\left(2L_1 + L_2 - L_3 - 2L_4 - L_5 + L_6\right)$$
$$l_2 = \frac{N_2}{2\sqrt{3}}\left(L_2 + L_3 - L_5 - L_6\right)$$
$$l_3 = \frac{3N_3}{10}\left(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6 - 6L_0\right)$$
$$l_4 = \frac{3N_4}{16}\left(2L_1 - L_2 - L_3 + 2L_4 - L_5 - L_6\right)$$
$$l_5 = \frac{3\sqrt{3}N_5}{8}\left(L_2 - L_3 + L_5 - L_6\right)$$

IV.5. Диагонализация на двугруповата матрица с дифузионни константи

Характеристичното уравнение за $\hat{\mathbf{A}}$ е:

$$\left(A_{1,1} - \lambda\right)\left(A_{2,2} - \lambda\right) - A_{1,2}A_{2,1} = 0$$
$$\lambda^2 - \left(A_{1,1} + A_{2,2}\right)\lambda + \left(A_{1,1}A_{2,2} - A_{1,2}A_{2,1}\right) = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left[\left(A_{1,1}+A_{2,2}\right) \mp \sqrt{\left(A_{1,1}+A_{2,2}\right)^2 - 4\left(A_{1,1}A_{2,2} - A_{1,2}A_{2,1}\right)}\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\left(A_{1,1}+A_{2,2}\right) \mp \sqrt{\left(A_{1,1}-A_{2,2}\right)^2 + 4A_{1,2}A_{2,1}}\right]$$

Редът е избран така, че $|\lambda|_1 < |\lambda_2|$, при което f_1 ще бъде главният мод, а f_2 – преходният в нестационарната двугрупова дифузионна задача.

Собствените вектори обикновено се избират така, че:

$$\hat{\mathbf{Z}} = \begin{pmatrix} 1 & r_2 \\ r_1 & 1 \end{pmatrix},$$

тъй като се очаква $r_{1,2}$ да са съществено по-малки от 1.

Собствени вектори на $\hat{\mathbf{A}}$:

$$A_{1,1} + A_{1,2}r_1 = \lambda_1$$
$$A_{2,1} + A_{2,2}r_1 = \lambda_1 r_1$$
$$r_1 = -\frac{A_{1,1}-\lambda_1}{A_{1,2}} = -\frac{A_{2,1}}{A_{2,2}-\lambda_1} \quad \text{(използва се вторият израз)}$$
$$r_2 A_{1,1} + A_{1,2} = \lambda_2 r_2$$
$$r_2 A_{2,1} + A_{2,2} = \lambda_2$$
$$r_2 = -\frac{A_{2,2}-\lambda_2}{A_{2,1}} = -\frac{A_{1,2}}{A_{1,1}-\lambda_2}$$

Обратна на $\hat{\mathbf{Z}}$:

$$\hat{\mathbf{Z}}^{-1} = \frac{1}{1-r_1 r_2}\begin{pmatrix} 1 & -r_2 \\ -r_1 & 1 \end{pmatrix}$$

Така окончателно:

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{\Lambda}}\hat{\mathbf{Z}}^{-1}$$

IV.6. Основни матрици в HEXNEM3

Видът и структурата на матриците е в съгласие с [Христосков, 2013].

IV.6.1. Компоненти на средния поток

Това са величините $\frac{1}{L_k^s}\iint_{L_k^s} dx'dy'\Phi\left(x',y'\right)$.

Компонента $p_{i,k}^{f,s} \equiv \frac{1}{L_k^s}\iint_{L_k^s} dx'dy'\,p_i\left(x',y'\right)$

Нека:

$$\alpha = \frac{1}{N_0},\ \beta = \frac{1}{2}\frac{1}{N_1} = \frac{1}{2}\frac{1}{N_2},\ \gamma = \frac{1}{N_3}\quad \delta = \frac{1}{N_4} = \frac{1}{2}\frac{1}{N_5},$$

където $\{N_i\}$ са нормировъчните множители на полиномите $p_i\left(x',y'\right), i = 0,...,5$.

