

УДК 519.642.2

DS_n -МЕТОД С ИСКУССТВЕННОЙ ДИССИПАЦИЕЙ И ВДМ-МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

А. Д. Гаджиев, В. Н. Селезнев, А. А. Шестаков
(РФЯЦ–ВНИИТФ)

Рассматривается численный алгоритм для решения двумерных уравнений переноса теплового излучения в многогрупповом кинетическом приближении. Алгоритм строится на основе DDAD-схемы, которая является схемой DS_n -метода с искусственной диссипацией. Для ускорения итераций при решении системы уравнений переноса используется метод выделения диагональной матрицы.

Представлены результаты расчета двух модельных задач.

Введение

Математическое моделирование переноса теплового излучения в спектрально-кинетической модели играет важную роль во многих научно-технических проблемах. В данной работе рассматривается численная методика для решения двумерного кинетического уравнения переноса теплового излучения. Методика основана на DDAD-схеме, которая была предложена для расчета переноса нейтронов [1]. DDAD-схема является результатом модификации DS_n -метода [2] с введением искусственной диссипации.

Искусственная диссипация вводится для ослабления нефизических осцилляций, возникающих при решении уравнения переноса в оптически плотных средах методом дискретных ординат 2-го порядка точности. Однако этого может быть недостаточно для обеспечения монотонности в сложных геометриях, где встречаются как оптически плотные, так и оптически прозрачные области. Для улучшения монотонных свойств DDAD-схема модифицирована в двух отношениях. Во-первых, схема рассматривается для модифицированной оптической толщины $\tilde{\alpha}\Delta x = \left(\frac{1}{c\Delta t} + \alpha\right)\Delta x$, включающей слагаемое $\frac{\Delta x}{c\Delta t}$, идущей от временной дискретизации уравнения переноса. Во-вторых, для обеспечения положительности включается нелинейная коррекция решения.

Поскольку метод простой итерации в задачах переноса теплового излучения сходится очень медленно, необходимо ускорение итераций. С этой целью реализован метод выделения диагональной матрицы (ВДМ-метод). Подобный метод в плоском одномерном случае был предложен в работе [3]. В данной методике этот подход применен в двумерном случае для DDAD-схемы. В программе реализованы счет по областям с итерационным обменом граничными условиями и возможность параллельного счета по энергетическим группам и направлениям полета фотонов аналогично методике расчета переноса нейтронов [4].

Постановка задачи

Рассмотрим двумерное нестационарное кинетическое уравнение переноса излучения в многогрупповом приближении для осесимметричной геометрии в цилиндрической системе координат. Уравнение переноса рассматривается в приближении полного увлечения частиц средой [5] с учетом изотропного рассеяния [6]:

$$\frac{\rho}{c} \frac{d}{dt} \left(\frac{J_g}{\rho} \right) + \operatorname{div} (\vec{\Omega} J_g) + \alpha_g J_g = \frac{\alpha_{sg}}{4\pi} \int_{\vec{\Omega}} J_g d\vec{\Omega} + \frac{\alpha_{cg}}{4\pi} B_g(T), \quad g = 1, 2, \dots, G, \quad (1)$$

где t — время; c — скорость света; ρ — плотность вещества; T — температура вещества; $\vec{\Omega}$ — единичный вектор в направлении движения фотонов; g — индекс группы; ϵ_g — энергия фотонов группы g ; $J_g(t, r, z, \mu, \phi) = \int_{\Delta\epsilon_g} J(t, r, z, \mu, \phi, \epsilon) d\epsilon$ — интенсивность излучения фотонов группы g , летящих в направлении $\vec{\Omega}$; $\alpha_g(t, \vec{r})$ — коэффициент ослабления фотонов группы g ; $\alpha_{cg}(t, \vec{r})$ — коэффициент поглощения; $\alpha_{sg}(t, \vec{r})$ — коэффициент рассеяния; $B_g = \frac{8\pi}{c^2 h^3} \int_{\Delta\epsilon_g} \frac{\epsilon^3}{\exp(\epsilon/T) - 1} d\epsilon$ — функция Планка для группы g , умноженная на скорость света; h — постоянная Планка.

Совместно с уравнениями переноса излучения (1) решается уравнение энергии

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} \int_{\vec{\Omega}} \left(J_g - \frac{1}{4\pi} B_g \right) d\vec{\Omega} + \rho Q, \quad (2)$$

где Q — внешний источник.

При построении численного алгоритма будем исходить из уравнения переноса, записанного в цилиндрических координатах (r, z) . Для кинетического уравнения координатная форма оператора $\operatorname{div} (\vec{\Omega} (\cdot))$ имеет следующий вид:

$$\operatorname{div} (\vec{\Omega} (\cdot)) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\xi (\cdot)) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r\mu (\cdot)) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\eta (\cdot)),$$

где $\mu = \cos \theta$; $\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi$; $\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi$; θ — угол между $\vec{\Omega}$ и осью \vec{z} ; ϕ — угол между \vec{r} и проекцией $\vec{\Omega}$ на плоскость, перпендикулярную оси \vec{z} .

В силу осевой симметрии справедливо условие $J_g(r, z, \mu, \phi, t) = J_g(r, z, \mu, 2\pi - \phi, t)$, поэтому рассматривается только область значений $[-1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \phi \leq \pi]$.

Для многогрупповой системы уравнений переноса (1), (2) в некоторой области D , ограниченной замкнутой поверхностью Σ , решается краевая задача со следующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} J_g(r, z, \mu, \phi, t)|_{t=t_0} &= J_g^0(r, z, \mu, \phi); \\ J_g(r, z, \mu, \phi, t)|_{(r,z) \in \Sigma} &= J_g(P, \mu, \phi, t), \quad \vec{n}\vec{\Omega} < 0; \\ g &= 1, 2, \dots, G, \end{aligned} \quad (3)$$

где P — точка на поверхности Σ ; \vec{n} — внешняя нормаль к Σ .

В качестве граничного условия на оси симметрии ($r = 0$) используется

$$J_g(r, z, \mu, \phi, t)|_{r=0} = J_g(r, z, \mu, \pi - \phi, t) \quad \text{при} \quad 0 \leq \phi \leq \pi \quad (\vec{\Omega}\vec{n} = -\xi < 0). \quad (4)$$

DS_n-метод с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для решения кинетического уравнения

Вся область D , где происходит перенос излучения, делится на блоки D_l ($l = 1, 2, \dots, L$), которые, в свою очередь, составлены из совокупности сеточных областей D_l^m ($m = 1, 2, \dots, M_l$), примыкающих друг к другу по полной стороне границы. Каждая сеточная область покрыта своей регулярной четырехугольной сеткой. Сетка задается цилиндрическими координатами вершин ячеек (r_{ij}^n, z_{ij}^n) , на которые область D внутри сеточной области разбита в момент времени t^n . Индексы принимают

значения $i = 1, 2, \dots, I_i^m$, $j = 1, 2, \dots, J_j^m$. Сеточные области составлены из набора физических областей, которые характеризуются своими уравнениями состояния и спектральными пробегами. По угловым переменным μ, ϕ сетка строится согласно ES_M -квадратуре [7].

На каждом временном шаге $[t^n \leq t \leq t^{n+1}]$ организуется цикл внешних итераций по интегралу столкновений и независимому источнику в виде функции Планка, совмещенных с итерациями по нелинейности коэффициента поглощения. Расчет уравнения переноса излучения на внешней итерации ν разделяется на два этапа:

- 1) решение кинетического уравнения с известной правой частью, взятой с предыдущей внешней итерации;
- 2) ускорение итераций. В настоящей методике для ускорения применяется метод ВДМ.

Произведя интегрирование уравнения (1) на ячейке сетки $[t^n, t^{n+1}] \times D_{ij} \times [\phi_k, \phi_{k-1}] \times [\mu_{m-1}, \mu_m]$, получим

$$\frac{\rho}{c\Delta t^n} \left[\left(\frac{J_g}{\rho} \right)^{n+1} - \left(\frac{J_g}{\rho} \right)^n \right] + \text{div}_h (\bar{\Omega} J_g^{n+1}) + \alpha_g J_g^{n+1} = Q_g^{n+1}, \quad (5)$$

$$Q_g^{n+1} = \frac{1}{4\pi} (\alpha_{sg} U_g^{n+1} + \alpha_{cg} B_g^{n+1}), \quad U_g = \sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{K_m} (J_g) \Delta\mu_{m-1} \Delta\phi_{k-1},$$

$g = 1, 2, \dots, G_1.$

Дробные индексы здесь опущены. Так, например, $J_g^{n+1} = (J_g)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2, m-1/2}^{n+1}$.

Разностный оператор $\text{div}_h (\bar{\Omega} (\cdot))$ имеет следующий смысл:

$$\begin{aligned} \text{div}_h (\bar{\Omega} (\cdot)) &\equiv \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left[\Delta_i (\bar{\Omega} \bar{n} \Delta l r (\cdot)) + \Delta_j (\bar{\Omega} \bar{n} \Delta l r (\cdot)) \right] - \frac{\Delta S_{ij}}{\Delta V_{ij}} \frac{\Delta_k (\eta (\cdot))}{\Delta \phi_k}, \\ (\bar{\Omega} \bar{n} \Delta l)_i &= +\xi \Delta z_i - \mu \Delta r_i = +\xi (z_{i,j+1} - z_{ij}) - \mu (r_{i,j+1} - r_{ij}), \\ (\bar{\Omega} \bar{n} \Delta l)_j &= -\xi \Delta z_j + \mu \Delta r_j = -\xi (z_{i+1,j} - z_{ij}) + \mu (r_{i+1,j} - r_{ij}), \end{aligned}$$

где индексы i, j пробегает значения по всем ячейкам данного блока D_l ; $k = 1, 2, \dots, K_m$; $m = 1, 2, \dots, M$.

Для замыкания система уравнений DS_n -метода (5) дополняется краевыми условиями и соотношениями, связывающими значения J в центре и на гранях ячеек. Эти соотношения выбираются в соответствии с направлением потока на ребрах.

