

УДК 519.6

СРАВНЕНИЕ СВОЙСТВ СЕТОЧНЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ СЕТКАХ

О. В. Николаева, А. С. Казанцева
(ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва)

Представлены результаты тестирования сеточных схем для решения уравнения переноса на неструктурированных тетраэдрических сетках. Рассмотрены схемы, построенные двумя различными методами: характеристик и конечных элементов. Исследована сходимость сеточных решений при сгущении угловой и пространственной сеток в задачах о глубоком проникновении излучения. Выполнено сравнение сеточных решений с решениями, полученными методом Монте-Карло. Представлены времена счета.

Ключевые слова: уравнение переноса, тетраэдрические сетки, сеточные схемы, метод характеристик, метод конечных элементов.

Введение

При решении многогруппового уравнения переноса излучения в областях, расположенных в защитных слоях ядерных реакторов, часто используются неструктурированные тетраэдрические сетки. Такие сетки позволяют экономично аппроксимировать внутренние границы в области расчета (границы между материалами). Также неструктурированные сетки могут быть локально сгущены в выбранной пространственной подобласти без дополнительного сгущения в других подобластях.

Для решения уравнения переноса на неструктурированных сетках, как правило, используется метод конечных элементов [1–4] или метод коротких характеристик [5–7]. В методе конечных элементов сеточное решение в пространственной ячейке представляется линейной комбинацией базисных функций, коэффициенты которой находятся из условия минимума на таком решении невязки уравнения переноса в интегральной норме. В методе характеристик сеточное решение определяется из условия его минимального отклонения от аналитического решения внутри ячейки и на ее гранях также в интегральной норме.

В программе "РадугаТ" [8] реализованы схемы, построенные обоими методами. Это позволяет выполнить сравнение этих схем с точки зрения точности и времени счета. Отметим, что выбранный вариант метода характеристик следует работе [5], а метода конечных элементов — работе [3].

Далее в разд. 1 приведена постановка задачи для уравнения переноса нейтронов. Сеточная задача рассмотрена в разд. 2. В разд. 3, 4 представлено описание сеточных методов коротких характеристик и конечных элементов. В разд. 5 обсуждаются свойства построенных схем. В разд. 6 выполнено сравнение этих схем при решении двух модельных задач.

1. Задача для уравнения переноса нейтронов

При построении сеточной схемы для решения многогруппового уравнения переноса нейтронов рассматривается уравнение для одной энергетической группы:

$$\Omega \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega) + \sigma(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, \Omega) = Q(\mathbf{r}, \Omega). \quad (1)$$

Здесь искомая функция $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ [$1/(\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{ср})$], плотность потока нейтронов, определяет число нейтронов в точке $\mathbf{r} = (x, y, z)$ трехмерной выпуклой области G , движущихся в направлении единичного вектора $\mathbf{\Omega} \in \Omega$, где Ω — единичная сфера. Вектор $\mathbf{\Omega}$ задается в сферической системе координат углами θ и φ или декартовыми координатами ξ, η, γ . Связь между декартовыми и сферическими координатами определяется равенствами

$$\xi = \cos \varphi \sin \theta; \quad \eta = \sin \varphi \sin \theta; \quad \gamma = \cos \theta.$$

Величина σ [см^{-1}] в уравнении (1) — полное сечение взаимодействия нейтрона со средой. Правая часть (1), функция $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ [$1/(\text{см}^3 \cdot \text{с} \cdot \text{ср})$], есть следующая сумма:

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = F(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}). \quad (2)$$

Здесь первое слагаемое $F(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ включает в себя внутренний источник, источники перехода из других энергетических групп и источник деления. Второе слагаемое $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ есть источник рассеяния:

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') \sigma_S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}', \quad (3)$$

где $\sigma_S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}')$ [$\text{см}^{-1} \cdot \text{ср}^{-1}$] — сечение рассеяния. Интегрирование в (3) выполняется по всем направлениям переноса нейтронов $\mathbf{\Omega}'$.

Краевые условия для уравнения (1) имеют вид [9]

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) > 0} A(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + a(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}^*) \quad \text{при } \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) < 0, \quad \mathbf{r} \in \partial G. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ — внешняя нормаль к границе ∂G области G в точке \mathbf{r} ; функция $q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ [$1/(\text{см}^2 \cdot \text{с} \times \text{ср})$] — плотность потока граничного источника нейтронов. Дифференциальное потоковое альbedo $A(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}')$ определяет диффузное отражение от внешней границы, зеркальное альbedo $a(\mathbf{r})$ — зеркальное отражение. При зеркальном отражении направление движения нейтрона к границе $\mathbf{\Omega}^*$ зависит от направления его движения от границы $\mathbf{\Omega}$ следующим образом:

$$\mathbf{\Omega}^* = \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}.$$

Рассмотрим два частных случая краевого условия (4). При $q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \equiv 0$, $A(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}') \equiv 0$, $a(\mathbf{r}) \equiv 1$ получаем условие

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}) \quad \text{при } \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) < 0, \quad \mathbf{r} \in \partial G. \quad (5)$$

Положив $q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \equiv 0$, $A(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}') \equiv 0$ и $a(\mathbf{r}) \equiv 0$, получим нулевое краевое условие

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = 0 \quad \text{при } \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) < 0, \quad \mathbf{r} \in \partial G. \quad (6)$$

Отметим, что задача (1)–(4) возникает при решении многогруппового уравнения переноса с помощью итераций по источнику деления, когда функция $F(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ считается известной с предыдущей итерации.

Решение задачи (1)–(4) также находится итерационным методом (эти итерации называются внутренними). С предыдущей внутренней итерации считаются известными следующие функции:

1) плотность потока выходящих из области G нейтронов

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \quad \text{при } \mathbf{r} \in \partial G, \quad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) > 0$$

и тем самым правая часть в краевом условии (4);

2) источник рассеяния $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ и тем самым правая часть $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ в уравнении (1).

2. Сеточная задача для уравнения переноса нейтронов

Сеточные аппроксимации для уравнения (1) строятся в предположении, что правая часть $Q(\mathbf{r}, \Omega)$ известна, а направление переноса Ω фиксировано. В трехмерной области G вводится неструктурированная пространственная сетка, состоящая из N_c ячеек-тетраэдров, N_f граней-треугольников и N_v вершин.

Введем сеточные решения на такой сетке. Будем использовать разрывные сеточные аппроксимации, в которых решение независимо представляется на каждой грани и в каждой ячейке. На каждой грани решение будем задавать либо константой (средним значением), либо линейной функцией. Линейная функция в треугольнике может быть задана значениями в вершинах грани. При этом если одна вершина сетки является общей для нескольких граней, то в этой вершине сеточное решение принимает свое значение на каждой грани (рис. 1).

Аналогично, в каждой ячейке решение будем задавать либо константой (средним значением), либо линейной функцией. Линейная функция в ячейке может быть задана значениями в ее вершинах. При этом если одна вершина сетки является общей для нескольких ячеек, то в этой вершине сеточное решение принимает свое значение в каждой ячейке (рис. 2).

Отметим, что разрывные сеточные аппроксимации используются в методе характеристик [5, 6] и методе конечных элементов [1–4]. В методе характеристик [7] применяется непрерывная аппроксимация. Авторы полагают, что использование разрывных аппроксимаций позволяет с лучшей точностью находить быстро меняющиеся решения.