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.4. $p_{i,k}^{f,s} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \, p_i(x',y')$

$p_{i,k}^{f,s}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
0	α	α	α	α	α	α
1	2β	β	$-\beta$	-2β	$-\beta$	β
2	0	$\sqrt{3}\beta$	$\sqrt{3}\beta$	0	$-\sqrt{3}\beta$	$-\sqrt{3}\beta$
3	$\frac{5}{9}\gamma$	$\frac{5}{9}\gamma$	$\frac{5}{9}\gamma$	$\frac{5}{9}\gamma$	$\frac{5}{9}\gamma$	$\frac{5}{9}\gamma$
4	$\frac{8}{9}\delta$	$-\frac{4}{9}\delta$	$-\frac{4}{9}\delta$	$\frac{8}{9}\delta$	$-\frac{4}{9}\delta$	$-\frac{4}{9}\delta$
5	0	$\sqrt{3}\frac{4}{9}\delta$	$-\sqrt{3}\frac{4}{9}\delta$	0	$\sqrt{3}\frac{4}{9}\delta$	$-\sqrt{3}\frac{4}{9}\delta$

Компонента $Q_{i,k}^{f,ss} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s.(x',y')\right)$

Нека:

$$\alpha \equiv \exp(B') \;\; \beta \equiv \exp(-B') \;\; \gamma \equiv \frac{1}{B'}\left(\exp(B')-1\right) \;\; \delta \equiv \frac{1}{B'}\left(1-\exp(-B')\right)$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.5. $Q_{i,k}^{f,ss} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s.(x',y')\right)$

$Q_{i,k}^{f,ss}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	α	γ	δ	β	δ	γ
2	γ	α	γ	δ	β	δ
3	δ	γ	α	γ	δ	β
4	β	δ	γ	α	γ	δ
5	δ	β	δ	γ	α	γ
6	γ	δ	β	δ	γ	α

Компонента $Q_{i,k}^{f,sw} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x',y')\right) \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s \cdot (x',y')\right)$

Нека:

$$\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left\{1+\left(1+\frac{1}{B'}\right)\left(1-\exp(B')\right)\right\}, \;\; \beta \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left\{1+\left(1-\frac{1}{B'}\right)\left(1-\exp(-B')\right)\right\}$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.6. $Q_{i,k}^{f,sw} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x', y') \right) \exp\left(B' \mathbf{e}_i^s \cdot (x', y') \right)$

$Q_{i,k}^{f,sw}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	0	-α	β	0	-β	α
2	-α	0	α	-β	0	β
3	-β	α	0	-α	β	0
4	0	β	-α	0	α	-β
5	β	0	-β	α	0	-α
6	α	-β	0	β	-α	0

IV.6.2. Компоненти на момента на потока

Това са величините $\frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \Phi(x', y')$

Компонента $p_{i,k}^{f,w} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) p_i(x', y')$

Нека:

$$\alpha = \frac{1}{6\sqrt{3}} \frac{1}{N_1}, \ \beta = \frac{1}{18} \frac{1}{N_2}, \ \gamma = \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{1}{N_4}, \ \delta = \frac{1}{18} \frac{1}{N_5},$$

където $\{N_i\}$ са нормировъчните множители на полиномите $p_i(x', y'), i = 0,...,5$.

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.7. $p_{i,k}^{f,w} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) p_i(x', y')$

$p_{i,k}^{f,w}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	0
1	0	α	$-\alpha$	0	α	$-\alpha$
2	2β	$-\beta$	$-\beta$	2β	$-\beta$	$-\beta$
3	0	0	0	0	0	0
4	0	γ	γ	0	$-\gamma$	$-\gamma$
5	2δ	δ	$-\delta$	-2δ	$-\delta$	δ

Компонента $Q_{i,k}^{f,ws} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \exp\left(B' \mathbf{e}_i^s . (x', y') \right)$

Нека:

$$\alpha \equiv \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left(1 + \left(\frac{1}{B'} - \frac{1}{2} \right) (1 - \exp(B')) \right), \ \beta \equiv \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{B'} \left(1 - \left(\frac{1}{B'} + \frac{1}{2} \right) (1 - \exp(-B')) \right)$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.8. $Q_{i,k}^{f,ws} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x',y')\right) \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s.(x',y')\right)$

