

УДК 517.958:536.2

МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ С TVD-РЕКОНСТРУКЦИЕЙ И СИНТЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. Д. Гаджиев, Д. А. Кошутин, А. А. Шестаков
(РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск)

Рассматривается новая методика для численного решения одномерного уравнения переноса теплового излучения. Суть нового подхода состоит в применении метода дискретных ординат с TVD-реконструкцией для решения кинетического уравнения и синтетического метода на основе P_1 -приближения для ускорения сходимости итераций при совместном решении уравнения переноса и уравнения энергии.

Ключевые слова: перенос излучения, TVD-схема, итерационный метод.

Введение

Разработка эффективного численного метода решения уравнения переноса теплового излучения является сложной проблемой. Для решения кинетического уравнения следует применять схему второго порядка аппроксимации с монотонными свойствами, что продиктовано существующей практикой. Второй порядок и монотонность — это плохо совместимые требования. Еще в 50-х годах прошлого столетия С. К. Годуновым было доказано [1], что для уравнения переноса в классе линейных схем нет схемы второго и более высоких порядков с монотонными свойствами.

Другой стороной исходной проблемы является ускорение сходимости итераций при совместном решении уравнений переноса и энергии. Дело в том, что простые итерации могут сходиться крайне медленно, поскольку спектральный радиус для них может быть сколь угодно близким к единице [2].

В данной работе для преодоления указанных трудностей предлагается при решении кинетического уравнения переноса излучения использовать нелинейную схему, основанную на методе дискретных ординат (St-схему) с TVD-реконструкцией, что позволяет совместить второй порядок аппроксимации и монотонность. Такой метод уже был предложен в [3, 4]. В данной работе в отличие от [3, 4] вся добавка от TVD-реконструкции берется с предыдущего шага. Это заметно упрощает схему.

Для ускорения сходимости итераций предлагается применять синтетический метод PSAC (P_1 Synthetic Acceleration Correction Method). В этом методе для ускорения сходимости итераций по кинетическому уравнению используется приближение низкого уровня, а именно P_1 -приближение. Чтобы PSAC-метод был сходящимся, необходимо обеспечивать согласованность разностной схемы P_1 -уравнений со схемой решения кинетического уравнения. Принцип согласованности был сформулирован в работах [5, 6]. Для согласования применяем многошаговую процедуру Ларсена [6], которая позволяет поэтапно согласовать систему P_1 -уравнений, граничные условия и соотношения связи. Окончательная система P_1 -уравнений с граничными условиями и соотношениями связи для ускоряющего этапа приводится к поправочной форме. Следует заметить, что P_1 -приближение в поправочной форме для ускорения сходимости итераций при совместном решении уравнения переноса излучения и уравнения энергии применялось в работах [7, 8].

В работе [9] проведено сравнение решений уравнения переноса излучения методом Райбики и методом выделения диагонального элемента (ВДЭ) в поправочной форме P_1 -уравнений [8]. Показана высокая эффективность метода ускорения сходимости итераций с использованием поправочной

формы P_1 -уравнений. Число внешних кинетических итераций близко к предельно возможному минимальному уровню по прямому методу Райбики.

В данной работе в отличие от методов [8, 9] используется новая схема решения уравнения переноса на основе метода дискретных ординат с TVD-реконструкцией и другая схема решения поправочных уравнений P_1 -приближения. Достоинством этого метода является также его обобщаемость на многомерные геометрии.