Рассмотрим отдельно один тетраэдр. Введем локальную нумерацию вершин в тетраэдре, граней в тетраэдре, вершин на каждой грани. Установим соответствие между номером вершины на каждой грани и номером той же вершины в тетраэдре. Введем следующие функции:

$\mu(j, k)$ — номер вершины в ячейке, если на j -й грани эта вершина имеет номер k ;

$\nu(j, i)$ — номер, который принимает вершина на j -й грани, если в ячейке она имеет номер i .

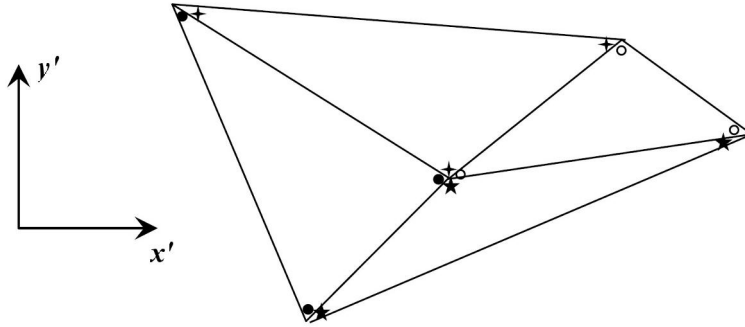


Рис. 1. Четыре соседние грани. Символами \bullet , $+$, $*$, \circ отмечены точки, в которых задаются значения решения на каждой грани

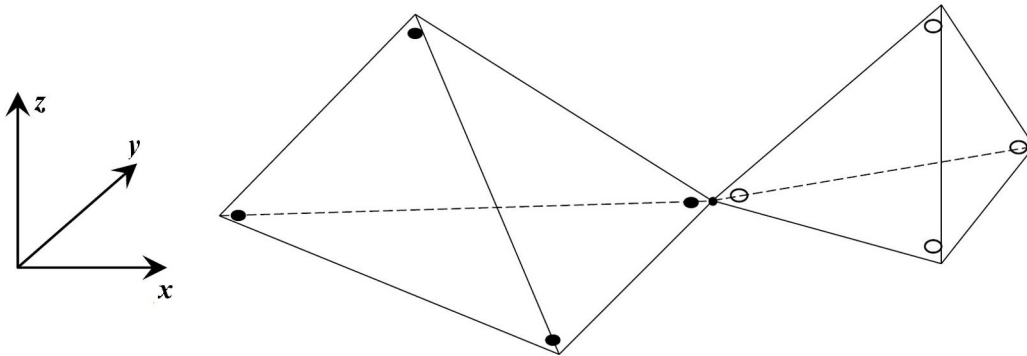


Рис. 2. Два соседних тетраэдра. Символами \bullet , \circ отмечены точки, в которых находятся значения решения в каждой ячейке

Обозначим внешнюю нормаль к j -й грани как \mathbf{n}_j . Входными назовем грани тетраэдра, для которых вектор переноса $\mathbf{\Omega}$ и внешняя нормаль \mathbf{n}_j образуют тупой угол, т. е. скалярное произведение $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0$. Выходными назовем грани, для которых этот угол острый, т. е. $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0$. Каждая ячейка может содержать от одной до трех входных граней и соответственно от трех до одной выходной грани.

Введем обозначения для значений решения и правой части в вершинах тетраэдра (см. рис. 2) ψ_i и q_i , $i = 1, \dots, 4$. Значения решения в вершинах граней обозначим как $\psi_{j,k}$, $j = 1, \dots, 4$, $k = 1, \dots, 3$, где j — номер грани, k — номер вершины на этой грани.

Перед расчетом ячейки значения решения $\psi_{j,k}$ на входных гранях ($\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0$) известны либо из граничных условий, либо из расчета соседних ячеек. Также известны значения источника q_i . При расчете ячейки необходимо найти значения решения ψ_i в ячейке и $\psi_{j,k}$ на выходных гранях при $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0$. Значения решения в вершинах выходных граней используются как значения решения в вершинах входных граней при расчете следующих ячеек. Значения решения в вершинах ячейки используются только для вычисления значений источника рассеяния $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ по формуле (3) и тем самым правой части $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ уравнения (1) по формуле (2) на следующей итерации.

3. Схема метода характеристик

Выбирая тип аппроксимации решения в ячейке и на грани (константа или линейная функция), можно получить различные схемы метода характеристик. Расчет ячейки методом характеристик выполняется в шесть этапов:

1. Если ячейка содержит более чем одну входную грань, то ячейка разбивается на подъячейки, каждая из которых содержит только одну входную грань. Одновременно выходные грани разбиваются на подграни, каждая подгрань относится к своей подъячейке (см. примеры на рис. 3, 4).
2. На каждой входной подграни решение задается константой или линейной функцией.
3. Внутри каждой подъячейки правая часть задается константой или линейной функцией.
4. В каждой подъячейке строится аналитическое решение уравнения переноса (1) при известной правой части Q и известном решении на входной подграни.
5. Построенные решения в подъячейках и на подгранях аппроксимируются константами или линейными функциями. При этом построенные функции во всей ячейке и на каждой выходной грани образуют кусочно-постоянные или кусочно-линейные функции.

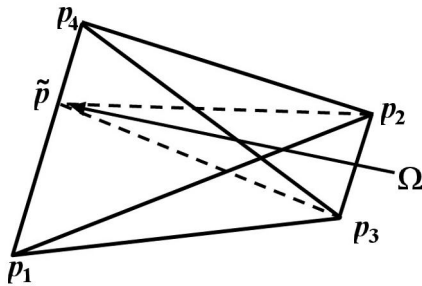


Рис. 3. Разбиение ячейки с двумя входными гранями $p_1p_2p_3$ и $p_2p_3p_4$ на две подъячейки $p_2p_3p_{\tilde{p}}$ и $p_1p_2p_3p_{\tilde{p}}$. Выходная грань $p_1p_3p_4$ разбивается на две подграни $p_1p_3p_{\tilde{p}}$ и $p_{\tilde{p}}p_3p_4$, выходная грань $p_1p_2p_4$ — на две подграни $p_1p_2p_{\tilde{p}}$ и $p_{\tilde{p}}p_2p_4$

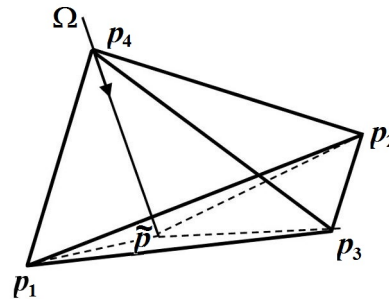


Рис. 4. Разбиение ячейки с тремя входными гранями $p_1p_3p_4$, $p_2p_3p_4$ и $p_1p_2p_4$ на подъячейки $p_2p_3p_{\tilde{p}}$, $p_1p_3p_{\tilde{p}}$ и $p_1p_2p_{\tilde{p}}$. Выходная грань $p_1p_2p_3$ разбивается на три подграни $p_1p_{\tilde{p}}p_3$, $p_{\tilde{p}}p_2p_3$ и $p_1p_2p_{\tilde{p}}$

6. Кусочно-постоянная или кусочно-линейная функция на каждой выходной грани и в ячейке аппроксимируется постоянной или линейной функцией.

Подробное описание представленного варианта метода характеристик содержится в работе [6]. Здесь рассматриваются две сеточные схемы метода характеристик. В схеме TetraLc используется линейная аппроксимация решения на гранях и постоянная — в ячейке, в схеме TetraC применяются постоянные аппроксимации и в ячейке, и на гранях.