$Q_{i,k}^{f,ws}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	0	α	$-\beta$	0	β	$-\alpha$
2	α	0	$-\alpha$	β	0	$-\beta$
3	β	$-\alpha$	0	α	$-\beta$	0
4	0	$-\beta$	α	0	$-\alpha$	β
5	$-\beta$	0	β	$-\alpha$	0	α
6	$-\alpha$	β	0	$-\beta$	α	0

Компонента $Q_{i,k}^{f,ww} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x',y')\right)\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x',y')\right) \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s \cdot (x',y')\right)$

Нека:

$$\alpha \equiv \frac{1}{9}\exp(B'),\ \beta \equiv \frac{1}{9}\exp(-B')$$

$$\gamma \equiv \frac{1}{6}\frac{1}{B'}\left[\left(\frac{8}{B'}+6\right)+\left(1+\left(\frac{8}{B'}+6\right)\left(\frac{1}{B'}-\frac{1}{2}\right)\right)(1-\exp(B'))\right]$$

$$\delta \equiv \frac{1}{6}\frac{1}{B'}\left[\left(\frac{8}{B'}-6\right)-\left(1+\left(\frac{8}{B'}-6\right)\left(\frac{1}{B'}+\frac{1}{2}\right)\right)(1-\exp(-B'))\right]$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.9. $Q_{i,k}^{f,ww} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x',y')\right)\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x',y')\right) \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s \cdot (x',y')\right)$

$Q_{i,k}^{f,ww}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	α	γ	δ	β	δ	γ
2	γ	α	γ	δ	β	δ
3	δ	γ	α	γ	δ	β
4	β	δ	γ	α	γ	δ
5	δ	β	δ	γ	α	γ
6	γ	δ	β	δ	γ	α

IV.6.3. Компоненти на средния ток

Това са величините $\frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla\Phi(x',y')$

Компонента $p_{i,k}^{c,s} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla p_i(x',y')$

Нека:

$$\beta = \frac{1}{2}\frac{1}{N_1} = \frac{1}{2}\frac{1}{N_2},\ \gamma = \frac{1}{N_3}\ \ \delta = \frac{1}{N_4} = \frac{1}{2}\frac{1}{N_5},$$

където $\{N_i\}$ са нормировъчните множители на полиномите $p_i(x', y'), i = 0,...,5$.

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.10. $p_{i,k}^{c,s} \equiv \frac{1}{L_k^s}\iint\limits_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla p_i(x', y')$

$p_{i,k}^{c,s}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	0
1	2β	β	$-\beta$	-2β	$-\beta$	β
2	0	$\sqrt{3}\beta$	$\sqrt{3}\beta$	0	$-\sqrt{3}\beta$	$-\sqrt{3}\beta$
3	2γ	2γ	2γ	2γ	2γ	2γ
4	2δ	$-\delta$	$-\delta$	2δ	$-\delta$	$-\delta$
5	0	$\sqrt{3}\delta$	$-\sqrt{3}\delta$	0	$\sqrt{3}\delta$	$-\sqrt{3}\delta$

Компонента $Q_{i,k}^{c,ss} \equiv \frac{1}{L_k^s}\iint\limits_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s.(x', y')\right)$

Нека:

$$\alpha \equiv B'\exp(B')\ \ \beta \equiv -B'\exp(-B')\ \ \gamma \equiv \frac{1}{2}\left(\exp(B')-1\right)\ \ \delta \equiv \frac{1}{2}\left(\exp(-B')-1\right)$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.11. $Q_{i,k}^{c,ss} \equiv \frac{1}{L_k^s}\iint\limits_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla \exp\left(B'\mathbf{e}_i^s.(x', y')\right)$

$Q_{i,k}^{c,ss}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	α	γ	δ	β	δ	γ
2	γ	α	γ	δ	β	δ
3	δ	γ	α	γ	δ	β
4	β	δ	γ	α	γ	δ
5	δ	β	δ	γ	α	γ
6	γ	δ	β	δ	γ	α