Для шаговой St-схемы ($p = 0$) и алмазной DD-схемы ($p = 1$) соотношения связи задаются следующим образом (в схематичной форме):

$$J^+ = (1 + p) J^{(0)} - p J^-, \quad (6)$$

где $J^{(0)}$ — интенсивность в центре ячейки; J^-, J^+ — интенсивности на освещенных и неосвещенных гранях соответственно. Эти соотношения применяются по направлениям i, j, k . St-схема имеет 1-й порядок точности по пространственным переменным, DD-схема — 2-й порядок точности.

В действительности чисто использовать вариант DD-схемы для неортогональных сеток не удастся. Возникают ячейки с одной освещенной и тремя неосвещенными сторонами, для которых приходится применять соотношения St-схемы, имеющей 1-й порядок точности. Кроме того, на St-схему делается переход в тех ячейках, где DD-схема дает отрицательное решение. Таким образом, применяется DD/St-схема.

Решение системы разностных уравнений проводится по схеме бегущего счета, ячейки обчисляются согласно упорядочению. Возможность упорядочения системы из выпуклых ячеек доказана

в [8]. Было необходимо повысить эффективность DS_n -метода в оптически плотных средах. DD-схема 2-го порядка точности в оптически плотной среде может приводить к большим осцилляциям решения, а St-схема, положительная и монотонная, "размазывает" решение как схема 1-го порядка точности. Вариант схемы DD/St также неудовлетворителен, поскольку осцилляции в положительной области решения остаются. Из-за применяемой в схеме 2-го порядка точности линейной интерполяции возникает антидиссипативная добавка вида $-\alpha \frac{h^2}{8} \operatorname{div} (\bar{\Omega} \operatorname{div} (\bar{\Omega} J))$ в правой части уравнения переноса (в первом дифференциальном приближении), которая в оптически плотных средах и приводит к осцилляциям, связанным не с физикой явления, а с дефектом разностной схемы.

Для улучшения монотонных свойств DS_n -метода по пространственным переменным введем искусственную диссипацию [2]:

$$\frac{\rho^{n+1}}{c\Delta t} \left[\left(\frac{J_g}{\rho} \right)^{n+1} - \left(\frac{J_g}{\rho} \right)^n \right] + \operatorname{div}_h (\bar{\Omega} \Psi_g^{n+1}) + \alpha_g J_g^{n+1} = Q_g^{n+1}, \quad (7)$$

где диссипативная функция распределения Ψ_g связана с функцией J_g по формуле

$$J_g = \Psi_g + \delta_g h \operatorname{div}_h (\bar{\Omega} \Psi_g) - \theta_g h \operatorname{div}_h (\bar{\Omega} Q_g), \quad (8)$$

h — линейный размер ячейки; δ_g, θ_g — коэффициенты диссипации.

Решение (7), (8) будет более гладким, чем решение исходного гиперболического уравнения, вследствие действия диссипативного оператора.

Подставив выражение (8) для J_g в (7), получим систему уравнений относительно функции Ψ_g :

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{c\Delta t} + \alpha_g \right) \Psi_g^{\nu+1/2} + \left[1 + \left(\frac{1}{c\Delta t} + \alpha_g \right) \delta_g h \right] \operatorname{div}_h (\bar{\Omega} \Psi_g^{\nu+1/2}) = \\ = Q_g^\nu + \frac{\rho}{c\Delta t} \left(\frac{J_g}{\rho} \right)^n + \left(\frac{1}{c\Delta t} + \alpha_g \right) \theta_g h \operatorname{div}_h (\bar{\Omega} Q_g^\nu). \end{aligned} \quad (9)$$

Поскольку система уравнений является интегродифференциальной, будем применять метод итераций по правой части уравнения переноса, включающей интеграл столкновений и независимый источник в виде функции Планка. При итерационном решении уравнения переноса Q_g в (9) берется с предыдущей внешней итерации, т. е. Q_g^ν . Значения Q_g^ν на гранях ячейки (для вычисления разностного оператора $\operatorname{div}_h (\bar{\Omega} Q_g^\nu)$) определяются как полусуммы значений в центрах соседних ячеек.

Разностные аналоги начальных и граничных условий (3), (4) будем брать в виде

$$J^0 = \tilde{J}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2, m+1/2}^{(1)}; \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Psi \Big|_{i=0} &= \tilde{J}_{j+1/2, k+1/2, m+1/2}^{(2)} \quad \text{при} \quad (\bar{\Omega} \bar{n})_0 > 0; \\ \Psi \Big|_{i=I} &= \tilde{J}_{j+1/2, k+1/2, m+1/2}^{(3)} \quad \text{при} \quad (\bar{\Omega} \bar{n})_I < 0; \\ \Psi \Big|_{j=0} &= \tilde{J}_{i+1/2, k+1/2, m+1/2}^{(4)} \quad \text{при} \quad (\bar{\Omega} \bar{n})_0 > 0; \\ \Psi \Big|_{j=J} &= \tilde{J}_{i+1/2, k+1/2, m+1/2}^{(5)} \quad \text{при} \quad (\bar{\Omega} \bar{n})_J < 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\tilde{J}^{(1)}$ — заданная во всем блоке функция; $\tilde{J}^{(2)}, \tilde{J}^{(3)}, \tilde{J}^{(4)}, \tilde{J}^{(5)}$ — функции, заданные на границе ∂D_k . На оси симметрии

$$\Psi \Big|_{r=0} = \Psi_{2m+1-k} \Big|_{r=0} \quad \text{при} \quad k = 1, \dots, K_m. \quad (12)$$

Теперь система разностных уравнений (9) с краевыми условиями (10)—(12) является замкнутой. При этом предполагается, что параметры схемы δ, θ, h заданы.

Система уравнений (9)–(12) решается на основе DD/St-схемы. Переход на St-схему при $\Psi < 0$ необходим, поскольку DDAD-схема как линейная схема 2-го порядка точности не обеспечивает положительности решения, но повышает эффективность в оптически плотной среде.

Из уравнения (7) находим значение интенсивности энергии излучения в центре ячейки $J_g^{\nu+1/2}$ и накапливаем интегралы плотности излучения $U_g^{\nu+1/2}$ и плотности потока излучения $\vec{\Phi}_g^{\nu+1} = \vec{\Phi}_g^{\nu+1/2}$. Далее переходим к следующей по порядку ячейке. И так до тех пор, пока не переберем для данного направления $\vec{\Omega}_{k-1/2, m-1/2}$ все ячейки области D_l^m . Затем выполняется цикл по направлениям $\vec{\Omega}$, пока не рассчитаем все направления для данной группы. После этого переходим к следующей группе $g + 1$. По окончании цикла переходим ко второму (ускоряющему) этапу.

Выбор коэффициентов δ_g, θ_g, h для DDAD-схемы

Представим оператор переноса $\text{div}_h (\vec{\Omega} J)$ в виде разностной производной вдоль характеристической линии, проходящей через центр ячейки [1]:

$$\text{div}_h (\vec{\Omega} J_g) = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \sum_{l=1}^4 (\vec{\Omega} \vec{n} \Delta l r J_g)_l - \frac{\Delta S_{ij}}{\Delta V_{ij}} \frac{\eta_k J_{g,k} - \eta_{k-1} J_{g,k-1}}{\phi_k - \phi_{k-1}} = \frac{J_{g,s+1} - J_{g,s}}{\Delta x_s},$$

где $J_{g,s+1} = \frac{\sum_{\vec{\Omega} \vec{n} > 0} (\vec{\Omega} \vec{n} r \Delta l J_g) + \Delta S \frac{\eta_k}{\Delta \phi_k} J_{g,k}}{\sum_{\vec{\Omega} \vec{n} > 0} (\vec{\Omega} \vec{n} r \Delta l) + \Delta S \frac{\eta_k}{\Delta \phi_k}}$ — линейная интерполяция значений J_g на неосвещен-

ных гранях, $\vec{\Omega} \vec{n} > 0$. Аналогично определяется $J_{g,s}$ — линейная интерполяция значений J_g на освещенных гранях, $\vec{\Omega} \vec{n} < 0$. Линейный размер ячейки вдоль характеристики определяется как

$$\Delta x_s = \frac{\Delta V}{\sum_{\vec{\Omega} \vec{n} > 0} (\vec{\Omega} \vec{n} r \Delta l) + \Delta S \frac{\eta_k}{\Delta \phi_k}}.$$

Рассмотрим исходное уравнение переноса, записанное в характеристическом виде:

$$\tilde{\alpha}_g J_g^{n+1} + \frac{J_{g,s+1}^{n+1} - J_{g,s}^{n+1}}{\Delta x_s} = \tilde{Q}_g^{n+1},$$

$$\tilde{\alpha}_g = \frac{1}{c \Delta t^n} + \alpha_g, \quad \tilde{Q}_g^{n+1} = \frac{\rho}{c \Delta t^n} \left(\frac{J_g}{\rho} \right)^n + \frac{1}{4\pi} (\alpha_{sg} U_g^{n+1} + \alpha_{cg} B_g^{n+1}).$$

Проинтегрируем характеристическое уравнение на интервале $\Delta x_s = [x_s \leq x \leq x_{s+1}]$ в предположении постоянства $\tilde{\alpha}_g$ в ячейке:

$$J_{g,s+1} = \exp(-\tilde{\alpha}_g (x_{s+1} - x_s)) J_{g,s} + \int_{x_s}^{x_{s+1}} \tilde{Q}_g \exp(-\tilde{\alpha}_g (x_{s+1} - x)) dx. \quad (13)$$

Различные модификации метода дискретных ординат определяются способом аппроксимации источника и экспоненты в (13) [9]. Выбор коэффициентов δ_g, θ_g, h для DDAD-схемы будем осуществлять на основе линейной характеристической (LC) схемы.