Отметим, что значение сеточного решения в ячейке не используется в расчете последующих ячеек, а привлекается только при вычислении значения правой части $Q(\mathbf{r}, \Omega)$ на следующей итерации (см. равенства (2), (3)). Таким образом, применение постоянной аппроксимации решения в ячейке не снижает точности расчета в последующих ячейках на текущей итерации.

4. Схема метода конечных элементов

В схеме метода конечных элементов (МКЕ-схеме) будем использовать линейную аппроксимацию решения в ячейке и на гранях. Для каждой вершины тетраэдра введем относящуюся к ней линейную базисную функцию $u_i(x, y, z)$, которая принимает значение 1 в i -й вершине тетраэдра и значение 0 в остальных вершинах. Для построения функции $u_i(x, y, z)$ сначала находится уравнение плоскости, проведенной через те вершины, где базисная функция принимает значения 0:

$$U_i(x, y, z) = 0.$$

Тогда функция $u_i(x, y, z)$ может быть определена по формуле

$$u_i(x, y, z) = \frac{U_i(x, y, z)}{U_i(x_i, y_i, z_i)}, \quad (7)$$

где x_i, y_i, z_i — координаты i -й вершины.

Таким же образом на каждой j -й грани вводятся базисные функции $u_k^j(x', y')$, принимающие значение 1 в k -й вершине грани и 0 в остальных вершинах. Отметим, что след базисной функции $u_i(x, y, z)$ в ячейке на j -й грани совпадает с базисной функцией $u_{\nu(j,i)}^j(x', y')$ на этой грани.

Поскольку каждая базисная функция является линейной, а сумма $\sum_{i=1}^4 u_i(x, y, z)$ принимает значение 1 в каждой вершине тетраэдра, то выполнено условие

$$\sum_{i=1}^4 u_i(x, y, z) \equiv 1. \quad (8)$$

Аналогично можно получить равенства для сумм базисных функций на грани:

$$\sum_{k=1}^3 u_k^j(x', y') \equiv 1, \quad j = 1, \dots, 4. \quad (9)$$

Справедливы выражения для интегралов от базисных функций по ячейке T и по грани f_j [2]:

$$\iint_{f_j} u_i^j(x', y') dx' dy' = \frac{S_j}{3}; \quad \iiint_T u_i(x, y, z) dx dy dz = \frac{V}{4}, \quad (10)$$

где S_j — площадь j -й грани; V — объем тетраэдра.

Решение уравнения (1), функция Ψ , и правая часть Q представляются в виде разложений по базисным функциям:

$$\Psi(x, y, z) = \sum_{i=1}^4 \psi_i u_i(x, y, z); \quad Q(x, y, z) = \sum_{i=1}^4 q_i u_i(x, y, z). \quad (11)$$

Решение на j -й грани ячейки представляется аналогичным разложением

$$\Psi(x', y') = \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} u_k^j(x', y'). \quad (12)$$

В методе конечных элементов уравнение (1) интегрируется по объему тетраэдра T с весовыми функциями $u_\ell(x, y, z)$:

$$\iiint_T (\mathbf{\Omega} \nabla + \sigma) \Psi(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz = \iiint_T Q(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz, \quad \ell = 1, \dots, 4. \quad (13)$$

Преобразуем интеграл в левой части этого равенства, используя интегрирование по частям:

$$\begin{aligned} \iiint_T u_\ell(x, y, z) (\mathbf{\Omega} \nabla + \sigma) \Psi(x, y, z) dx dy dz &= \iiint_T \sigma \Psi(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz - \\ &- \iiint_T \Psi(x, y, z) \mathbf{\Omega} \nabla u_\ell(x, y, z) dx dy dz + \iiint_T \mathbf{\Omega} \nabla (u_\ell(x, y, z) \Psi(x, y, z)) dx dy dz. \end{aligned}$$

Последний интеграл в этом равенстве преобразуем с помощью формулы Гаусса:

$$\iiint_T \mathbf{\Omega} \nabla (u_\ell(x, y, z) \Psi(x, y, z)) dx dy dz = \sum_{j=1}^4 \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \iint_{f_j} \Psi(x', y') u_{\nu(j,\ell)}^j(x', y') dx' dy'.$$

Здесь суммирование выполняется по всем граням f_j ячейки. Тогда вместо (13) имеем равенство

$$\begin{aligned} \iiint_T \Psi(x, y, z) [\sigma u_\ell(x, y, z) - \mathbf{\Omega} \nabla u_\ell(x, y, z)] dx dy dz + \sum_{j=1}^4 \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \iint_{f_j} \Psi(x', y') u_{\nu(j,\ell)}^j(x', y') dx' dy' = \\ = \iiint_T Q(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz. \end{aligned}$$

Подставляя в это выражение представления (11), (12), находим соотношение

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 \psi_i \iiint_T u_i(x, y, z) [\sigma u_\ell(x, y, z) - \mathbf{\Omega} \nabla u_\ell(x, y, z)] dx dy dz + \\ + \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \iint_{f_j} u_k^j(x', y') u_{\nu(j,\ell)}^j(x', y') dx' dy' = \sum_{i=1}^4 q_i \iiint_T u_i(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz. \quad (14) \end{aligned}$$

Для входных граней, где $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0$, значения $\psi_{j,k}$ известны из расчета соседних ячеек. Для выходных граней, где $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0$, используем равенство

$$\psi_{j,k} = \psi_{\mu(j,k)}. \quad (15)$$

Иначе говоря, значения решения в вершинах выходной грани полагаются равными значениям решения в соответствующих вершинах ячейки. Окончательно выражение (14) принимает вид

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^4 \psi_i \iiint_T u_i(x, y, z) [\sigma u_\ell(x, y, z) - \mathbf{\Omega} \nabla u_\ell(x, y, z)] dx dy dz + \\ & + \sum_{\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0} \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \sum_{k=1}^3 \psi_{\mu(j,k)} \iint_{f_j} u_k^j(x', y') u_{\nu(j,\ell)}^j(x', y') dx' dy' = \\ & = \sum_{\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0} |\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j| \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} \iint_{f_j} u_k^j(x', y') u_{\nu(j,\ell)}^j(x', y') dx' dy' + \sum_{i=1}^4 q_i \iiint_T u_i(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz. \end{aligned} \quad (16)$$

Введем следующие обозначения интегралов:

— от произведения базисных функций по грани ячейки

$$a_{j,i,\ell} = \iint_{f_j} u_i^j(x', y') u_\ell^j(x', y') dx' dy'; \quad (17)$$

— от произведения базисных функций по ячейке

$$b_{i,\ell} = \iiint_T u_i(x, y, z) u_\ell(x, y, z) dx dy dz; \quad (18)$$

— от произведения одной базисной функции и производной от другой базисной функции по ячейке

$$c_{i,\ell} = \iiint_T u_i(x, y, z) (\mathbf{\Omega} \nabla u_\ell(x, y, z)) dx dy dz. \quad (19)$$

Используя обозначения (17)–(19) в равенстве (16), получаем систему уравнений для неизвестных величин ψ_i — значений решения в вершинах ячейки:

$$\sum_{i=1}^4 \psi_i (\sigma b_{i,\ell} - c_{i,\ell}) + \sum_{\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0} \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \sum_{k=1}^3 \psi_{\mu(j,k)} a_{j,k,\nu(j,\ell)} = \sum_{\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0} |\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j| \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} a_{j,k,\nu(j,\ell)} + \sum_{i=1}^4 q_i b_{i,\ell}. \quad (20)$$

Интегралы (17)–(19) могут быть найдены аналитически по известным формулам [2].