Компонента $Q_{i,k}^{c,sw} \equiv \frac{1}{L_k^s}\iint\limits_{L_k^s} dx'dy'\mathbf{e}_k^s.\nabla\left[\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c\cdot(x', y')\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_i^s\cdot(x', y')\right)\right]$

Нека:

$$\alpha \equiv \frac{1}{2\sqrt{3}}\left\{1 + 4\left[\frac{1}{4} + \frac{1}{B'}\right]\left(1-\exp(B')\right)\right\},\ \beta \equiv \frac{1}{2\sqrt{3}}\left\{1 + 4\left[\frac{1}{4} - \frac{1}{B'}\right]\left(1-\exp(-B')\right)\right\}$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.12. $Q_{i,k}^{c,sw} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \mathbf{e}_k^s . \nabla \left[\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x', y') \right) \exp\left(B' \mathbf{e}_i^s \cdot (x', y') \right) \right]$

$Q_{i,k}^{c,sw}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	0	$-\alpha$	$-\beta$	0	β	α
2	$-\alpha$	0	α	β	0	$-\beta$
3	β	α	0	$-\alpha$	$-\beta$	0
4	0	$-\beta$	$-\alpha$	0	α	β
5	$-\beta$	0	β	α	0	$-\alpha$
6	α	β	0	$-\beta$	$-\alpha$	0

IV.6.4. Компоненти на момента на тока

Това са величините $\frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla \Phi (x', y')$

Компонента $p_{i,k}^{c,w} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla p_i (x', y')$

Нека:

$\gamma = \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{1}{N_4}$, $\delta = \frac{1}{18} \frac{1}{N_5}$,

където $\{N_i\}$ са нормировъчните множители на полиномите $p_i(x', y'), i = 0, ..., 5$.

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.13. $p_{i,k}^{c,w} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla p_i (x', y')$

$p_{i,k}^{c,w}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	0	γ	γ	0	$-\gamma$	$-\gamma$
5	2δ	δ	$-\delta$	-2δ	$-\delta$	δ

Компонента $Q_{i,k}^{c,ws} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla \exp\left(B' \mathbf{e}_i^s . (x', y') \right)$

Нека:

$\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \left[1 + \left(\frac{1}{B'} - \frac{1}{2} \right) (1 - \exp(B')) \right]$, $\beta \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \left[1 - \left(\frac{1}{B'} + \frac{1}{2} \right) (1 - \exp(-B')) \right]$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.14. $Q_{i,k}^{c,ws} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla \exp \left(B' \mathbf{e}_i^s . (x', y') \right)$

$Q_{i,k}^{c,ws}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	0	α	β	0	$-\beta$	$-\alpha$
2	α	0	$-\alpha$	$-\beta$	0	β
3	$-\beta$	$-\alpha$	0	α	β	0
4	0	β	α	0	$-\alpha$	$-\beta$
5	β	0	$-\beta$	$-\alpha$	0	α
6	$-\alpha$	$-\beta$	0	β	α	0

Компонента $Q_{i,k}^{c,ww} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x', y') \right) \exp \left(B' \mathbf{e}_i^s \cdot (x', y') \right)$

Нека:

$$\alpha \equiv \frac{1}{9} B' \exp(B'),\ \beta \equiv -\frac{1}{9} B' \exp(-B')$$

$$\gamma \equiv \frac{1}{12} \left[\left(\frac{20}{B'} + 6 \right) + \left(1 + \left(\frac{20}{B'} + 6 \right) \left(\frac{1}{B'} - \frac{1}{2} \right) \right) (1 - \exp(B')) \right]$$

$$\delta \equiv -\frac{1}{12} \left[\left(\frac{20}{B'} - 6 \right) - \left(1 + \left(\frac{20}{B'} - 6 \right) \left(\frac{1}{B'} + \frac{1}{2} \right) \right) (1 - \exp(-B')) \right]$$

Крайният резултат е както следва.