В LC-схеме экспонента аппроксимируется точно и предполагается линейность источника в ячейке, т. е. $\tilde{Q}_g = \tilde{Q}_{g,s+1/2} + (x - x_{s+1/2}) \frac{\tilde{Q}_{g,s+1} - \tilde{Q}_{g,s}}{x_{s+1} - x_s}$. Из (13) получаем

$$(J_g)_{s+1} = \exp(-\Delta)(J_g)_s + \left(1 - \exp(-\Delta)\right) \frac{\tilde{Q}_{g,s+1/2}}{\tilde{\alpha}_g} + \left[1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\Delta}\right) \left(1 - \exp(-\Delta)\right)\right] \frac{\tilde{Q}_{g,s+1} - \tilde{Q}_{g,s}}{\tilde{\alpha}_g}, \quad (14)$$

где $\Delta = \tilde{\alpha}_g \Delta x_s$. Для одномерного плоского случая схема имеет 4-й порядок точности [7].

Рассмотрим теперь систему уравнений (9) относительно диссипативной функции Ψ_g , записанную в характеристическом виде:

$$\tilde{\alpha}_g \Psi_g^{n+1} + (1 + \tilde{\alpha}_g \delta_g h) \frac{\Psi_{g,s+1}^{n+1} - \Psi_{g,s}^{n+1}}{\Delta x_s} = \tilde{Q}_g^{n+1} + \tilde{\alpha}_g \theta_g h \frac{\tilde{Q}_{g,s+1}^{n+1} - \tilde{Q}_{g,s}^{n+1}}{\Delta x_s}, \quad (15)$$

$$\tilde{\alpha}_g = \frac{1}{c\Delta t^n} + \alpha_g, \quad \tilde{Q}_g^{n+1} = \frac{\rho}{c\Delta t^n} \left(\frac{J_g}{\rho}\right)^n + \frac{1}{4\pi} (\alpha_{sg} U_g^{n+1} + \alpha_{cg} B_g^{n+1}).$$

Для функций Ψ_g будем применять те же соотношения связи (6) с $p = 1$. Тогда можно показать, что с точностью до величин 2-го порядка малости справедливы соотношения, связывающие значения функций Ψ_g и \tilde{Q}_g в центре ячейки с их значениями на входе и выходе из нее по характеристике: $\Psi_{g,s+1/2} = (\Psi_{g,s+1} + \Psi_{g,s})/2$, $\tilde{Q}_{g,s+1/2} = (\tilde{Q}_{g,s+1} + \tilde{Q}_{g,s})/2$. Тогда, положив $h = \Delta x_s$, из (15) получим

$$\Psi_{g,s+1} = \frac{2 - \Delta(1 - 2\delta_g)}{2 + \Delta(1 + 2\delta_g)} \Psi_{g,s} + \frac{2\Delta}{2 + \Delta(1 + 2\delta_g)} \left[\frac{\tilde{Q}_{g,s+1/2}}{\tilde{\alpha}_g} + \theta_g (\tilde{Q}_{g,s+1} - \tilde{Q}_{g,s}) \right], \quad (16)$$

где $\Delta = \tilde{\alpha}_g \Delta x_s$.

Предполагая $\Psi_{g,s} = J_{g,s}$, выбираем δ_g, θ_g так, чтобы решение (16) совпадало с решением по LC-схеме (14), т. е. $\Psi_{g,s+1} = J_{g,s+1}$.

Совпадение решения на характеристике обеспечивается коэффициентами DDAD-схемы:

$$\delta_g = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\Delta)}{1 - \exp(-\Delta)} - \frac{1}{\Delta}; \quad \theta_g = \frac{1}{\tilde{\alpha}_g} \delta_g.$$

Здесь δ_g — монотонно возрастающая по $\Delta = \tilde{\alpha}_g \Delta x_s$ функция, ограниченная сверху значением $1/2$.

Можно показать [2], что при выбранных параметрах δ_g, θ_g, h диссипативная функция Ψ_g отличается от J_g на величину 2-го порядка малости $O(h^2)$.

В итоге получена DDAD-схема, которую можно трактовать следующим образом: вместо исходной задачи

$$\text{А:} \quad \tilde{\alpha}_g J_g^{n+1} + \text{div}_h (\tilde{\Omega} J_g^{n+1}) = \tilde{Q}_g^{n+1},$$

$$\tilde{\alpha}_g = \frac{1}{c\Delta t^n} + \alpha_g, \quad \tilde{Q}_g^{n+1} = \frac{\rho}{c\Delta t^n} \left(\frac{J_g}{\rho}\right)^n + \frac{1}{4\pi} (\alpha_{sg} U_g^{n+1} + \alpha_{cg} B_g^{n+1}),$$

которая при больших оптических плотностях плохо решается по DD-схеме (осцилляции, расходимость итераций), решаем новую задачу относительно диссипативной функции Ψ_g

$$\text{В:} \quad \tilde{\alpha}_g^d \Psi_g^{n+1} + \text{div}_h (\tilde{\Omega} \Psi_g^{n+1}) = \tilde{\alpha}_g^d \frac{\tilde{Q}_g^{n+1}}{\tilde{\alpha}_g} + \tilde{\alpha}_g^d \delta_g \Delta x_s \text{div}_h \left(\tilde{\Omega} \frac{\tilde{Q}_g^{n+1}}{\tilde{\alpha}_g} \right), \quad (17)$$

где $\tilde{\alpha}_g^d = \frac{\tilde{\alpha}_g}{1 + \delta_g \tilde{\alpha}_g \Delta x_s}$, $\tilde{\alpha}_g = \frac{1}{c\Delta t^n} + \alpha_g$.

Заметим, что в правой части уравнения (17) коэффициент $\tilde{\alpha}_g$ внесен под знак разностного оператора div_h . Это можно делать, поскольку $\tilde{\alpha}_g$ постоянен в ячейке. Поскольку значения \tilde{Q}_g известны лишь в центрах ячеек, а для вычисления оператора $\text{div}_h \left(\tilde{\Omega} \frac{\tilde{Q}_g^{n+1}}{\tilde{\alpha}_g} \right)$ значения \tilde{Q}_g нужны на гранях, будем их получать путем линейной интерполяции.

В оптически плотной среде ($\tilde{\alpha}_g \Delta x_s \gg 1$) $\delta_g \leq 0,5$, достигая 0,5 в асимптотике. Отсюда $\tilde{\alpha}_g^d \Delta x_s = \frac{\tilde{\alpha}_g \Delta x_s}{1 + \delta_g \tilde{\alpha}_g \Delta x_s} = \frac{1}{\frac{1}{\tilde{\alpha}_g \Delta x_s} + \delta_g} \leq 2$, т. е. в задаче В оптическая плотность мала относительно приведенного коэффициента поглощения $\tilde{\alpha}_g^d \Delta x_s$.

В оптически малоплотной среде ($\tilde{\alpha}_g \Delta x_s < 1$) имеем $\tilde{\alpha}_g^d \Delta x_s = \frac{\tilde{\alpha}_g \Delta x_s}{1 + \delta_g \tilde{\alpha}_g \Delta x_s} \approx \tilde{\alpha}_g \Delta x_s < 1$.

В итоге, всюду $\tilde{\alpha}_g \Delta x_s \leq 2$.

Заметим, что $\alpha h \leq 2$ является условием положительности и монотонности DD-схемы для плоской стационарной задачи [7]. Однако в рассматриваемом случае этого условия недостаточно для положительности решения. Необходимым условием положительности является неотрицательность правой части в (17):

$$\frac{\tilde{Q}_g^{n+1}}{\tilde{\alpha}_g} + \delta_g \Delta x_s \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \frac{\tilde{Q}_g^{n+1}}{\tilde{\alpha}_g} \right) \geq 0.$$

Это условие вдоль характеристики примет форму $\tilde{Q}_{g,s+1/2} + \delta_g \Delta x_s \frac{\tilde{Q}_{g,s+1} - \tilde{Q}_{g,s}}{\Delta x_s} \geq 0$.

Для выполнения этого условия в работе [10] в одномерном плоском случае предложено использовать для производной $\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x}$ выражение

$$\left(\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x} \right)_{s+1/2} = \begin{cases} \frac{\tilde{Q}_{s+1} - \tilde{Q}_s}{\Delta x_s} & \text{при } \left(\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x} \right)_{s+1/2} < \frac{2\tilde{Q}_{s+1/2}}{\Delta x_s}; \\ \frac{2\tilde{Q}_{s+1/2}}{\Delta x_s} & \text{при } \left(\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial x} \right)_{s+1/2} \geq \frac{2\tilde{Q}_{s+1/2}}{\Delta x_s}. \end{cases}$$

В DDAD-схеме используется аналогичная коррекция правой части, вследствие чего DDAD-схема становится нелинейной. Такой подход улучшает монотонные свойства DDAD-схемы во всем диапазоне изменения оптической плотности.

ВДМ-метод ускорения итераций

На первом этапе ($\nu + 1/2$) система кинетических уравнений (9) решается с известной правой частью. При расчете уравнения переноса в каждой ячейке и для каждого направления $\tilde{\Omega}$ представим разностный оператор $\operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \Psi)$ в виде

$$\operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \Psi) = \left(\frac{1}{\Delta V_{ij}} \sum_{(\tilde{\Omega} \vec{n})_l > 0} \Delta_l \Psi_l + \frac{\Delta S_{ij}}{\Delta V_{ij}} \frac{\eta_k \Psi_k}{\Delta \phi_{k-1}} \right) + \left(\frac{1}{\Delta V_{ij}} \sum_{(\tilde{\Omega} \vec{n})_l < 0} \Delta_l \Psi_l - \frac{\Delta S_{ij}}{\Delta V_{ij}} \frac{\eta_{k-1} \Psi_{k-1}}{\Delta \phi_{k-1}} \right).$$

В этом выражении в первую скобку включены неизвестные Ψ на неосвещенных гранях, а во вторую — известные Ψ на освещенных гранях из расчетов предшествующих по упорядочению ячеек.