Постановка задачи

Система уравнений распространения излучения в неподвижной среде состоит из спектрального уравнения переноса в кинетической постановке, описывающего перенос, поглощение и рассеяние теплового излучения, и уравнения энергии, характеризующего изменение температуры вещества за счет поглощения и испускания фотонов. Данная система без учета движения среды для изотропного рассеяния выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial J_g}{\partial t} + \frac{\mu}{r^\eta} \frac{\partial}{\partial r} (r^\eta J_g) + \frac{\eta}{2r} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^2) J_g] + \alpha_g J_g &= \frac{1}{2} (\alpha_{cg} B_g + \alpha_{sg} U_g) = Q_g; \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} (U_g - B_g); \quad g = 1, 2, \dots, G. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь c — скорость света; r — пространственная координата; t — время; μ — косинус угла между направлением полета фотона и осью x ; J_g — интенсивность излучения группы g ; α_{cg} — коэффициент поглощения; α_{sg} — коэффициент рассеяния; $\alpha_g = \alpha_{cg} + \alpha_{sg}$; $E(T)$ — удельная внутренняя энергия вещества, где $T(x, t)$ — температура среды; $B_g(T)$ — интенсивность равновесного излучения группы g ; $U_g = \int_{-1}^1 J_g d\mu$ — спектральная плотность энергии излучения, умноженная на c ; $\eta = 0$ — плоская геометрия; $\eta = 2$ — сферически-симметричная геометрия.

Система (1) решается с граничными условиями

$$J_g(R, \mu, t) = \phi_g(\mu, t) \quad \text{для } \mu \leq 0. \quad (2)$$

Начальное условие:

$$J_g(r, \mu, t) /_{t=t^0} = J_g^0(r, \mu). \quad (3)$$

Разностная аппроксимация

Систему (1) будем аппроксимировать по DS_n -методу. Запишем интегральный закон сохранения для стандартной ячейки $\{r_i \leq r \leq r_{i+1}, \mu_{m-1/2} \leq \mu \leq \mu_{m+1/2}\}$:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V_i}{\tau^n c} \left(J_{g,m,i+1/2}^{n+1} - J_{g,m,i+1/2}^n \right) + \mu_m \left(r_{i+1}^\eta J_{g,m,i+1}^{n+1} - r_i^\eta J_{g,m,i}^{n+1} \right) + \\ + \frac{\eta}{2} \frac{\varsigma_i}{\omega_m} \left(a_{m+1/2} J_{g,m+1/2,i+1/2}^{n+1} - a_{m-1/2} J_{g,m-1/2,i+1/2}^{n+1} \right) + \alpha_{g,i+1/2} \Delta V_i J_{g,m,i+1/2}^{n+1} &= Q_{g,i+1/2} \Delta V_i; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\frac{E_{i+1/2}^{n+1} - E_{i+1/2}^n}{\tau^n} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} (U_g - B_g)_{i+1/2}^{n+1}; \quad (5)$$

$$i = 0, 1, \dots, I-1; \quad m = 0, 1, \dots, M; \quad g = 1, 2, \dots, G.$$

Здесь $\tau^n = t^{n+1} - t^n$; $\Delta V_i = \frac{1}{\eta+1} (r_{i+1}^{\eta+1} - r_i^{\eta+1})$; $\varsigma_i = r_{i+1}^\eta - r_i^\eta$; ω_m — веса квадратурных формул. В плоском случае $\eta = 0$ и величины $J_{g,m+1/2,i+1/2}$ не используются. Коэффициенты $a_{m+1/2}$ определяются из рекуррентных соотношений

$$a_{m+1/2} = a_{m-1/2} - \omega_m \mu_m; \quad a_{-1/2} = a_{1/2} = a_{M+1/2} = 0.$$

Монотонная St-схема первого порядка аппроксимации для системы (4) имеет соотношения связи вида (в дальнейшем там, где это не вызывает недоразумения, разностные индексы опускаются)

$$\begin{aligned} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1}, & \mu_m > 0; \\ J_i^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1}, & \mu_m < 0; \\ J_{i+1/2, m+1/2}^{n+1} &= J_{i+1/2, m}^{n+1}. \end{aligned}$$

Для повышения порядка аппроксимации проведем реконструкцию решения на сеточных интервалах. Представим интенсивность на интервале $r_i \leq r \leq r_{i+1}$ в кусочно-линейной форме:

$$J(r, \mu, t) = J_{i+1/2} + \frac{\partial J_{i+1/2}}{\partial r} (r - r_{i+1/2}), \quad r_{i+1/2} = 0,5 (r_i + r_{i+1}).$$