Табл. IV.15. $Q_{i,k}^{c,ww} \equiv \frac{1}{L_k^s} \iint\limits_{L_k^s} dx'dy' \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x', y') \right) \mathbf{e}_k^s . \nabla \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot (x', y') \right) \exp \left(B' \mathbf{e}_i^s \cdot (x', y') \right)$

$Q_{i,k}^{c,ww}$						
$k\rightarrow$ $i\downarrow$	1	2	3	4	5	6
1	α	γ	δ	β	δ	γ
2	γ	α	γ	δ	β	δ
3	δ	γ	α	γ	δ	β
4	β	δ	γ	α	γ	δ
5	δ	β	δ	γ	α	γ
6	γ	δ	β	δ	γ	α

IV.6.5. Матрични елементи в задачата за модовете

За случая на положителен лапласиан елементите на матриците съвпадат с описаните по-горе. За случая на отрицателен лапласиан структурата на всички матрици съвпада, а елементите са както следва:

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{f,ss}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i\left(x',y'\right)=\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)+\cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)$

Така: $Q_{k,i}^{f,ss}=\dfrac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k}t_i\left(x',y'\right)ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha=\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right),$$

$$\beta=\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right),$$

$$\gamma=\frac{1}{\kappa'}\left[1-\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)\right)\right],$$

$$\delta=\frac{1}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-1\right)$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{f,sw}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i\left(x',y'\right)=\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c\cdot\mathbf{r}'\right)\left[\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)+\cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)\right]$

Така: $Q_{k,i}^{f,sw}=\dfrac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k}t_i\left(x',y'\right)ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'}\left[\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)+\frac{1}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-2\right],$$

$$\beta=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'}\left[\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-\frac{1}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-2\right]$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{f,ws}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i\left(x',y'\right)=\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)+\cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)$

Така: $Q_{k,i}^{f,ws}=\dfrac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k}\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\left(x',y'\right)\right)t_i\left(x',y'\right)ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'}\left[+\frac{2}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)\right)-1\right],$$

$$\beta=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'}\left[-\frac{2}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)\right)-1\right]$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{f,ww}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i\left(x',y'\right)=\left(\mathbf{e}_{l(i)}^c\cdot\mathbf{r}'\right)\left[\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)+\cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s\cdot\mathbf{r}'\right)\right]$

Така: $Q_{k,i}^{f,ww}=\dfrac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k}\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c\cdot\left(x',y'\right)\right)t_i\left(x',y'\right)ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha=\frac{1}{9}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)\right),\ \beta=\frac{1}{9}\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)\right)$$

$$\gamma=\frac{1}{3}\frac{1}{\kappa'}\left[\frac{1}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-5\right)-\left(1+\frac{4}{\kappa'^2}\right)\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-3\right]$$

$$\delta = \frac{1}{3}\frac{1}{\kappa'}\left[\frac{1}{\kappa'}\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa') - 5\right) + \left(1 + \frac{4}{\kappa'^2}\right)\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa') - 1\right) + 3\right]$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{c,ss}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i(x',y') = \sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right)$

Така: $Q_{k,i}^{c,ss} = \frac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k} \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla t_i(x',y')\,ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha = \kappa'\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa')\right),\ \beta = -\kappa'\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa')\right),\ \gamma = \frac{1}{2}\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa') - 1\right)$$

$$\delta = \frac{1}{2}\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa') - 1\right)$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{c,sw}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i(x',y') = \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\left[\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right)\right]$

Така: $Q_{k,i}^{c,sw} = \frac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k} \mathbf{e}_k^s \cdot \nabla t_i(x',y')\,ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left[+\frac{4}{\kappa'}\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa') - 1\right) - \left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa')\right) + 2\right],$$

$$\beta = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left[-\frac{4}{\kappa'}\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa') - 1\right) - \left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa')\right) + 2\right]$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{c,ws}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i(x',y') = \sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right)$

Така: $Q_{k,i}^{c,ws} = \frac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k} \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x',y')\right)\mathbf{e}_k^s \cdot \nabla t_i(x',y')\,ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left[\cos(\kappa') + \sin(\kappa') + \frac{2}{\kappa'}\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa') - 1\right) + 1\right],$$

$$\beta = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left[\cos(\kappa') - \sin(\kappa') - \frac{2}{\kappa'}\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa') - 1\right) + 1\right]$$

Матрица $\hat{\mathbf{Q}}^{c,ww}$ (структурата съвпада с тази при положителен лапласиан)