Выразив из соотношений связи неизвестные значения Ψ на неосвещенных гранях через известные значения Ψ на освещенных гранях и значения Ψ в центрах ячеек, приведем $\operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \Psi)$ к виду

$$\operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \Psi)^{\nu+1/2} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} a \Psi^{\nu+1/2} - \frac{1}{\Delta V_{ij}} \sum_{(\tilde{\Omega} \vec{n})_l < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2}, \quad (18)$$

где $\Psi^{\nu+1/2}$ — значение Ψ в центре ячейки, а $\Psi_l^{\nu+1/2}$ — известные значения Ψ на освещенных гранях, включая грань ϕ_{k-1} . Коэффициенты a, b определяются в зависимости от типа ячеек (2 освещенные

+ 2 неосвещенные стороны, 1 освещенная + 3 неосвещенные стороны, 3 освещенные + 1 неосвещенная сторона).

Подставляя выражение (18) в уравнение (9) и интегрируя по $d\vec{\Omega}$, получаем

$$\left(\frac{1}{c\Delta t} + \alpha_g + d_g^{\nu+1/2}\right) U_g^{\nu+1/2} = \alpha_{sg} U_g^\nu + \alpha_{cg} B_g(T^\nu) + \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left[\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{K_m} \left(\sum_{(\vec{\Omega}\vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right)_{g, k-1/2, m-1/2} \Delta\mu_{m-1} \Delta\phi_{k-1} \right] + \frac{\rho}{c\Delta t} \left(\frac{U_g}{\rho}\right)^n, \quad (19)$$

где $d_g^{\nu+1/2} = \frac{1}{\Delta V_{ij}} \left[\sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{K_m} \left(a \Psi_g^{\nu+1/2} \right)_{k-1/2, m-1/2} \Delta\mu_{m-1} \Delta\phi_{k-1} \right] / U_g^{\nu+1/2}$ — коэффициент квазидиффузионного типа.

Выпишем для второго (ускоряющего) этапа систему уравнений относительно плотности излучения, поднимая итерационный индекс для $U_g^{\nu+1}$ и $B_g^{\nu+1}$. Вычитая из системы для второго этапа систему (19) первого этапа, получаем систему для поправок:

$$\Delta U_g^{\nu+1} = U_g^{\nu+1} - U_g^{\nu+1/2} = b_g (B_g^{\nu+1} - B_g^\nu), \quad (20)$$

где $b_g = \frac{\alpha_{cg}}{\frac{1}{c\Delta t} + \alpha_{cg} + d_g^{\nu+1/2}}$, $g = 1, 2, \dots, G$.

Линеаризуя энергию и функцию Планка по температуре и подставляя $U_g^{\nu+1}$ из (20) в уравнение энергии, получаем формулу для вычисления температуры:

$$T^{k+1} = T^k + \left\{ \rho (E^n - E^k) + \Delta t^n \rho Q + \Delta t^n \sum_{g=1}^G \left\{ \alpha_{cg} \left[U_g^{\nu+1/2} + b_g (B_g(T^k) - B_g^\nu) \right] - \alpha_{cg} B_g(T^k) \right\} \right\} \times \left\{ \rho E_T^k + \Delta t \sum_{g=1}^G [\alpha_{cg} (1 - b_g)] B_{gT}^k \right\}^{-1},$$

где $E_T = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)^k$, $B_{gT} = \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^k$.

После сходимости ньютоновских итераций k получаем температуру $T^{\nu+1} = T^{k+1}$. По новой температуре находим в центре ячейки $B_g^{\nu+1}$, а из формулы (20) — плотность $U_g^{\nu+1}$. Внешние итерации ν заканчиваются при сходимости $U_g^{\nu+1}$ и $T^{\nu+1}$.

Численные результаты

Ниже приводятся результаты сравнительных расчетов двух задач.

Первая задача построена по аналогии со второй задачей Флека [11]. Эта трехобластная задача характеризуется резким различием оптических толщин в соседних областях, что приводит к значительным трудностям по обеспечению монотонного решения и большому числу итераций по нелинейности уравнения переноса. На данной задаче оценивались точность методики и скорость сходимости итерационных алгоритмов. Геометрия системы неподвижная.

Вторая задача — о распространении излучения от раскаленного шара с учетом движения вещества [12].

Вторая задача Флека. Задача Флека в работе [11] рассматривалась для одномерной плоской геометрии. Для численного моделирования в двумерной осесимметричной постановке плоский слой

заменен на сферический, удаленный от центра системы координат на 100 см. Сфера состоит из трех физических областей: $r = [100; 102]$ — область 1; $r = [102; 102,4]$ — область 2; $r = [102,4; 104]$ — область 3.

На внутреннюю поверхность сферы падает планковский поток излучения с интенсивностью энергии излучения $J_g = \frac{1}{4\pi} B_g (T = 1)$ для $\vec{\Omega}\vec{n} < 0$, соответствующий температуре вещества $T = 1$. Внешняя поверхность сферы является свободной поверхностью, т. е. $J_g = 0$ для $\vec{\Omega}\vec{n} < 0$. Начальная температура в областях $T_{1,2,3} = 0,001$ кэВ, уравнение состояния вещества $E_{1,2,3} = 0,81T$; плотность вещества $\rho_{1,2,3} = 1$ г/см³.

Рассматривается энергетический интервал от 0 до 15 кэВ. Сетки по энергетической и пространственной переменным приведены в работе [13], разбиение по углу равномерное. Коэффициент поглощения вычисляется по формуле

$$\alpha_g = \frac{k_i}{e_g^3} \left(1 - \exp\left(-\frac{e_g}{T}\right) \right), \quad \text{где } k_i = \begin{cases} 27 & \text{для } i = 1, 3; \\ 10\,000 & \text{для } i = 2, \end{cases} \quad i - \text{номер области; } g = 1, \dots, 28.$$

Коэффициент рассеяния равен нулю. Сетка в пространстве направлений $\vec{\Omega}$ построена согласно ES_8 -квадратуре. Шаг по времени постоянный: $\tau = 0,0002$. Итерационный процесс решения на каждом временном шаге проводился до вычисления температуры вещества с точностью до $\epsilon_{сх} = 0,001$.

На рис. 1 приведены профили температуры вещества по радиусу в полуцелых точках сетки на 15-м временном шаге ($ct = 9$ см), рассчитанные по двумерной методике ФЕНИКС по DDAD-схеме 2-го порядка точности, по одномерной методике ERA [14] по схеме 2-го порядка и по методике ВНИИЭФ [13]. Видно хорошее согласие результатов трех различных методик.

На рис. 2 приведены профили температуры вещества, рассчитанные по методике ФЕНИКС по DDAD-схеме 2-го порядка точности и St-схеме 1-го порядка точности, а также по одномерной методике ERA по схемам 2-го и 1-го порядков точности. Видно, что схемы 1-го порядка точности размазывают фронт тепловой волны. Результаты счета по программам ERA и ФЕНИКС согласуются между собой.

На рис. 3 приведены профили температуры вещества при $ct = 400$ см (выход на стационарное решение). Точное решение получено по одномерной программе по схеме 1-го порядка точности на сетке из 4 362 ячеек.

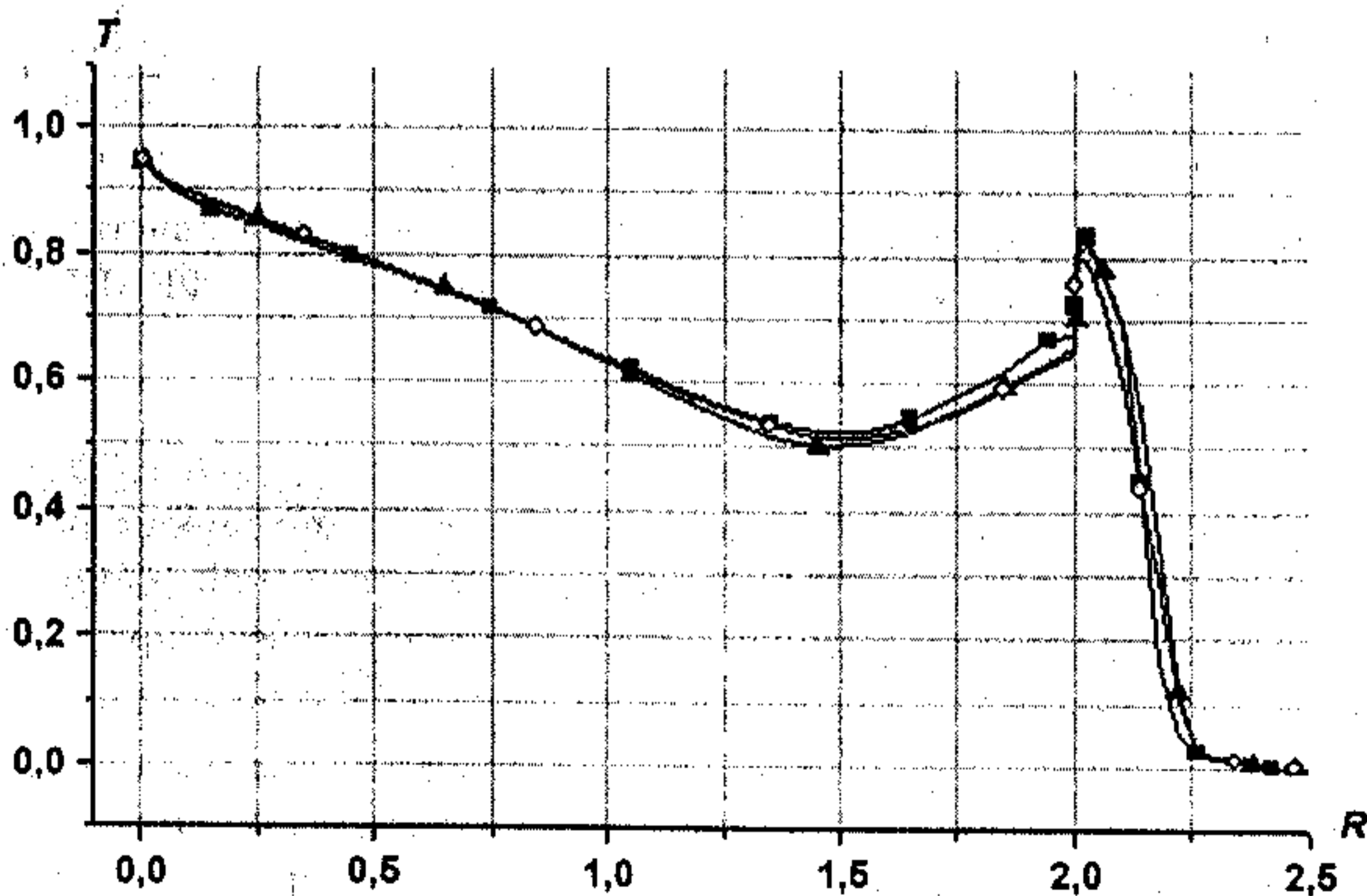


Рис. 1. Температура вещества при $ct = 9$ см, полученная по схемам 2-го порядка точности в кинетическом приближении: \blacktriangle — ВНИИЭФ; \blacksquare — ERA; \circ — ФЕНИКС