Отсюда имеем следующие реконструированные соотношения связи:

$$\begin{aligned} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} + \frac{\partial J_{i+1/2}^{n+1}}{\partial r} \frac{h}{2}, & \mu > 0; \\ J_i^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} - \frac{\partial J_{i+1/2}^{n+1}}{\partial r} \frac{h}{2}, & \mu < 0. \end{aligned}$$

В соответствии с TVD-методологией в качестве $\frac{\partial J_{i+1/2}}{\partial r}$ берутся некоторые ограничители, которые обычно используют односторонние производные. Если ввести традиционную для TVD-схем функцию-ограничитель

$$\phi_{i+1/2} = \frac{L(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2})}{\Delta J_{i-1/2}},$$

то можно записать

$$\begin{aligned} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5 \phi_{i+1/2}^{n+1} \Delta J_{i-1/2}^{n+1}, & \mu > 0; \\ J_i^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} - 0,5 \phi_{i+1/2}^{n+1} \Delta J_{i-1/2}^{n+1}, & \mu < 0, \end{aligned}$$

где $\Delta J_{i-1/2} = J_{i+1/2} - J_{i-1/2}$.

Система полученных уравнений представляет собой схему с четырехточечным шаблоном на $(n+1)$ -м слое. Так как функция-ограничитель ϕ имеет дробно-линейный характер, то можно ожидать, что она слабо меняется за один шаг τ . Таким образом, можно взять ϕ с n -го шага, внося при этом погрешность $O(\tau)$. Если в этой системе уравнений взять с n -го шага не только функцию-ограничитель ϕ , но и саму разность $\Delta J_{i-1/2}^n$, то можно записать

$$\begin{aligned} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5 \phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, & \mu > 0; \\ J_i^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} - 0,5 \phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, & \mu < 0. \end{aligned}$$

В этом случае получаем возможность применить алгоритм бегущего счета.

Систему (4), (5) будем решать итерационно. Введем итерационный индекс σ и в качестве соотношений связи будем брать:

$$\begin{aligned} - \text{ при } \mu_m > 0 & \quad J_{i+1}^{\sigma+1} = J_{i+1/2}^{\sigma+1} + d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, \quad d_{i+1/2}^n = \frac{L(\Delta J_{i-1/2}^n, \Delta J_{i+1/2}^n)}{2\Delta J_{i-1/2}^n}; \\ - \text{ при } \mu_m < 0 & \quad J_i^{\sigma+1} = J_{i+1/2}^{\sigma+1} - d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n; \\ & \quad J_{i+1/2, m+1/2}^{\sigma+1} = J_{i+1/2, m}^{\sigma+1} + (d_0)_m^n \Delta J_{m-1}^n, \quad (d_0)_m^n = \frac{L(\Delta J_{m-1}^n, \Delta J_m^n)}{2\Delta J_{m-1}^n}. \end{aligned}$$

При $d = d_0 = 0$ получаем соотношения St-схемы.

Подставляя эти соотношения связи в основное уравнение (4), получаем:

– при $\mu_m > 0$

$$\begin{aligned}
 i &= 0, 1, \dots, I-1; & m &= 0, 5M+1, \dots, M; & g &= 1, 2, \dots, G; \\
 \left(q_g + \mu_m \frac{r_{i+1}^\eta}{\Delta V_{i+1/2}} + \frac{\eta}{2} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} \frac{a_{m+1/2}}{w_m} \right) J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} &= \\
 &= \frac{1}{c\tau} J_{i+1/2, m, g}^n + Q_g^\sigma + \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_{i+1}^\eta J_{i, m, g}^{\sigma+1} + \frac{\eta}{2w_m} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m-1/2} J_{i+1/2, m-1/2, g}^{\sigma+1} - \\
 &- \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_{i+1}^\eta d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2, m, g}^n - \frac{\eta}{2w_m} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m+1/2} (d_0)_m^n \Delta J_{i+1/2, m-1, g}^n; \\
 J_{i+1, m, g}^{\sigma+1} &= J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} + d_{i+1/2, m, g}^n \Delta J_{i-1/2, m, g}^n; \\
 J_{i+1/2, m+1/2, g}^{\sigma+1} &= J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} + (d_0)_{i+1/2, m, g}^n \Delta J_{i+1/2, m-1, g}^n;
 \end{aligned}$$