Нека $t_i(x',y') = \left(\mathbf{e}_{l(i)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\left[\sin\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \cos\left(\kappa'\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}'\right)\right]$

Така: $Q_{k,i}^{c,ww} = \frac{1}{L'^s_k}\int\limits_{L'^s_k} \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot (x',y')\right)\mathbf{e}_k^s \cdot \nabla t_i(x',y')\,ds'$. Съответните матрични елементи са:

$$\alpha = \frac{1}{9}\kappa'\left(\cos(\kappa') - \sin(\kappa')\right),\ \beta = -\frac{1}{9}\kappa'\left(\cos(\kappa') + \sin(\kappa')\right)$$

$$\gamma=\frac{1}{6}\left[\left(\frac{10}{\kappa'^2}+1\right)\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)-1\right)-\frac{2}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)+4\right)+3\right],$$

$$\delta=\frac{1}{6}\left[\left(\frac{10}{\kappa'^2}+1\right)\left(\cos\left(\kappa'\right)-\sin\left(\kappa'\right)-1\right)+\frac{2}{\kappa'}\left(\cos\left(\kappa'\right)+\sin\left(\kappa'\right)+4\right)+3\right]$$

IV.7. Коефициенти в полиномното разложение на потока

IV.7.1. Аксиална задача

$$f_1=\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_1(z)\Phi(z)dz=$$

$$=\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{H_n}}\frac{1}{H_n}\left(a_1-a_2\right)\frac{1}{\kappa}\left[H_n\cosh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)-\frac{2}{\kappa}\sinh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right]+c_1$$

$$f_2=\int_{-\frac{H_n}{2}}^{\frac{H_n}{2}} p_2(z)\Phi(z)dz=$$

$$=\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\left(a_1+a_2\right)\left\{\frac{1}{\kappa}\left[1-3\frac{\kappa^2H_n^2+8}{\kappa^2H_n^2}\right]\sinh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)+\frac{12H_n}{\kappa^2H_n^2}\cosh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right\}+c_2$$

От $a_1=\dfrac{d_de_u^- - d_ue_d^-}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}$, $a_2=\dfrac{d_de_u^+ - d_ue_d^+}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}$ следва:

$$a_1-a_2=\frac{d_de_u^- - d_ue_d^- - d_de_u^+ + d_ue_d^+}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}=$$

$$=\frac{d_u+d_d}{2}\frac{1}{\cosh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)}=$$

$$=-\frac{1}{\kappa}\frac{\left(\frac{J_u+J_d}{D}+P_u'+P_d'\right)}{2}\frac{1}{\cosh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)}$$

$$a_1+a_2=\frac{d_de_u^- - d_ue_d^- + d_de_u^+ - d_ue_d^+}{e_d^+e_u^- - e_d^-e_u^+}=$$

$$=-\frac{d_d-d_u}{2}\frac{1}{\sinh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)}$$

$$=-\frac{1}{\kappa}\frac{\frac{J_u-J_d}{D}+P_u'-P_d'}{2}\frac{1}{\sinh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)}$$

Окончателно за f_1 и f_2 получаваме:

$$f_1 = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{H_n}}\frac{1}{H_n}\frac{1}{\kappa^2}\left(\frac{J_r + J_l}{D} + P_r' + P_l'\right)\left[H_n - \frac{2}{\kappa}\tanh\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right] + c_1$$

$$f_2 = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{H_n}}\frac{1}{2\kappa^2}\left(\frac{J_r - J_l}{D} + P_r' - P_l'\right)\left\{2\left[1 + \frac{12}{\kappa^2 H_n^2}\right] - \frac{12}{\kappa H_n}\coth\left(\kappa\frac{H_n}{2}\right)\right\} + c_2 .$$

Напълно аналогично коефициентите в разложението на мода по полиноми са съответно:

при $\lambda > 0$:

$$c_1^h = \frac{1}{N_1}\frac{1}{\kappa^2}\left(g_u - g_d - \frac{2c_1}{N_1}\right)\left(\frac{H}{2} - C_g\right) + c_1$$

$$c_2^2 = \frac{1}{N_2}\frac{2}{\kappa^4 H^2}\left(g_u + g_d + \frac{12c_2}{N_2 H}\right)\left(\frac{6H}{C_g} - 12 - \kappa^2 H^2\right) + c_2$$