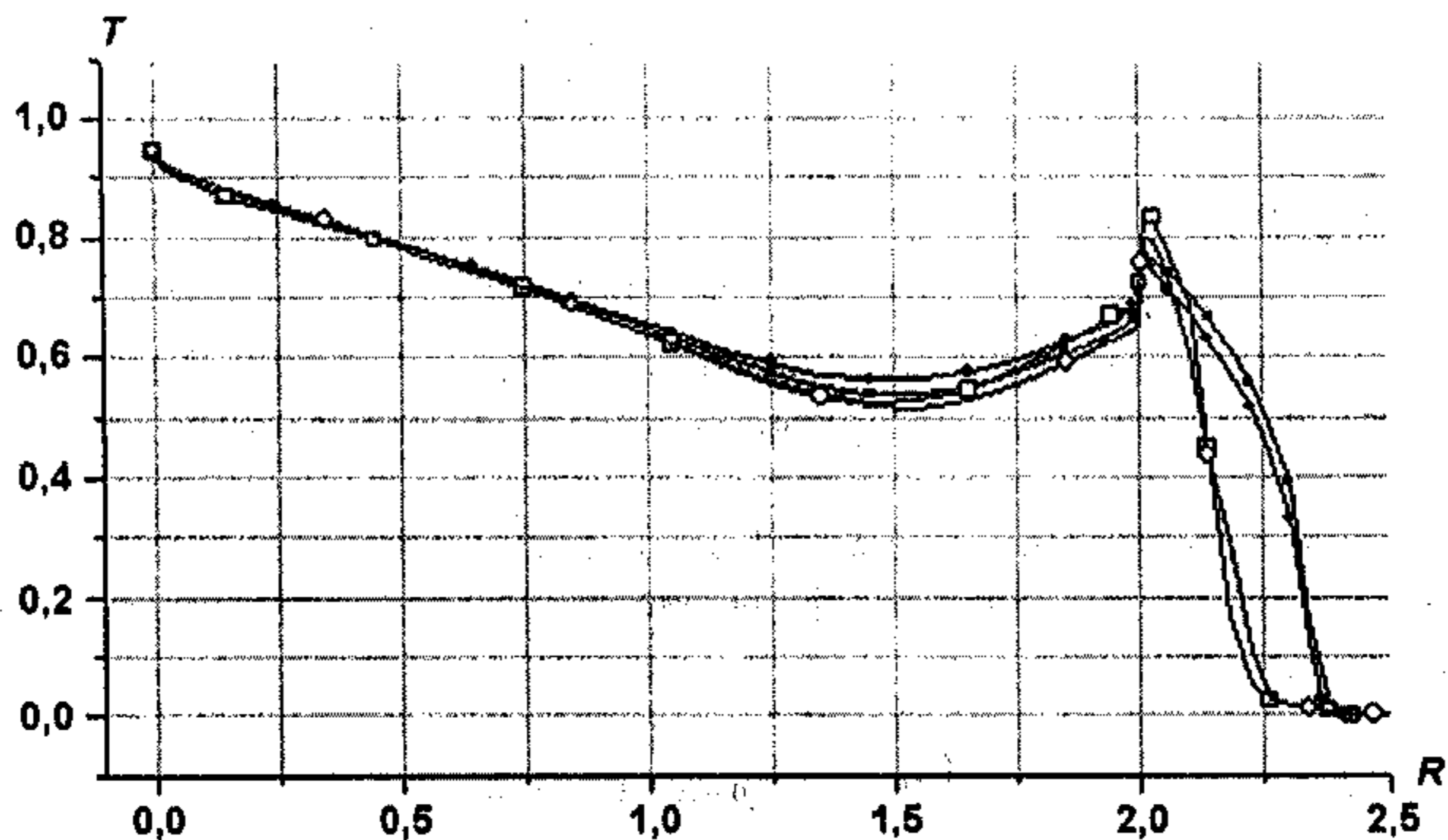


Рис. 2. Температура вещества при $st = 9$ см, рассчитанная по схемам 1-го и 2-го порядков точности в кинетическом приближении: \blacksquare — ERA, 1-й порядок; \bullet — ФЕНИКС, 1-й порядок; \square — ERA, 2-й порядок; \circ — ФЕНИКС, 2-й порядок

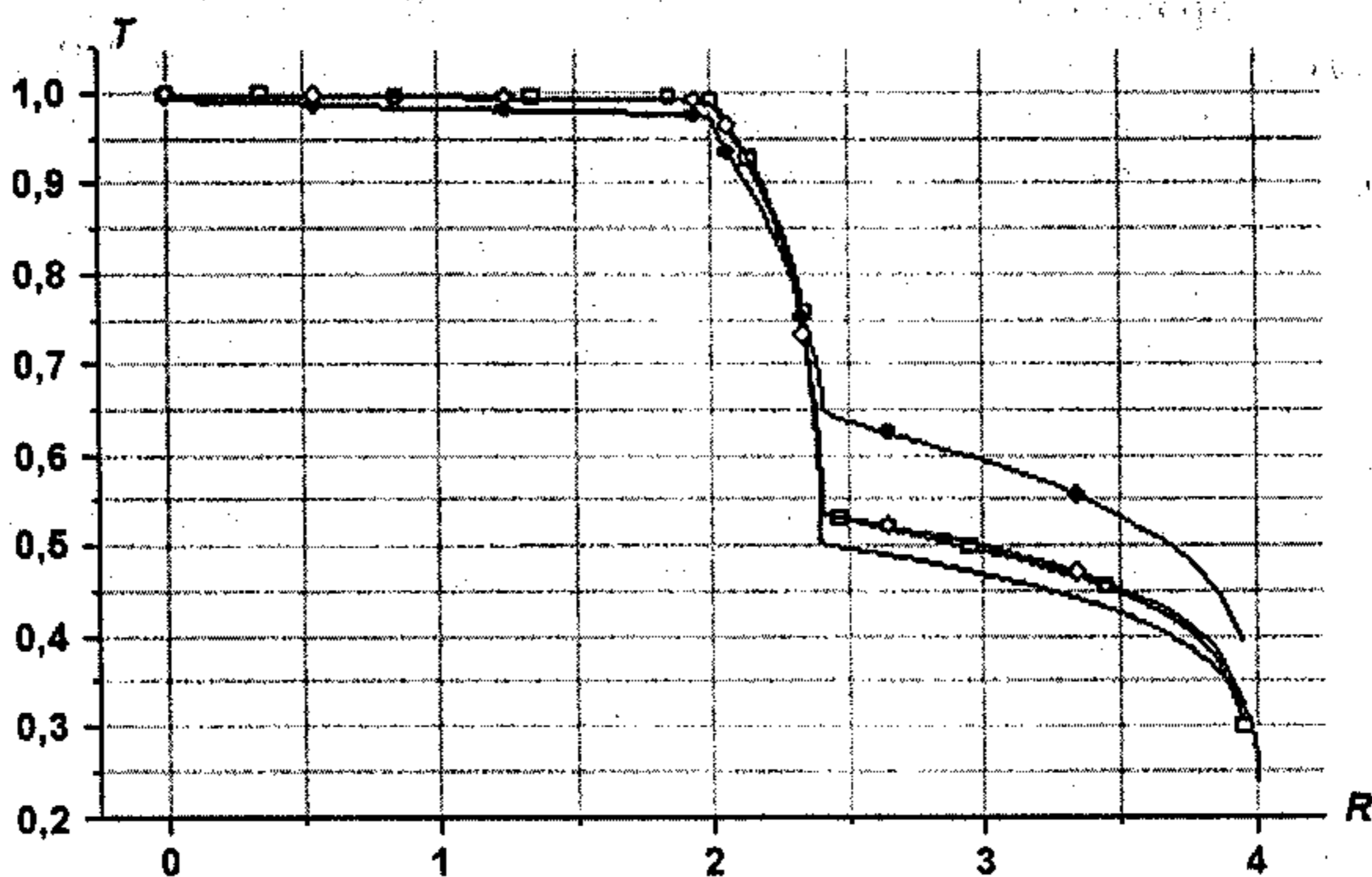


Рис. 3. Сравнение температуры вещества при $st = 400$ см, полученной в кинетическом приближении, с точным решением: — — точное решение; \square — ERA, 2-й порядок; \bullet — ФЕНИКС, 1-й порядок; \circ — ФЕНИКС, 2-й порядок

На рис. 4 представлены результаты решения задачи по трем методикам расчета спектрального переноса излучения комплекса ФЕНИКС: P_1 -приближение, квазидиффузионное приближение, кинетическое приближение. Видно, что решение, полученное в квазидиффузионном приближении, отличается от решения P_1 -методики и находится ближе к кинетическому.

В кинетической модели для ускорения итераций реализован метод выделения диагональной матрицы. ВДМ-метод применяется как для St-, так и для DDAD-схемы. Применение метода простой итерации в задаче Флека дает несколько сот итераций на каждом временном шаге. Суммарное число итераций для ВДМ-метода за 15 временных шагов при счете по St-схеме равно 211, при счете по DDAD-схеме — 248, что говорит об удовлетворительной сходимости метода ускорения итераций в кинетической методике.