Алгоритм расчета ячейки состоит из следующих шагов:

1. Нахождение базисных функций (7) и их производных.
2. Вычисление интегралов (17)–(19).
3. Формирование системы уравнений (20) и решение ее методом Гаусса.
4. Определение значений решения в вершинах выходных граней по формуле (15).

5. Свойства сеточных схем

Схемы метода характеристик (ThetraLc, ThetraC) существенно отличаются от МКЕ-схемы по способу построения. Другое важное отличие заключается в том, что в методе характеристик решения в ячейке и на выходных гранях строятся независимо, тогда как в методе конечных элементов используется единое решение (см. (15)). Таким образом, в схемах метода характеристик сеточное решение является разрывным, тогда как в рассматриваемом варианте метода конечных элементов разрыв в

сеточном решении возникает только между значениями на входных гранях и в ячейке, но не между значениями в ячейке и на выходных гранях.

Важным свойством сеточных схем является положительность. Схемы МКЕ и ThetraLc этим свойством не обладают, т. е. полученное с их помощью сеточное решение не обязательно является положительным в задаче с положительной правой частью. Это связано с тем, что линейная аппроксимация положительного решения уравнения переноса не всегда является положительной функцией, особенно в крупных ячейках. В схеме ThetraC решение заменяется его средним значением, поэтому эта схема является положительной.

В то же время все рассматриваемые схемы обладают рядом общих свойств.

1. Прежде всего, все схемы являются *консервативными*, т. е. для сеточного решения выполнено соотношение баланса — результат интегрирования уравнения (1) по ячейке:

$$\sum_{j=1}^4 \bar{\Psi}_j S_j (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j) + \sigma V \bar{\Psi} = V \bar{Q}. \quad (21)$$

Здесь $\bar{\Psi} = \sum_{i=1}^4 \psi_i / 4$ — среднее значение решения внутри тетраэдра; $\bar{\Psi}_j = \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} / 3$ — среднее значение решения на j -й грани тетраэдра; S_j — площадь j -й грани; \mathbf{n}_j — внешняя нормаль; V — объем тетраэдра; $\bar{Q} = \sum_{i=1}^4 q_i / 4$ — среднее значение правой части в ячейке. Сумма по граням ячейки в левой части равенства (21) отвечает за перенос нейтронов через грани, слагаемые $\sigma V \bar{\Psi}$ и $V \bar{Q}$ — за поглощение нейтронов в ячейке и нейтроны источника.

Выполнение соотношения баланса (21) для схем ThetraC, ThetraLc показано в [6]. Чтобы получить соотношение баланса для МКЕ-схемы, суммируем выражения (16) по индексу ℓ , учитывая свойства (8), (9) и равенство (15):

$$\begin{aligned} \sigma \sum_{i=1}^4 \psi_i \iiint_T u_i(x, y, z) dx dy dz + \sum_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0} \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j \iint_{f_j} u_k^j(x', y') dx' dy' = \\ = \sum_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j < 0} |\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j| \sum_{k=1}^3 \psi_{j,k} \iint_{f_j} u_k^j(x', y') dx' dy' + \sum_{i=1}^4 q_i \iiint_T u_i(x, y, z) dx dy dz. \end{aligned}$$

Используя здесь свойства (10), получаем соотношение баланса (21).

2. Схема ThetraC может быть получена из схемы ThetraLc заменой линейной функции, аппроксимирующей решение на грани, средним значением этой функции [6].

Аналогичным образом для МКЕ-схемы существует парная ей "упрощенная" схема. Она включает соотношение баланса (21), полученное суммированием уравнений схемы (16) по индексу ℓ , и равенства

$$\bar{\Psi}_j = \bar{\Psi} \quad \text{при} \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_j > 0,$$

которые находятся суммированием выражений (15) по индексу k . Таким образом, парной для МКЕ-схемы является шаговая Step-схема.

3. Наличие пары схем ThetraLc и ThetraC позволяет выполнять в каждой ячейке "мягкую" *коррекцию на положительность* по следующим правилам.

Если решение в центре ячейки или одной из граней отрицательно, то ячейка пересчитывается по схеме ThetraC.

Если наименьшее значение решения в одной из вершин грани отрицательно, то это решение полагается равным нулю, а значения в других вершинах увеличиваются таким образом, чтобы среднее значение решения не изменилось.

Такая коррекция не нарушает консервативности схемы, поскольку не меняет средних значений решения в ячейке и на гранях.

Аналогичная коррекция в МКЕ-схеме должна быть выполнена по Step-схеме. Однако Step-схема не только обладает очень низкой точностью, но и предполагает, что решение в ячейке представляется константой. Коррекция по Step-схеме приводит к излишним временным затратам на вычисление интеграла столкновений (3). Авторы считают, что вопрос о способе коррекции для МКЕ-схемы остается открытым.

6. Численные результаты

Рассмотрим две тестовые задачи. Первой из них является известная задача DogLeg [10] о распространении излучения в параллелепипеде $G = [0,60 \text{ см}] \times [0,100 \text{ см}] \times [0,60 \text{ см}]$ с изогнутым прямоугольным в сечении прозрачным каналом (рис. 5). Постоянный источник излучения $F = 1$ занимает подобласть $[0,10 \text{ см}] \times [0,10 \text{ см}] \times [0,10 \text{ см}]$ (на рис. 5 эта подобласть заштрихована). На левой $x = 0$, нижней $z = 0$ и передней $y = 0$ границах области G задано условие зеркального отражения (5), на остальных границах — нулевое краевое условие (6). В плотной среде (в том числе источнике) полное сечение $\sigma = 0,1 \text{ см}^{-1}$, в канале $\sigma = 0,0001 \text{ см}^{-1}$. Сечение рассеяния $\sigma_S = \sigma/2$, рассеяние изотропно. Эта задача традиционно используется при анализе свойств сеточных схем [3, 6, 11].

Вторая задача (назовем ее Vac-задачей) получается заменой в DogLeg-задаче плотной среды вне канала и источника на прозрачную среду из канала (рис. 6).

В обоих случаях решается задача о распространении излучения от локализованного источника: в плотной сильно гетерогенной и сильно поглощающей среде (DogLeg-задача) и в прозрачной однородной среде (Vac-задача).

В обеих задачах находится значение плотности скалярного (суммарного по направлениям переноса Ω) потока излучения $\phi(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega'$ [1/(см²·с)] в ячейках крупной кубической сетки с шагом $\delta = 5 \text{ см}$ по каждой переменной x, y, z . Всего эта сетка содержит 2880 ячеек.

В тестировании участвуют три схемы: ThetraC, ThetraLc (с коррекцией решения на положительность) и МКЕ (без коррекции). Для расчетов привлекается гибридный кластер К-100 [12], используются 24 ядра.

Для нахождения *точного* решения выполняется серия расчетов на последовательно сгущающихся регулярных кубических сетках. Здесь сетка с номером n содержит $360 \cdot 8^n$ ячеек с шагом $10/2^n \text{ см}$ по каждой переменной. Для аппроксимации решения по направлениям переноса Ω используется сетка Карлсона ES₃₈, содержащая 1520 узлов. Расчет выполняется по AWDD-схеме второго порядка точности по программе "Радуга-6" [13] на 48 ядрах кластера К-100.