при $\lambda < 0$:

$$c_1^t = -\frac{1}{N_1}\frac{1}{\kappa^2}\left(g_u - g_d - \frac{2c_1}{N_1}\right)\left(\frac{H}{2} - C_g\right) + c_1$$

$$c_2^2 = \frac{1}{N_2}\frac{2}{\kappa^4 H^2}\left(g_u + g_d + \frac{12c_2}{N_2 H}\right)\left(\frac{6H}{C_g} - 12 + \kappa^2 H^2\right) + c_2$$

където с $g_{u,d}$ са означени производните на границите на нода и още:

$$\frac{1}{N_1} = \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{H}H};\ \frac{1}{N_2} = \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{H}}$$

IV.7.2. Двумерна задача

$$F_j = \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_j(x',y')\left[\begin{aligned}&\sum_{i=0}^{5} c_i p_i(x',y') \\ &+ \sum_{k=1}^{6} a_k^s \exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right) + \sum_{k=1}^{6} a_k^w \left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)\end{aligned}\right]$$

$$= c_j + \sum_{k=1}^{6} a_k^s \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_j(x',y')\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)$$

$$+ \sum_{k=1}^{6} a_k^w \iint_{F'_{hex}} dx'\,dy'\,p_j(x',y')\left(\mathbf{e}_{l(k)}^c \cdot \mathbf{r}'\right)\exp\left(B'\mathbf{e}_k^s \cdot \mathbf{r}'\right)$$

В матрично-векторен запис:

$$\mathbf{F} = \mathbf{c} + \hat{\mathbf{G}}^s \mathbf{A}^s + \hat{\mathbf{G}}^w \mathbf{A}^w$$

За обновяване на вектора $\mathbf{F}$ в края на итерацията за дадена група се използва следният израз:

$$\mathbf{F} = \mathbf{c} + \hat{\mathbf{G}}\mathbf{d},$$

където:

$$\hat{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix}\hat{\mathbf{G}}^s & \hat{\mathbf{G}}^w\end{pmatrix}\left(\hat{\mathbf{Q}}^c\right)^{-1}$$

Препоръчително е F_0 да се свърже директно със средната стойност на потока:

$$F_0 = \sqrt{2\sqrt{3}}\overline{\Phi}$$

Нека:

$$\alpha = \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{B'}\left[\left(\exp(B') - \exp(-B')\right) + \frac{1}{B'}\left(\exp(B') + \exp(-B')\right) - \frac{2}{B'}\right]$$

$$\beta = \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{2}{B'}\left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{B'^2}\right)\left(\exp(B') + \exp(-B')\right) + \frac{2}{B'^2}\right]$$

$$\gamma = \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{B'}\left[\left(1 - \frac{2}{B'^2}\right)\left(\exp(B') - \exp(-B')\right) - \frac{1}{B'}\left(1 - \frac{6}{B'^2}\right)\left(\exp(B') + \exp(-B')\right) - \frac{12}{B'^3}\right]$$

$$\delta = \frac{2}{9\sqrt{3}}\frac{1}{B'}\left[\begin{array}{l}\left(1 + \frac{6}{B'^2}\right)\left(\exp(B') - \exp(-B')\right) + \frac{3}{B'}\left(1 + \frac{2}{B'^2}\right)\left(\exp(B') + \exp(-B')\right) - \\ -\frac{12}{B'}\left(2 + \frac{1}{B'^2}\right)\end{array}\right]$$

$$\varepsilon = \frac{4}{9\sqrt{3}}\frac{1}{B'}\left[\begin{array}{l}\frac{1}{B'}\left(1 - 6\frac{1}{B'^2}\right)\left(\exp(B') - \exp(-B')\right) + \left(\frac{1}{2} - 12\frac{1}{B'^4}\right)\left(\exp(B') + \exp(-B')\right) \\ + 24\frac{1}{B'^2}\left(1 + \frac{1}{B'^2}\right)\end{array}\right]$$

С тези означения видът на матриците $\hat{\mathbf{G}}^s$ и $\hat{\mathbf{G}}^w$ е както следва.