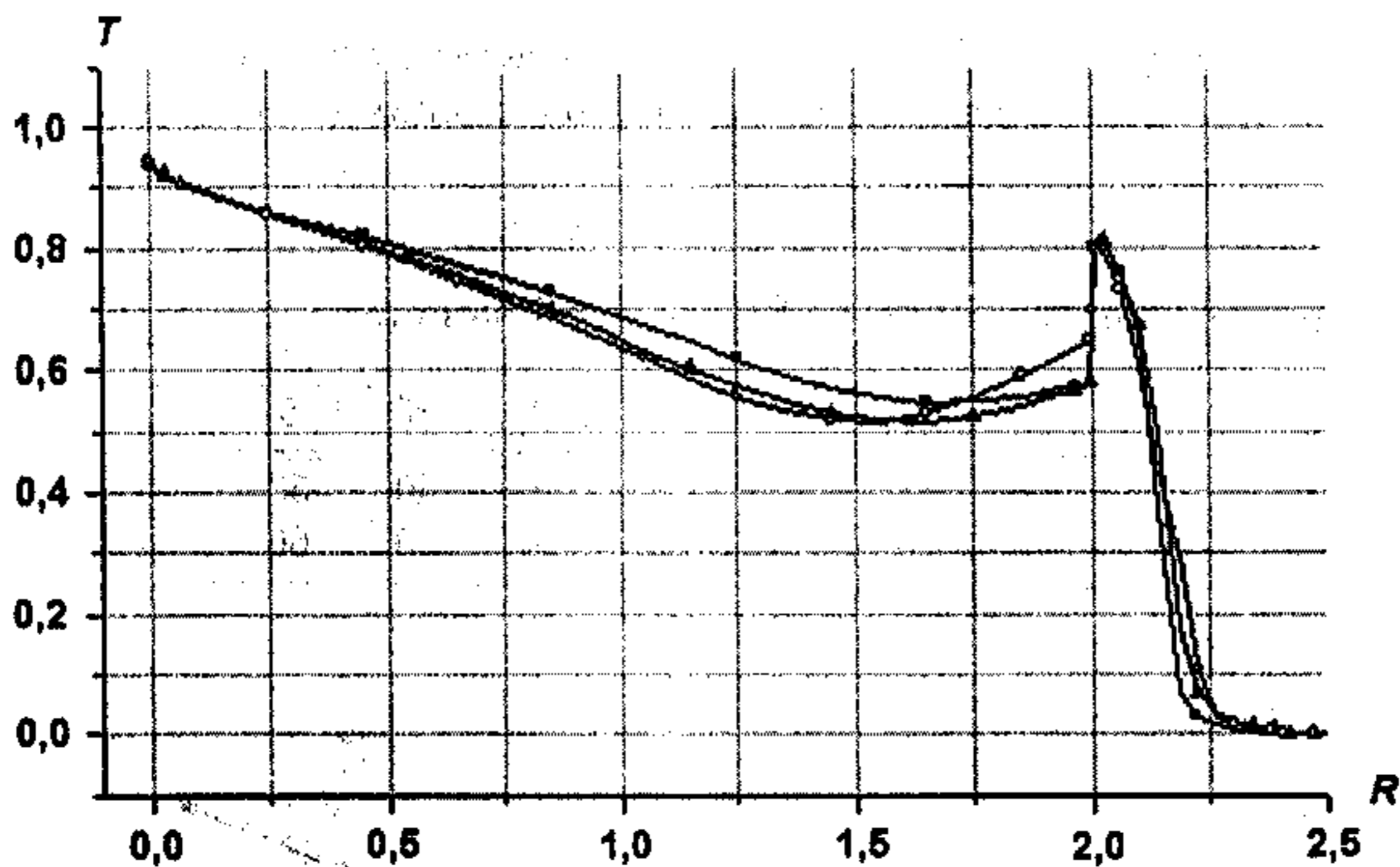


Рис. 4. Температура вещества при $ct = 9$ см, полученная в комплексе программ ФЕНИКС: —■— — P_1 -приближение, 2-й порядок; —▲— — квазидиффузионное приближение, 2-й порядок; —○— — кинетическое приближение, 2-й порядок

Сферическая задача переноса излучения с учетом движения вещества. Следующая модельная задача — о распространении излучения от раскаленного шара с учетом движения вещества [12]. Рассчитывалось движение сферической системы (рис. 5), состоящей из четырех областей с различной оптической плотностью.

Внутри сферы радиусом 9 см находится равновесное излучение с постоянной температурой $T = 5$, на внешней границе задается нулевой входящий поток. Газодинамическое давление на обеих границах равно нулю. По энергии фотонов взято 13 групп.

Характеристики задачи заданы в табл. 1.

Сетка по радиусу — равномерная в областях, по углу — равномерная, 80 интервалов; по направлениям — согласно ES_{12} -квадратуре. Начальная температура во всех областях $T_0 = 10^{-5}$ кэВ.

При вычислении потоков и плотности излучения по энергии фотонов взято 13 групп согласно табл. 2.

При вычислении спектральных пробегов используется более подробная сетка по энергии фотонов (156 групп). После вычисления пробегов на подробной сетке производится усреднение спектральных пробегов на основную сетку.

Задача считалась до момента времени $t = 0,51$. Величина временного шага выбиралась автоматически, в зависимости от числа итераций.

Расчеты по кинетической методике были проведены по схемам 1-го (St-схема) и 2-го (DDAD-схема) порядков точности. Численные решения сравнивались с полученными ранее результатами счета по

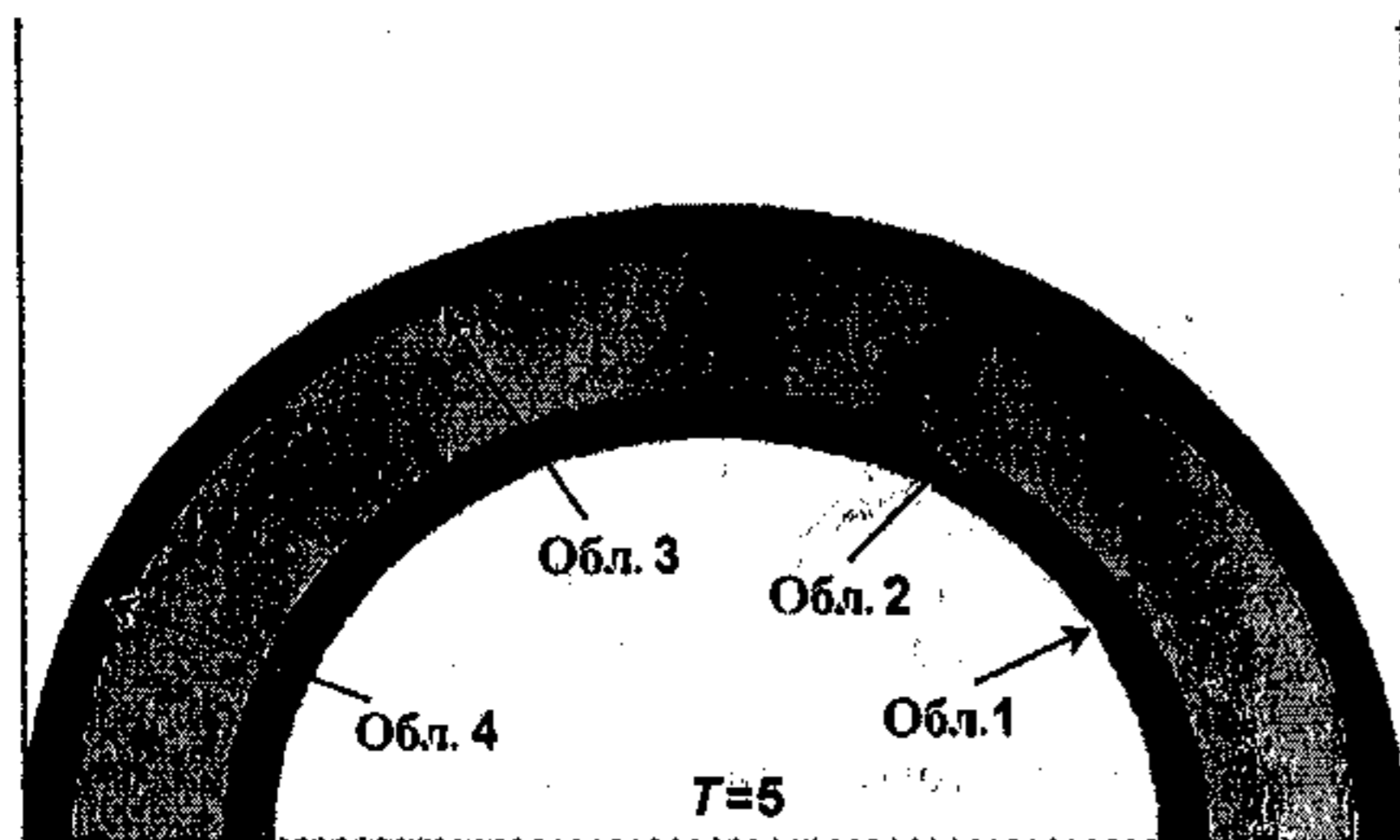


Рис. 5. Геометрия сферической системы

Таблица 1

Характеристики сферической задачи

Номер области	1	2	3	4
Плотность, г/см ³	18,7	0,67	11,4	2,7
Левый радиус, см	9	10	13	13,1
Правый радиус, см	10	13	13,1	14,1
Число ячеек по радиусу	40	40	20	20

P_1 и квазидиффузионной методикам [12]. На рис. 6 приведены интегральные по времени и энергии потоки излучения, на рис. 7 — спектральные потоки излучения (для демонстрации различий в