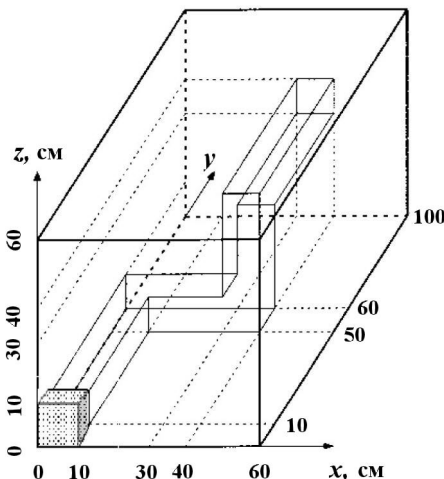


Рис. 5. Область расчета в DogLeg-задаче

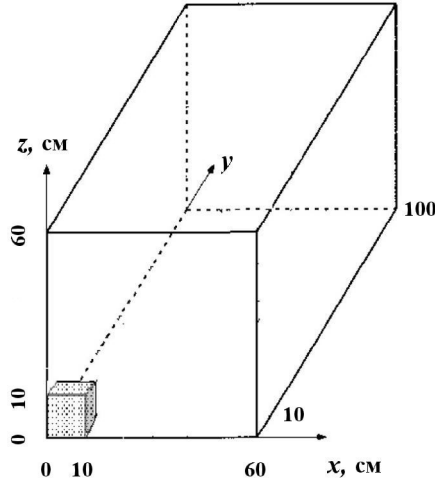


Рис. 6. Область расчета в Vac-задаче

После завершения расчета вычисляются значения плотности скалярного потока в ячейках крупной кубической сетки. В табл. 1 приведены относительные отклонения плотности скалярного потока, полученные на соседних сетках. Отклонения найдены по формуле

$$E_n = \max_i \left| 1 - \frac{\phi_{n,i}}{\phi_{n+1,i}} \right|, \quad (22)$$

где $\phi_{n,i}$ — плотность скалярного потока в i -й ячейке крупной кубической сетки, найденная на регулярной сетке с номером n . В частности, для $n = 5$ в табл. 1 указаны отклонения плотности потоков на сетках $n = 5$ и $n + 1 = 6$. Видно, что плотность потока на сетке с номером 6 может быть использована как *точное* решение.

Точное решение может быть characterized следующими величинами:

$$S = \frac{\max_{i=1,\dots,2880} \phi_i^{\text{точное}}}{\min_{i=1,\dots,2880} \phi_i^{\text{точное}}}, \quad s = \max_{i=1,\dots,2880} \max_{j \in J(i)} \max \left(\frac{\phi_i^{\text{точное}}}{\phi_j^{\text{точное}}}, \frac{\phi_j^{\text{точное}}}{\phi_i^{\text{точное}}} \right).$$

Здесь $\phi_i^{\text{точное}} = \phi_{6,i}$ — точное решение в i -й ячейке грубой пространственной сетки; $J(i)$ — номера всех ячеек этой сетки, соседних с i -й. Здесь величина S определяет перепад скалярного потока во всей области, а величина s — максимальный перепад скалярного потока в соседних ячейках.

В DogLeg-задаче имеем значения $S = 7,8 \cdot 10^5$; $s = 2,8$. В Vac-задаче $S = 380$; $s = 2,6$.

Чтобы оценить точность рассматриваемых схем при сгущении пространственной сетки, выполняется расчет с фиксированной угловой сеткой Карлсона ES₃₈ на серии из пяти тетраэдрических сеток. При переходе к следующей в серии сетке число ячеек $N_{c,b}$, $b = \text{А, Б, В, Г, Д}$, увеличивается в два раза (табл. 2). Здесь сетка А построена с помощью пакета Salome [14]. Остальные сетки получены последовательным дроблением ячеек сетки А.

В табл. 2 приведены средние радиусы ячеек $r_{c,b}$ (средние по ячейкам радиусы сфер такого же объема), а также средние значения отношения длин наименьшего и наибольшего ребер α_b . Можно видеть, что при увеличении числа ячеек $N_{c,b}$ средний радиус уменьшается как $N_{c,b}^{-1/3}$, а параметр качества сетки α_b почти не меняется.

Для исследования сходимости сеточных решений при сгущении угловой сетки выполняются расчеты на пространственной сетке Д с угловыми сетками Карлсона ES _{M} при $M = 8, 12, 18, 26, 38$. Поскольку сетка ES _{M} содержит $M(M + 2)$ узлов, то число узлов при переходе к сетке со следующим M увеличивается приблизительно в два раза.

На рис. 7, 8 приведены максимальные и средние ошибки — отклонения от точного решения — сеточных решений, полученных на всех пространственных сетках при максимальной угловой сетке ES₃₈. Ошибки найдены по формулам

$$\varepsilon_b^{\text{макс}} = \max_{i=1,\dots,2880} \left| 1 - \frac{\phi_{b,M,i}}{\phi_i^{\text{точное}}} \right|, \quad \varepsilon_b^{\text{сред}} = \frac{1}{2880} \sum_{i=1}^{2880} \left| 1 - \frac{\phi_{b,M,i}}{\phi_i^{\text{точное}}} \right|, \quad b = \text{А, Б, В, Г, Д}, \quad M = 38. \quad (23)$$

Таблица 1

Относительные отклонения плотности скалярного потока (22)

n	DogLeg-задача	Vac-задача
1	0,22	0,20
2	0,093	0,12
3	0,046	0,11
4	0,012	0,049
5	0,0036	0,015

Таблица 2

Параметры тетраэдрических сеток

Сетка	$N_{c,b}$	$r_{c,b}$	α_b
А	18 005	1,66	0,57
Б	36 004	1,32	0,54
В	72 003	1,05	0,55
Г	144 001	0,83	0,52
Д	288 005	0,66	0,52

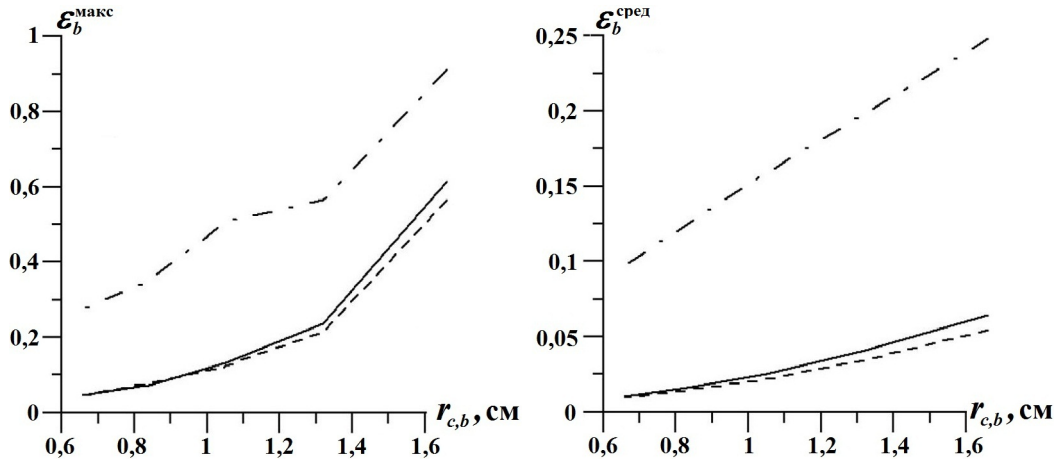


Рис. 7. Максимальные и средние ошибки сеточных решений (23) в DogLeg-задаче: — — схема ThetraLc; — · — — схема ThetraC; - - - - МКЕ-схема