– при $\mu_m < 0$

$$\begin{aligned}
 i &= I-1, \dots, 0; & m &= 0, 1, \dots, 0, 5M; & g &= 1, 2, \dots, G; \\
 \left(q_g - \mu_m \frac{r_i^\eta}{\Delta V_{i+1/2}} + \frac{\eta}{2} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} \frac{a_{m+1/2}}{w_m} \right) J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} &= \\
 &= \frac{1}{c\tau} J_{i+1/2, m, g}^n + Q_g^\sigma - \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_{i+1}^\eta J_{i+1, m, g}^{\sigma+1} + \frac{\eta}{2w_m} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m-1/2} J_{i+1/2, m-1/2, g}^{\sigma+1} - \\
 &- \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_i^\eta d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2, m, g}^n - \frac{\eta}{2w_m} \frac{S_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m+1/2} (d_0)_m^n \Delta J_{i+1/2, m-1, g}^n; \\
 J_{i, m, g}^{\sigma+1} &= J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} - d_{i+1/2, m, g}^n \Delta J_{i-1/2, m, g}^n; \\
 J_{i+1/2, m+1/2, g}^{\sigma+1} &= J_{i+1/2, m, g}^{\sigma+1} + (d_0)_{i+1/2, m, g}^n \Delta J_{i+1/2, m-1, g}^n,
 \end{aligned}$$

где $q_g = \frac{1}{c\tau} + \alpha_g$; $d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n = 0,5L \left(\Delta J_{i-1/2}^n, \Delta J_{i+1/2}^n \right) = 0,5L \left(J_{i+1/2}^n - J_{i-1/2}^n, J_{i+3/2}^n - J_{i+1/2}^n \right)$.

Синтетический метод ускорения итераций (метод PSAC)

Для ускорения сходимости итераций предлагается применять синтетический метод PSAC. В этом методе для ускорения итераций по кинетическому уравнению используется P_1 -приближение. Для согласования схемы P_1 -уравнений со схемой решения кинетического уравнения применяем многошаговую процедуру Ларсена, которая позволяет поэтапно согласовать систему P_1 -уравнений, граничные условия и соотношения связи. Многошаговая процедура Ларсена включает в себя:

- 1) P_1 -проектирование разностных уравнений для уравнения переноса;
- 2) P_1 -проектирование соотношений связи для уравнения переноса;
- 3) P_1 -проектирование граничных условий;
- 4) переход к P_1 -уравнениям относительно поправок;
- 5) преобразование полученных уравнений к виду с центральными разностями и их решение.

В синтетическом методе на каждой внешней итерации (σ — итерационный индекс) совместно с уравнением энергии сначала решается кинетическое уравнение с внутренними (ньютоновскими) итерациями по температуре (этап 1), а затем поправочная система P_1 -уравнений с ньютоновскими итерациями по температуре (этап 2). При описании итерационных циклов там, где нет необходимости, опустим индексы i , m и g .