Таблица 2

Разбиение на группы по энергии фотонов в сферической задаче

Номер группы	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
Левая граница, кэВ	0	5	10	15	20	25	30	40	50	60	70	80	90
Правая граница, кэВ	5	10	15	20	25	30	40	50	60	70	80	90	100

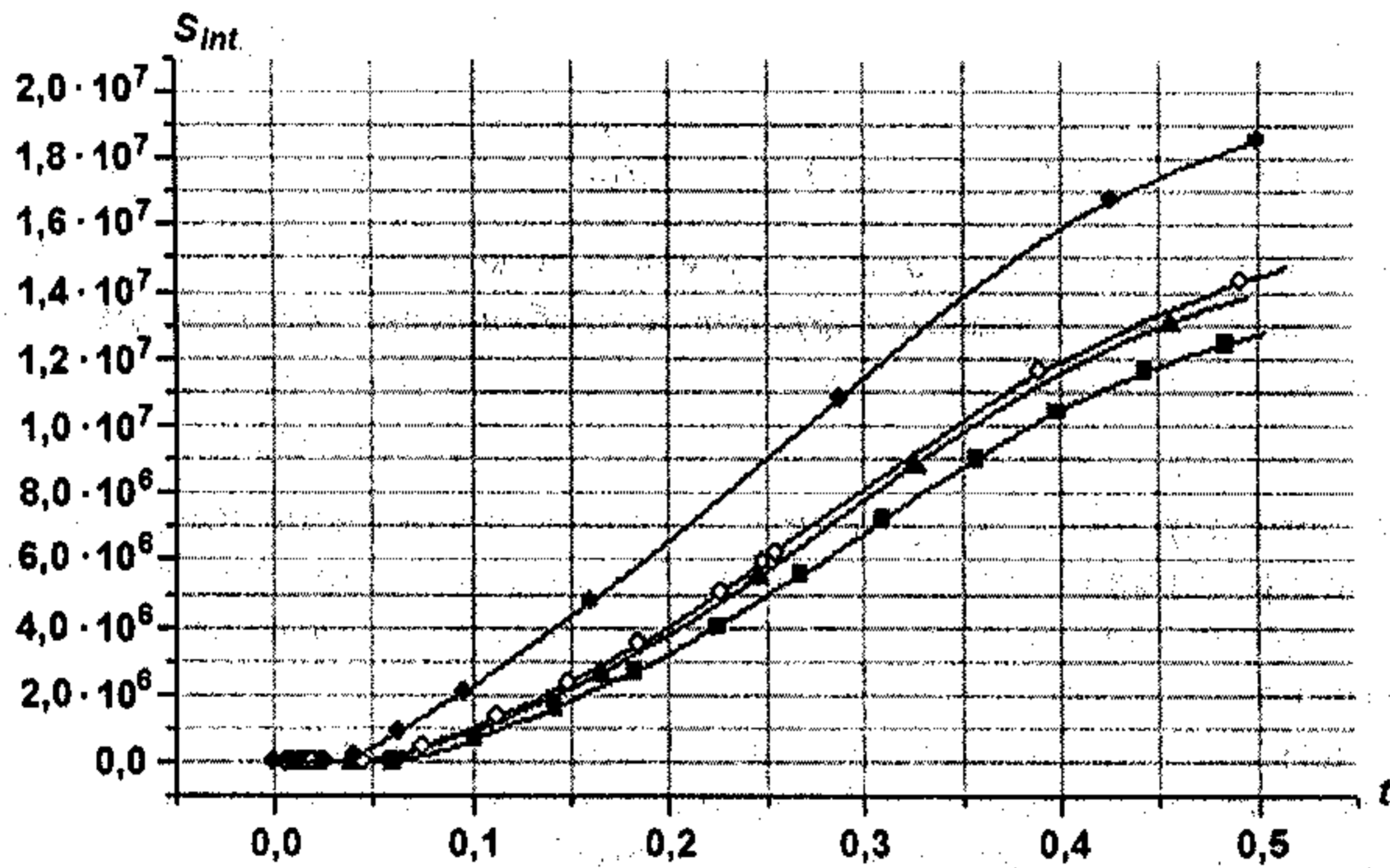


Рис. 6. Интегральные по времени и энергии потоки излучения через внешнюю границу системы, рассчитанные по комплексу программ ФЕНИКС: —■— — P_1 -приближение (2-й порядок); —▲— — квазидиффузионное приближение (2-й порядок); —○— — DDAD-схема (кинетическое приближение, 2-й порядок); —●— — St-схема (кинетическое приближение, 1-й порядок)

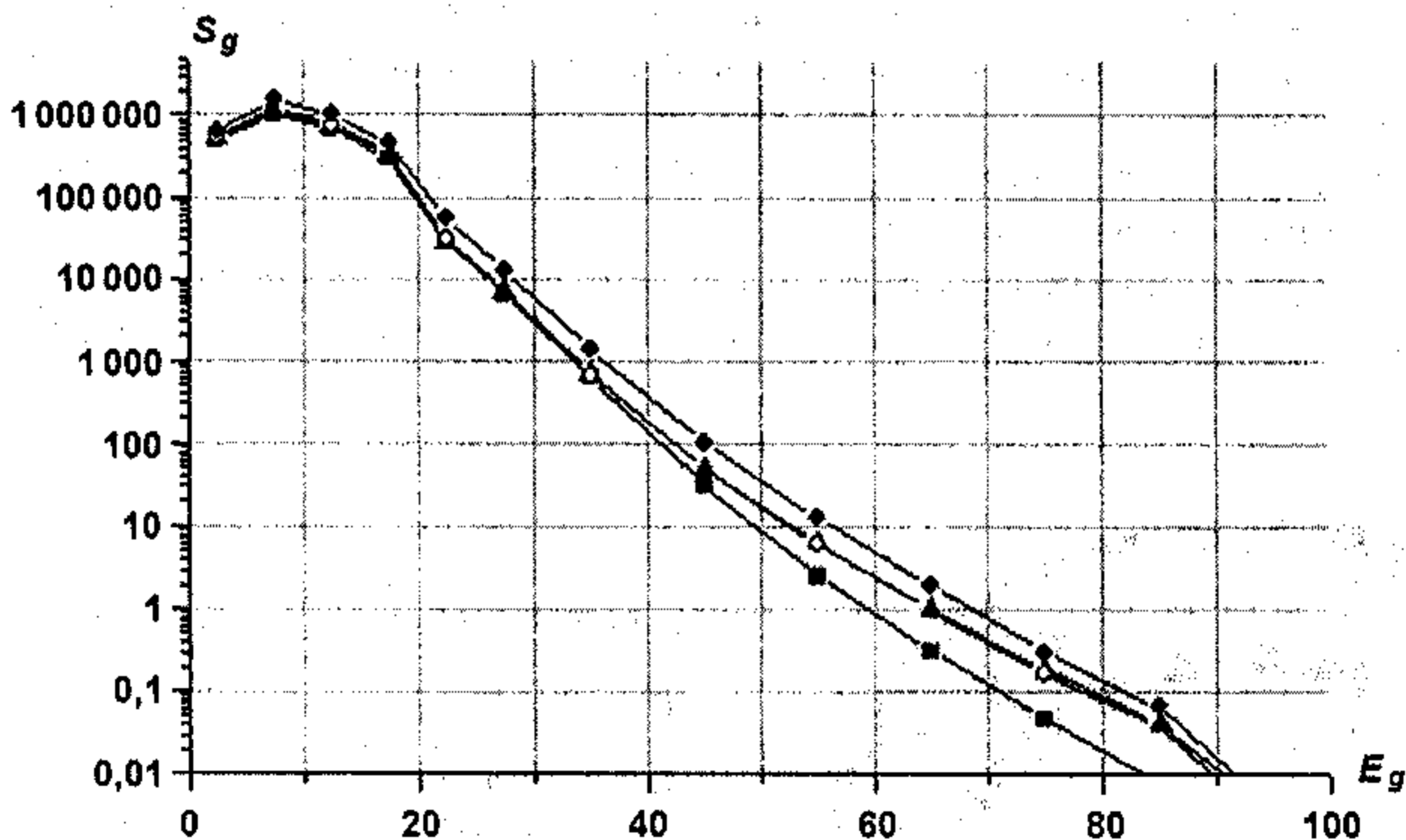


Рис. 7. Спектральные потоки излучения через внешнюю границу системы, рассчитанные по комплексу программ ФЕНИКС: —■— — P_1 -приближение (2-й порядок); —▲— — квазидиффузионное приближение (2-й порядок); —○— — DDAD-схема (кинетическое приближение, 2-й порядок); —●— — St-схема (кинетическое приближение, 1-й порядок)

жесткой части спектра шкала по энергии выбрана логарифмической). На рис. 8, 9 приведены зависимости средних по областям значений температуры и плотности вещества от времени. Расчеты выполнены на одинаковых сетках по пространству и энергии.

Из рис. 6, 7 видно, что решения, полученные по кинетической (DDAD-схема 2-го порядка точности) и квазидиффузионной методикам, хорошо согласуются как по интегральным, так и по спектральным потокам излучения (особенно в жесткой части спектра). St-схема 1-го порядка дает завышенные, решение по P_1 -методике — заниженные значения потоков. Вместе с тем интегральные характеристики системы, такие как геометрия системы, средние значения температуры и плотности вещества (см. рис. 8, 9), отличаются незначительно.