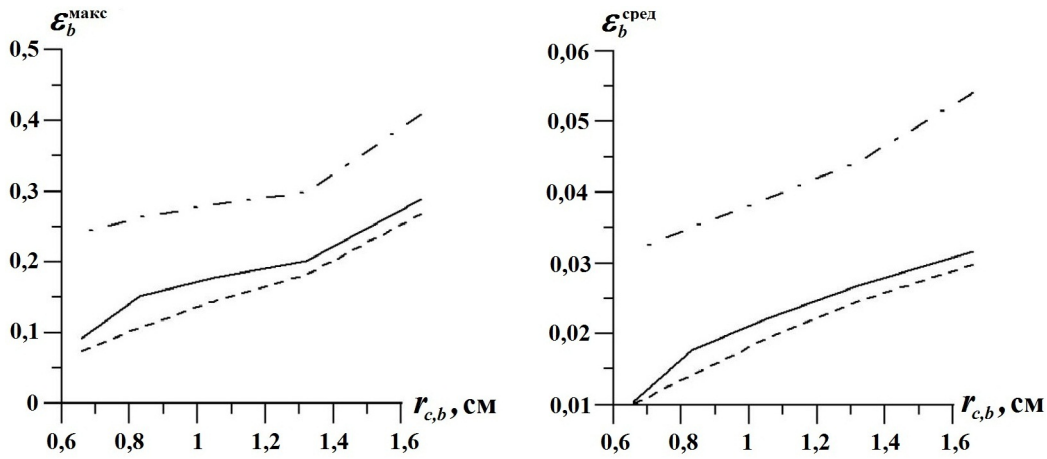


Рис. 8. Максимальные и средние ошибки сеточных решений (23) в Vac-задаче: — — схема ThetraLc; — · — — схема ThetraC; - - - - МКЕ-схема

Здесь $\phi_i^{\text{точное}}$ — значение точного решения в i -й ячейке крупной кубической сетки; $\phi_{b,M,i}$ — решение в этой ячейке, полученное на пространственной сетке с индексом b и угловой сетке ES_M .

Из рис. 7, 8 можно видеть, что ошибка схемы ThetraLc лишь немного больше ошибки МКЕ-схемы, в то время как они обе много меньше ошибки схемы ThetraC.

На рис. 9, 10 приведены максимальные и средние отклонения сеточных решений, полученных с пространственной сеткой D на двух соседних угловых сетках ES_M и $ES_{M'}$. Отклонения найдены по формулам

$$\varepsilon_M^{\text{макс}} = \max_{i=1, \dots, 2880} \left| 1 - \frac{\phi_{b,M,i}}{\phi_{b,M',i}} \right|, \quad \varepsilon_M^{\text{сред}} = \frac{1}{2880} \sum_{i=1}^{2880} \left| 1 - \frac{\phi_{b,M,i}}{\phi_{b,M',i}} \right|, \quad b = D. \quad (24)$$

Отклонения на рисунках даны в зависимости от порядка M меньшей угловой квадратуры.

Можно видеть, что все сеточные решения при сгущении угловой сетки сходятся, причем быстрее в DogLeg-задаче, чем в Vac-задаче. Менее всего подвержены *лучевым эффектам* (зависимости от угловой сетки) решения схемы ThetraC. Это можно объяснить более низкой точностью этой схемы. Решения ThetraLc и МКЕ-схем при сгущении угловой сетки сходятся примерно с одинаковой скоростью.

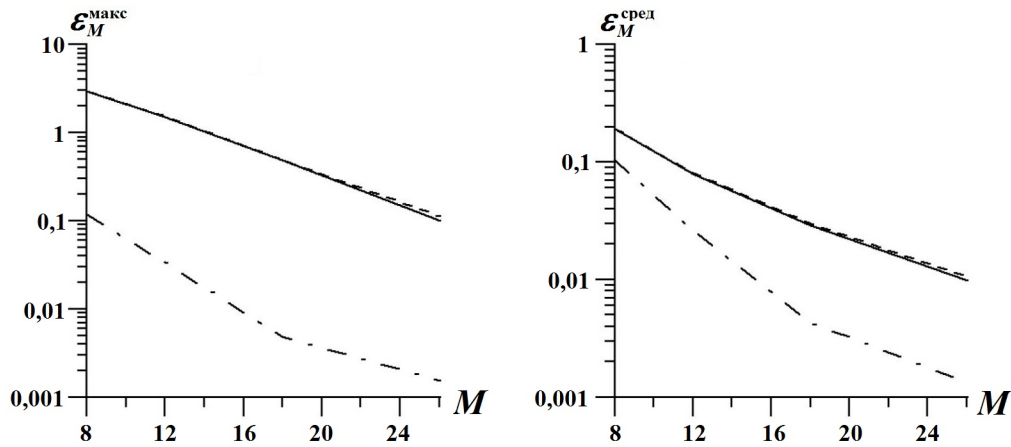


Рис. 9. Максимальные и средние отклонения сеточных решений (24) в DogLeg-задаче: — — схема ThetraLc; - - - - схема ThetraC; · · · · МКЕ-схема

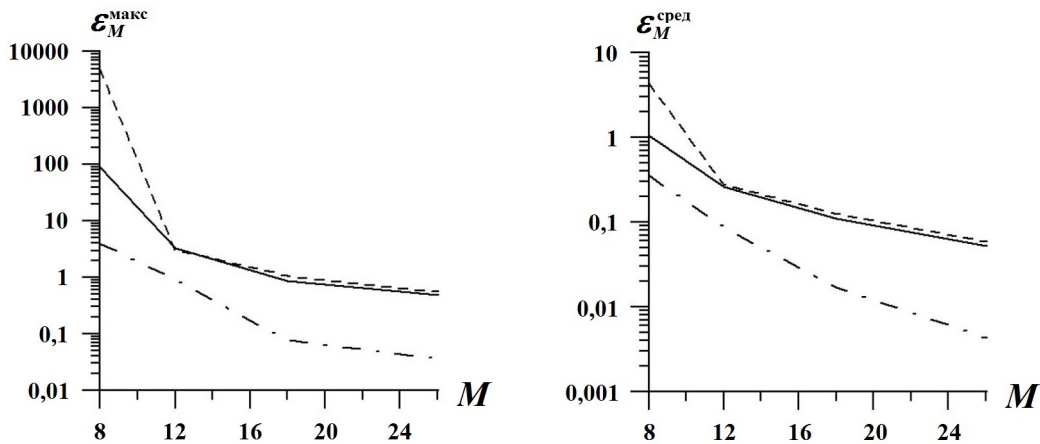


Рис. 10. Максимальные и средние отклонения сеточных решений (24) в Vac-задаче: — — схема ThetraLc; - - - - схема ThetraC; · · · · МКЕ-схема

В описании тестовой задачи DogLeg приведены значения полного потока, найденные в выбранных пространственных точках методом Монте-Карло [10]. На рис. 11–13 приведены сеточные решения на линии C ($y = 95$ см, $z = 35$ см) для всех трех схем на различных пространственных и угловых сетках, а также точное решение (метод Монте-Карло).

Можно видеть, что применение ThetraLc и МКЕ-схем дает практически идентичные результаты, тогда как схема ThetraC существенно уступает им в точности.