Этап 1. Решаются кинетическое уравнение и уравнение энергии:

$$\frac{J^{\sigma+1/2} - J^n}{c\tau} + \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} J \right)^{\sigma+1/2} + \alpha^\sigma J^{\sigma+1/2} = Q^\sigma; \quad (6)$$

$$\frac{E^{\sigma+1/2} - E^n}{\tau} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} \left(U_g^{\sigma+1/2} - B_g^{\sigma+1/2} \right). \quad (7)$$

Просуммируем уравнение (6) по μ с весами 1 и μ :

$$\frac{U^{\sigma+1/2} - U^n}{c\tau} + \operatorname{div}_h \left(r^\eta S^{\sigma+1/2} \right) + \alpha^\sigma U^{\sigma+1/2} = 2Q^\sigma; \quad (8)$$

$$\frac{S^{\sigma+1/2} - S^n}{c\tau} + DU^{\sigma+1/2} + \alpha^\sigma S^{\sigma+1/2} = 0, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_h \left(r^\eta S^{\sigma+1/2} \right) &= \sum_{m=1}^M \omega_m \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} J \right)^{\sigma+1/2} = \frac{1}{\Delta V_{i+1/2}} \left(r_{i+1}^\eta S_{g,i+1}^{\sigma+1/2} - r_i^\eta S_{g,i}^{\sigma+1/2} \right), \\ S_{g,i}^{\sigma+1/2} &= \sum_{m=1}^M \mu_m \omega_m J_{g,m,i}^{\sigma+1/2}; \\ DU^{\sigma+1/2} &= \sum_{m=1}^M \mu_m \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} J \right)^{\sigma+1/2} \omega_m = \frac{1}{\Delta V_{i+1/2}} \sum_{m=1}^M \mu_m^2 \omega_m \left(r_{i+1}^\eta J_{g,m,i+1}^{\sigma+1/2} - r_i^\eta J_{g,m,i}^{\sigma+1/2} \right) + \\ &+ \frac{\eta}{2} \frac{S_i}{\Delta V_{i+1/2}} \sum_{m=1}^M \mu_m \left(a_{m+1/2} J_{g,m+1/2,i+1/2}^{\sigma+1/2} - a_{m-1/2} J_{g,m-1/2,i+1/2}^{\sigma+1/2} \right). \end{aligned}$$

Уравнение (9) приведем к виду

$$\frac{S^{\sigma+1/2} - S^n}{c\tau} + \frac{1}{3} \operatorname{div}_h U^{\sigma+1/2} + \alpha^\sigma S^{\sigma+1/2} = Q_1^{\sigma+1/2}, \quad (10)$$

где $\operatorname{div}_h U = \frac{U_{i+1} - U_i}{h_{i+1/2}}$; $h_{i+1/2} = r_{i+1} - r_i$; $Q_1^{\sigma+1/2} = \frac{1}{3} \operatorname{div}_h U^{\sigma+1/2} - DU^{\sigma+1/2}$ — корректирующая поправка на кинетичность.

Перейдем к рассмотрению уравнения энергии. Для его решения на первом этапе линеаризуем по температуре внутреннюю энергию и функцию Планка:

$$\left(E^{\sigma+1/2} \right)^{\nu+1} = E^\nu(T) + E_T^\nu(T^{\nu+1} - T^\nu); \quad \left(B^{\sigma+1/2} \right)_g^{\nu+1} = B_g^\nu(T) + B_{gT}^\nu(T^{\nu+1} - T^\nu),$$

где $E_T^\nu = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)^\nu$; $B_{gT}^\nu = \left(\frac{\partial B_g}{\partial T} \right)^\nu$. Подставляя значения $U_g^{\sigma+1/2}$, полученные на этом этапе, в линеаризованное по температуре уравнение энергии, получаем выражение для нахождения температуры:

$$T_{i+1/2}^{\nu+1} = T_{i+1/2}^\nu + \left[\frac{E^n - E^\nu + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \left(U_g^{\sigma+1/2} - B_g^\nu \right)}{E_T^\nu + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^\nu} \right]_{i+1/2}.$$

При сходимости итераций по линеаризации $E(T)$ и $B_g(T)$ получаем температуру $T^{\nu+1}$, по которой вычисляем $B_g^{\nu+1}$ во всех точках разностной и энергетической сеток. Итерации ν заканчиваются

при выполнении условий $\left| T_{i+1/2}^{\nu+1} - T_{i+1/2}^{\nu} \right| \leq \varepsilon_{\text{сх}}^{\nu} \left(\varepsilon_1 + T_{i+1/2}^{\nu} \right)$. Точность вычисления температуры определяется константами сходимости $\varepsilon_{\text{сх}}^{\nu}$, ε_1 . При сходимости итераций переходим к следующему этапу.