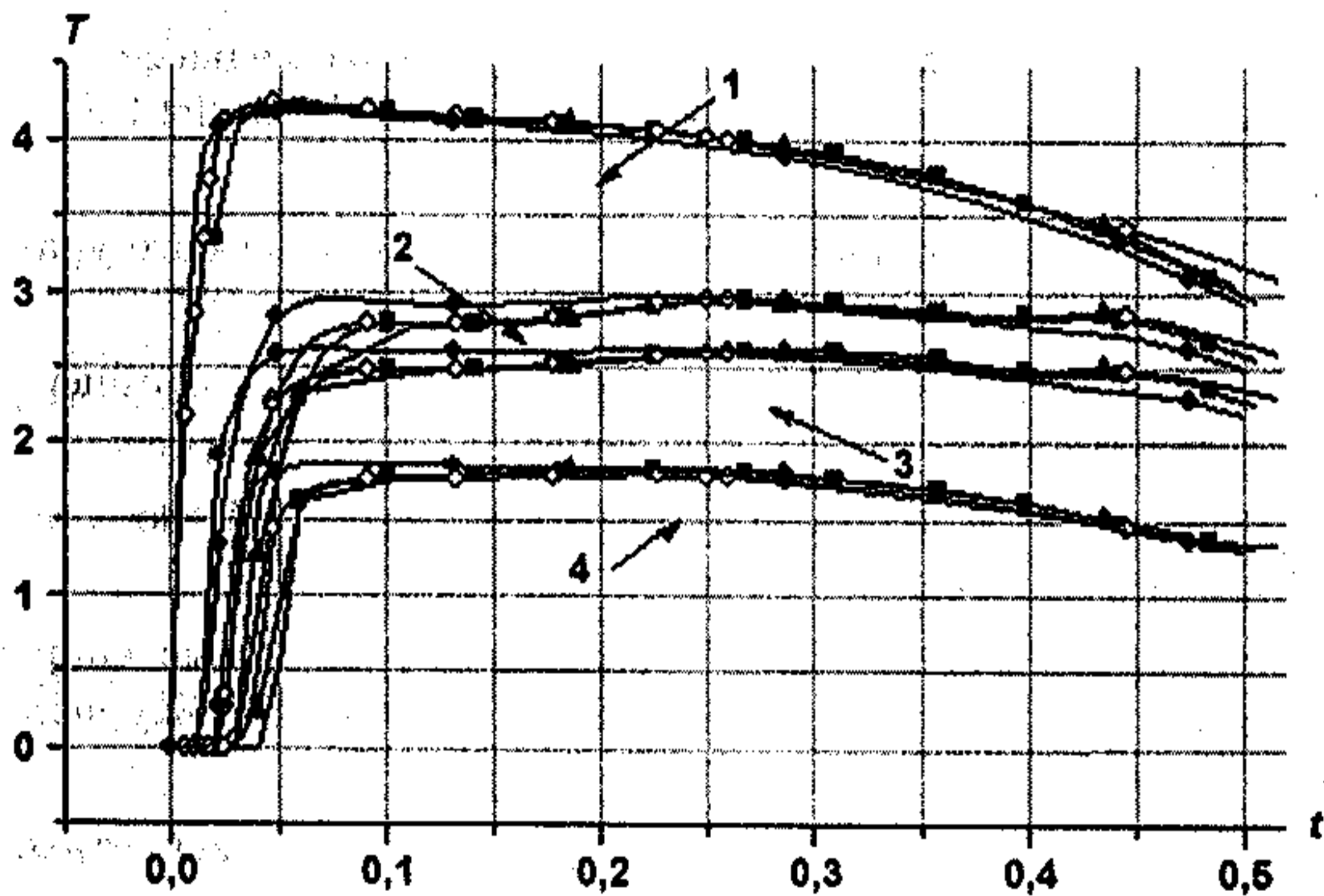


Рис. 8. Средние по областям значения температуры вещества, рассчитанные по комплексу программ ФЕНИКС: —■— — P_1 -приближение (2-й порядок); —▲— — квазидиффузионное приближение (2-й порядок); —○— — DDAD-схема (кинетическое приближение, 2-й порядок); —●— — St-схема (кинетическое приближение, 1-й порядок); 1—4 — номера соответствующих областей

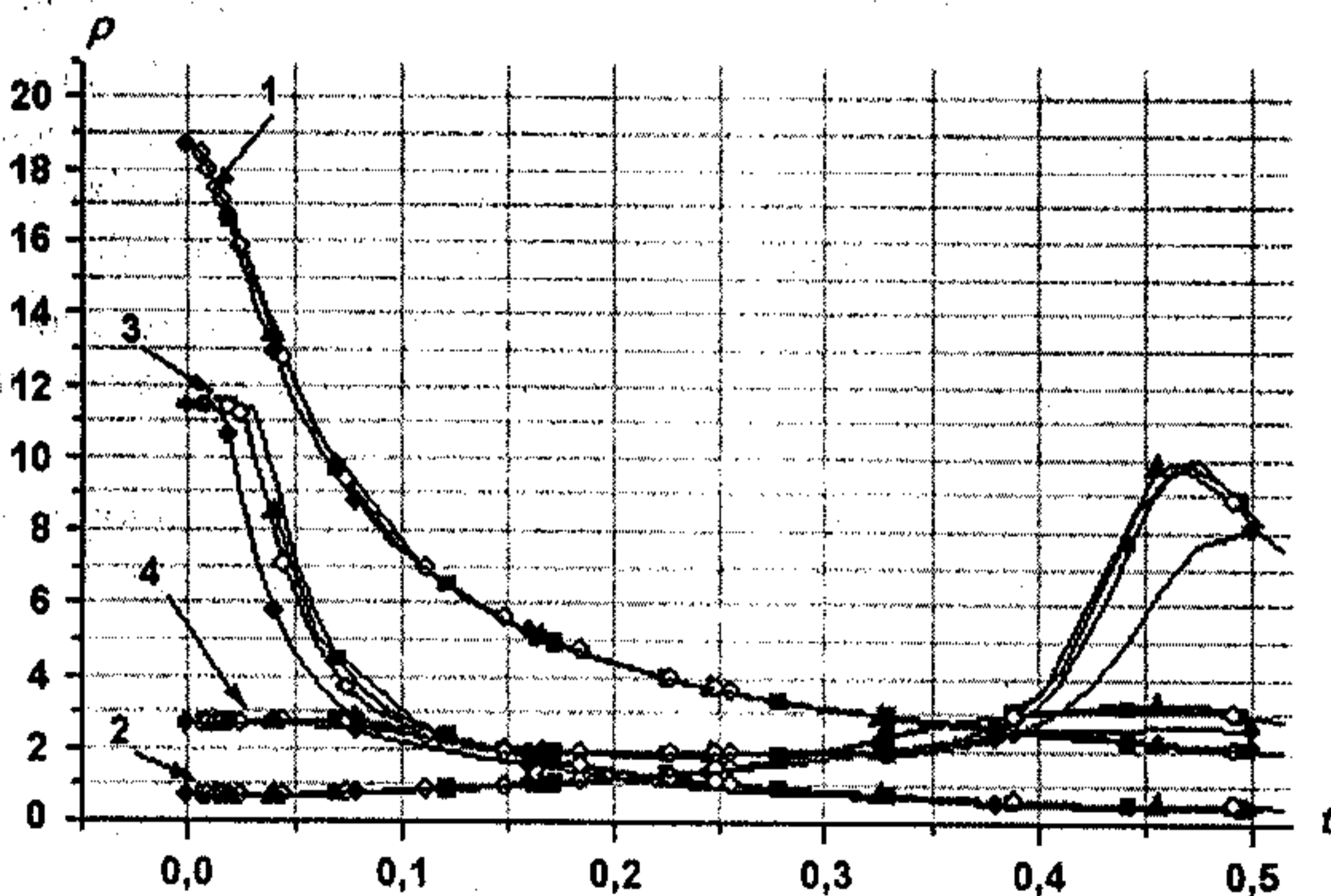


Рис. 9. Средние по областям значения плотности вещества, рассчитанные по комплексу программ ФЕНИКС: —■— — P_1 -приближение (2-й порядок); —▲— — квазидиффузионное приближение (2-й порядок); —○— — DDAD-схема (кинетическое приближение, 2-й порядок); —●— — St-схема (кинетическое приближение, 1-й порядок); 1—4 — номера соответствующих областей

Список литературы

1. Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Писарев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А. Метод дискретных ординат с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для численного решения уравнения переноса нейтронов // См. настоящий выпуск. С. 13—24.
2. Карлсон Б. Численное решение задачи кинетической теории нейтронов // Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1963. С. 243—258.
3. Гусев В. Ю., Козманов М. Ю., Рачилов Е. Б. Метод решения неявных разностных уравнений, аппроксимирующих системы уравнений переноса и диффузии излучения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1984. Т. 24, № 12. С. 1842—1849.
4. Лебедев С. Н., Романова Е. М., Стряхнина О. В. Параллельные вычисления для решения стационарного уравнения переноса // Тез. межд. конф. "Parallel CFD, 2003". Москва, 13—15 мая 2003 г.
5. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1964. Т. 4, № 6. С. 1078—1087.
6. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
7. Carlson B. G. The numerical theory of neutron transport // Methods of computational physics. 1963. Vol. 1, No 9. P. 408—425.
8. Троцкий В. Е. О классах сеток, допускающих консервативные аппроксимации двумерного оператора переноса треугольным разностным оператором // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1976. Т. 16, № 3. С. 793—797.
9. Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМ АН СССР, 1986.
10. Alcouffe R. E., Larsen E. W., Miller W. F., Wienke B. R. Computational Efficiency of Numerical Methods for the Multigroup Discrete Ordinates Neutron Transport Equations in Slab Geometry Case // Nucl. Sci. Eng. 1979. Vol. 71, No 2. P. 111—127.
11. Fleck J. A., Cummings J. D. An Implicit Monte Carlo Scheme for Calculating Time and Frequency Dependent Nonlinear Radiation Transport // J. Comput. Phys. 1971. Vol. 8. P. 313—342.
12. Гаджиев А. Д., Романова Е. М., Селезнев В. Н., Шестаков А. А. Методика ТОМ4—КД для математического моделирования двумерных уравнений переноса излучения в многогрупповом квазидиффузионном приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 4. С. 48—59.
13. Федотова Л. П., Шагалиев Р. М. Конечно-разностный КМ-метод для двумерных нестационарных процессов переноса в многогрупповом кинетическом приближении // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 6. С. 29—41.
14. Зуев А. И., Карлыханов Н. Г. Метод решения уравнений радиационно-кондуктивного теплопереноса // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1983. Т. 23, № 6. С. 910—921.