Табл. IV.16. Матрица $\hat{\mathbf{G}}^s$

$\hat{G}^s$	1	2	3
0	$\frac{1}{N_0}\alpha$	$\frac{1}{N_0}\alpha$	$\frac{1}{N_0}\alpha$
1	$\frac{1}{N_1}\beta$	$\frac{1}{2}\frac{1}{N_1}\beta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_1}\beta$
2	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_2}\beta$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_2}\beta$
3	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$
4	$\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$
5	0	$\frac{1}{N_5}\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{N_5}\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma-\delta)$
	4	5	6
0	$\frac{1}{N_0}\alpha$	$\frac{1}{N_0}\alpha$	$\frac{1}{N_0}\alpha$
1	$-\frac{1}{N_1}\beta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_1}\beta$	$\frac{1}{2}\frac{1}{N_1}\beta$
2	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_2}\beta$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_2}\beta$
3	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$	$\frac{1}{N_3}\left(\gamma+\delta-\frac{5}{9}\alpha\right)$
4	$\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_4}(\gamma-\delta)$
5	0	$\frac{1}{N_5}\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma-\delta)$	$-\frac{1}{N_5}\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma-\delta)$

Таблица IV.17. Матрица $\hat{\mathbf{G}}^w$

$\hat{G}^w$	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	0
1	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_1}\delta$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_1}\delta$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_1}\delta$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{1}{N_1}\delta$
2	$\frac{1}{N_2}\delta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_2}\delta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_2}\delta$	$\frac{1}{N_2}\delta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_2}\delta$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_2}\delta$
3	0	0	0	0	0	0
4	0	$\sqrt{3}\frac{1}{N_4}\varepsilon$	$\sqrt{3}\frac{1}{N_4}\varepsilon$	0	$-\sqrt{3}\frac{1}{N_4}\varepsilon$	$-\sqrt{3}\frac{1}{N_4}\varepsilon$
5	$\frac{1}{N_5}\varepsilon$	$\frac{1}{2}\frac{1}{N_5}\varepsilon$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_5}\varepsilon$	$-\frac{1}{N_5}\varepsilon$	$-\frac{1}{2}\frac{1}{N_5}\varepsilon$	$\frac{1}{2}\frac{1}{N_5}\varepsilon$

IV.7.3. Матрични елементи за полиномното разложение на модовете

За нестационарната задача (както при условно критичната) също е необходимо да бъде известно разложението на потока и в частност и на модовете по полиноми. Процедурата за обновяване на коефициентите в разложението е аналогична на тази при стационарната задача. За случая на положителен лапласиан матриците $\hat{\mathbf{G}}^s$ и $\hat{\mathbf{G}}^w$ съвпадат с вече по-горе описаните. За случая на отрицателен лапласиан структурата на тези матрици се запазва, а величините, необходими за съставяне на елементите им, са както следва:

$$\alpha = \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'^2}\left(1-\cos(\kappa')+\kappa'\sin(\kappa')\right)$$

$$\beta = \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'^3}\left[2-\left(2+\kappa'^2\right)\cos\left(\kappa'\right)\right]$$

$$\gamma = \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'^4}\left[-6+\left(6+\kappa'^2\right)\cos\left(\kappa'\right)+\kappa'\left(2+\kappa'^2\right)\sin\left(\kappa'\right)\right]$$

$$\delta = \frac{4}{9\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'^4}\left[-6+12\kappa'^2-3\left(-2+\kappa'^2\right)\cos\left(\kappa'\right)+\kappa'\left(-6+\kappa'^2\right)\sin\left(\kappa'\right)\right]$$

$$\varepsilon = \frac{4}{9\sqrt{3}}\frac{1}{\kappa'^5}\left[24\left(-1+\kappa'^2\right)-\left(-24+\kappa'^4\right)\cos\left(\kappa'\right)-2\kappa'\left(6+\kappa'^2\right)\sin\left(\kappa'\right)\right]$$