Наконец, в табл. 3, 4 приведена информация о временах расчета задачи Vac на сетках A, ES_{38} с использованием 8 ядер кластера К-100 (8 ядер на этом кластере образуют вычислительный узел). Все расчеты выполнены с распараллеливанием вычислений с помощью стандарта OpenMP без использования графических ускорителей [8]. Исполняемый файл получен с помощью компилятора Intel с отключением опции оптимизации вычислений.

В табл. 3 приведены доли времени, которые занимают следующие этапы расчета:

- 1) определение порядка перебора ячеек для каждого направления переноса;
- 2) расчет внутри ячейки, т. е. построение и решение системы сеточных уравнений в ячейке;
- 3) расчет интеграла столкновений (3) и правой части (2);
- 4) расчет источника отражения (5);
- 5) организация параллельных процессов.

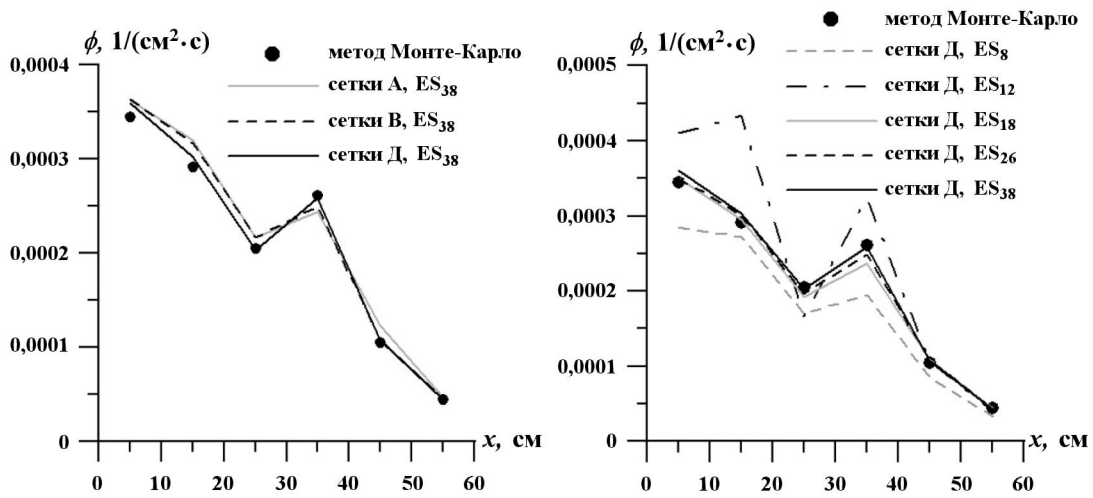


Рис. 11. Сеточные решения на линии C в DogLeg-задаче, полученные по МКЕ-схеме

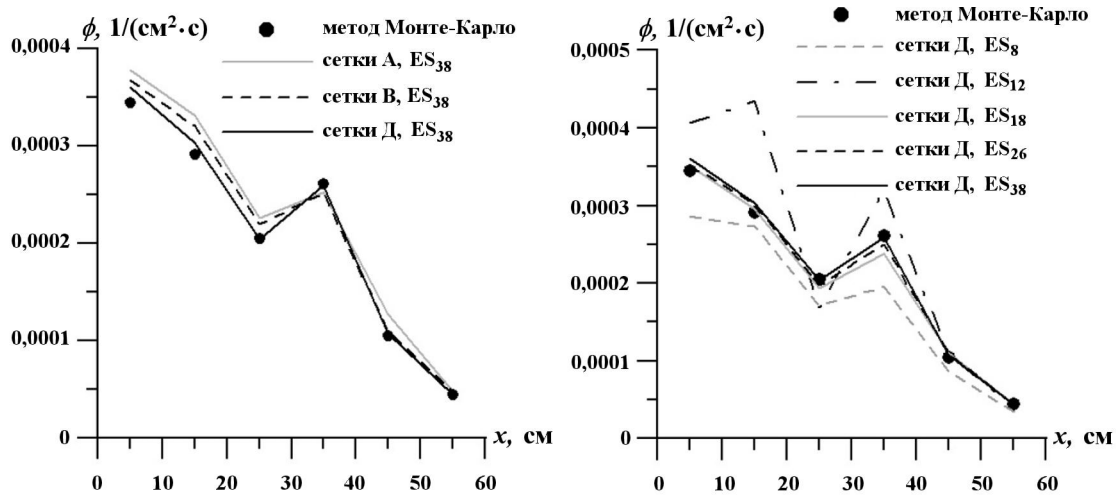


Рис. 12. Сеточные решения на линии C в DogLeg-задаче, полученные по схеме TetraLc

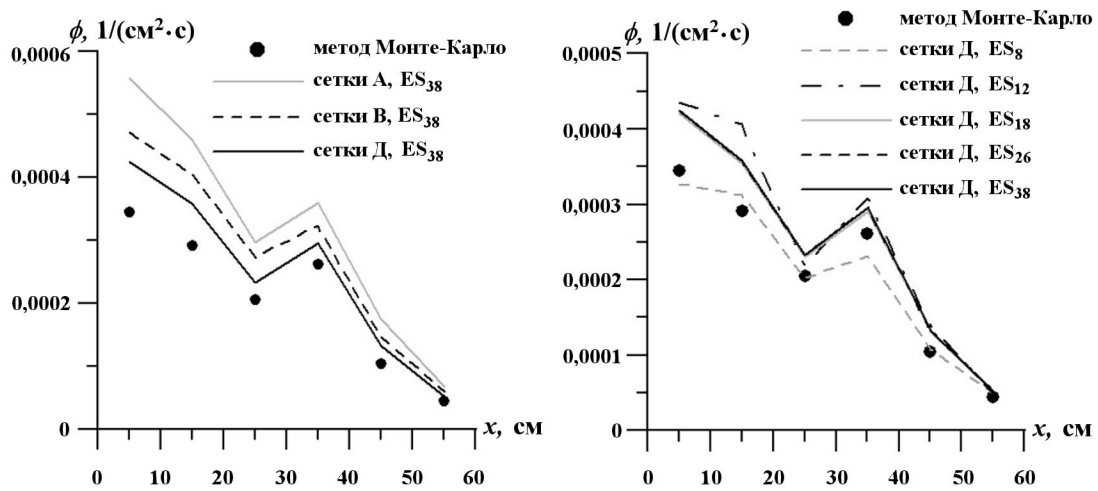


Рис. 13. Сеточные решения на линии C в DogLeg-задаче, полученные по схеме TetraC

Таблица 3

Доли времени выполнения различных этапов при решении задачи V_{ac} на сетках A , ES_{38}

Схема	Этап 1	Этап 2	Этап 3	Этап 4	Этап 5
Step	0,43	0,05	0,07	0,41	0,04
ThetraC	0,28	0,41	0,05	0,23	0,03
ThetraLc	0,19	0,58	0,03	0,17	0,03
МКЕ	0,19	0,52	0,09	0,17	0,03

Таблица 4

Относительные времена счета при решении задачи V_{ac} на сетках A , ES_{38}

Схема	Весь расчет	Этап 1	Этап 2	Этап 3	Этап 4	Этап 5
Step	1	1	1	1	1	1
ThetraC	1,7	1,1	14,2	1,4	1	1,01
ThetraLc	2,48	1,1	28,3	1,3	1,01	1,4
МКЕ	2,47	1,1	24,9	3,4	1,01	1,86

Здесь первый этап выполняется до начала итерационного процесса, а остальные этапы — на каждой итерации. Во всех расчетах сделано по 12 внутренних итераций. В каждой схеме на каждой итерации сеточные уравнения в ячейке составляются и решаются заново.

В табл. 4 приведены относительные времена выполнения как всего расчета, так и отдельных этапов. За единицу принято время выполнения соответствующего этапа по шаговой Step-схеме.

Этап 1 определения порядка перебора ячеек и этап 4 расчета источника отражения являются общими для всех схем и занимают приблизительно одинаковое время (см. табл. 4). Доля времени на организацию параллельных процессов (этап 5) для всех схем незначительна (см. табл. 3).

Основное время для ThetraLc-, ThetraC- и МКЕ-схем занимает этап 2 расчета внутри ячейки (алгоритм расчета по Step-схеме настолько прост, что занимает незначительную часть времени). В ThetraLc- и МКЕ-схемах на расчет внутри ячейки тратится примерно одинаковое время. Расчет внутри ячейки в схеме ThetraC занимает в 1,8 раз меньше времени (см. табл. 4).

При расчете интеграла столкновений и правой части (этап 3) временные затраты МКЕ-схемы выше по сравнению со всеми другими схемами. Это связано с тем, что в ней используется линейная аппроксимация решения в ячейке (4 параметра), тогда как в остальных рассматриваемых схемах — постоянная (1 параметр). Однако доля этого этапа мала (см. табл. 3).

С другой стороны, значительна доля общих этапов расчета. Поэтому в целом МКЕ-схема требует приблизительно столько же времени, что и схема ThetraLc. При этом обе они требуют в 1,4 раза больше времени, чем намного менее точная схема ThetraC.

Заключение

Выполнено исследование свойств и точности сеточных схем для решения уравнения переноса нейтронов на неструктурированных тетраэдрических сетках. Рассматриваются схемы, полученные двумя различными методами: характеристик и конечных элементов. В схеме метода конечных элементов используются линейные представления решения в ячейке и на гранях, в схеме метода характеристик ThetraLc — линейное представление на гранях и константное в ячейке, в схеме ThetraC — константные в ячейке и на гранях. В схемах ThetraLc и ThetraC сеточное решение является разрывным между ячейкой и всеми гранями, в МКЕ-схеме — только между ячейкой и входными гранями.

Все три схемы реализованы в программе "РадугаТ". Результаты представленных расчетов выполнены на гибридном кластере К-100.

Тестирование схем выполнено на задачах о глубоком проникновении излучения. Использованы известная задача DogLeg и задача о распространении излучения от локализованного источника в прозрачной среде (Vac-задача). Проведены расчеты этих задач на серии сгущающихся пространственных и угловых сеток. Выполнено сравнение полученных сеточных решений с *точными* решениями, найденными методом Монте-Карло и расчетом на густой регулярной сетке с кубическими ячейками. Оцениваются относительные ошибки сеточного решения в равномерной норме и в среднем.

Показано, что схема TetraLc метода характеристик и МКЕ-схема имеют приблизительно одинаковое время счета и порождают близкие сеточные решения. При этом точность TetraLc- и МКЕ-схем значительно выше точности схемы TetraC.

Возможно, при решении других задач (например, задач расчета $K_{эф}$ или задач с сильно рассеивающими плотными средами) будет получен другой результат.

Кроме того, представляется необходимым переход к другому варианту МКЕ-схемы с полностью разрывным сеточным решением. Это приведет к увеличению числа неизвестных в системе уравнений в сеточной ячейке с 4 до 7–13 (в зависимости от числа выходных граней). При этом время на расчет внутри ячейки несколько возрастет, однако время на выполнение остальных этапов не изменится. Переход к полностью разрывному сеточному решению может существенно повысить точность результата.

Список литературы

1. Wareing T. A., McGhee J. M., Morel J. E., Pautz S. D. Discontinuous finite element S_n methods on three-dimensional unstructured grids // Nucl. Sci. and Eng. 2001. Vol. 138, No 3. P. 256–268. DOI:10.13182/NSE138-256.
2. Цыбулин И. В. Разработка численных методов для решения уравнения переноса излучения и их реализация с использованием графических ускорителей: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. М.: МФТИ, 2015.
3. Сычугова Е. П., Селезнев Е. Ф. Метод конечных элементов для решения уравнения переноса нейтронов на неструктурированных тетраэдральных сетках: Препринт № UBRAE-2014-03. М.: ИБРАЭ РАН, 2014.
4. Николаев А. А. Совершенствование геометрических опций SN-кода PMSNSYS-II // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2017. № 1. С. 143–147.
5. Ferrer R. M., Azmy Y. Y. A robust arbitrarily high-order transport method of the characteristic type for unstructured grids // Nucl. Sci. and Eng. 2012. Vol. 172, No 1. P. 33–51. DOI:10.13182/NSE10-106.
6. Николаева О. В. Нодальная сеточная схема для уравнения переноса излучения на неструктурированной тетраэдральной сетке // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 5. С. 80–96. DOI: 10.1134/S2070048215060071.
7. Аристова Е. Н., Астафуров Г. О. Метод коротких характеристик второго порядка для решения уравнения переноса на сетке из тетраэдров // Там же. 2016. Т. 28, № 7. С. 20–30. DOI:10.1134/S2070048217010045.
8. Николаева О. В., Басс Л. П., Гайфуллин С. А. Параллельные алгоритмы решения уравнения переноса нейтронов в защитах ядерных реакторов на неструктурированных тетраэдрических сетках в программе РадугаТ // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2018): труды межд. науч. конф. (2–6 апреля 2018 г., г. Ростов-на-Дону). Челябинск: ЮУрГУ, 2018. С. 319–331.
9. Гермогенова Т. А., Золотухин В. Г., Климанов В. А., Машкович В. П., Миськевич А. И., Суворов А. П. Альbedo нейтронов. М.: Атомиздат, 1973.

10. Kobayashi K., Sugimura N., Nagaya Y. 3D radiation transport benchmark problems and results for simple geometries with void region // Progress in Nuclear Energy. 2001. Vol. 39, No 2. P. 119–144. DOI:10.1016/S0149-1970(01)00007-5.
11. Suslov I. Improvements in the long characteristics method and their efficiency for deep penetration calculations // Ibid. P. 223–242. DOI:10.1016/S0149-1970(01)00014-2.
12. Гибридный вычислительный кластер К-100. <http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>
13. Басс Л. П., Николаева О. В. "Радуга-6" — программа расчета стационарных и нестационарных нейтронных и гамма полей в 1D, 2D, 3D областях // Тр. 7-й МНТК "Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭ". ОКБ "Гидропресс" (17–20 мая 2011 г., г. Подольск). Подольск: Гидропресс, 2011.
14. The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. <http://www.salome-platform.org/>

Статья поступила в редакцию 14.05.18.

COMPARISON BETWEEN THE PROPERTIES OF GRID SCHEMES FOR SOLVING THE TRANSPORT EQUATION ON UNSTRUCTURED TETRAHEDRAL GRIDS / O. V. Nikolaeva, A. S. Kazantseva (M.V. Keldysh IAM of RAS, Moscow).

The paper presents results of testing the grid schemes used to solve the transport equation on unstructured tetrahedral grids. Schemes constructed using two different methods – the method of characteristics and the finite element method – are considered. The grid solution convergences have been tested with the use of refined angular and spatial grids for the deeply penetrating radiation problems. The grid solutions are compared to the Monte Carlo solutions. The problem runtimes are given.

Keywords: the transport equation, tetrahedral grids, grid schemes, the method of characteristic, the finite element method.