Этап 2. Уравнение переноса в P_1 -приближении совместно с уравнением энергии для PSAC-метода будем брать в следующей форме:

$$\frac{U^{\sigma+1} - U^n}{c\tau} + \text{div}_h (r^\eta S^{\sigma+1}) + \alpha^\sigma U^{\sigma+1} = 2Q^{\sigma+1}; \quad (11)$$

$$\frac{S^{\sigma+1} - S^n}{c\tau} + \frac{1}{3} \text{div}_h U^{\sigma+1} + \alpha^\sigma S^{\sigma+1} = Q_1^{\sigma+1/2}; \quad (12)$$

$$\frac{E^{\sigma+1} - E^n}{\tau} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} (U_g^{\sigma+1} - B_g^{\sigma+1}). \quad (13)$$

Вычитая из системы (11)–(13) уравнения (8), (10), (7), получаем поправочную форму для P_1 -приближения:

$$\frac{\delta U^{\sigma+1}}{c\tau} + \text{div}_h (r^\eta \delta S^{\sigma+1}) + \alpha^\sigma \delta U^{\sigma+1} = \alpha_c^\sigma (B^{\sigma+1} - B^\sigma) + \alpha_s^\sigma (U^{\sigma+1} - U^\sigma); \quad (14)$$

$$\frac{\delta S^{\sigma+1}}{c\tau} + \frac{1}{3} \text{div}_h (\delta U)^{\sigma+1} + \alpha^\sigma \delta S^{\sigma+1} = 0; \quad (15)$$

$$\frac{\delta E^{\sigma+1}}{\tau} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} (\delta U_g^{\sigma+1} - \delta B_g^{\sigma+1}), \quad (16)$$

где $\delta U^{\sigma+1} = U^{\sigma+1} - U^{\sigma+1/2}$; $\delta S^{\sigma+1} = S^{\sigma+1} - S^{\sigma+1/2}$; $\delta E^{\sigma+1} = E^{\sigma+1} - E^{\sigma+1/2}$; $\delta B^{\sigma+1} = B^{\sigma+1} - B^{\sigma+1/2}$.

Правую часть уравнения (14) приведем к виду

$$\begin{aligned} \alpha_{cg}^\sigma (B_g^{\sigma+1} - B_g^\sigma) + \alpha_{sg}^\sigma (U_g^{\sigma+1} - U_g^\sigma) &= \alpha_{cg}^\sigma (B_g^{\sigma+1} - B_g^{\sigma+1/2}) + \alpha_{sg}^\sigma (U_g^{\sigma+1} - U_g^{\sigma+1/2}) + \\ &+ \delta Q_g^{\sigma+1/2} = \alpha_{cg}^\sigma \delta B_g^{\sigma+1} + \alpha_{sg}^\sigma \delta U_g^{\sigma+1} + \delta Q_g^{\sigma+1/2}, \end{aligned}$$

где $\delta Q_g^{\sigma+1/2} = \alpha_{cg}^\sigma (B_g^{\sigma+1/2} - B_g^\sigma) + \alpha_{sg}^\sigma (U_g^{\sigma+1/2} - U_g^\sigma)$.

Для решения уравнения энергии на втором этапе линеаризуем по температуре поправки внутренней энергии и функции Планка с индексом $\sigma + 1$:

$$\begin{aligned} \delta E^{\sigma+1} &= E^{\sigma+1} (T^{\sigma+1}) - E^{\sigma+1/2} (T^{\sigma+1/2}) = E^{\sigma+1} (T^{k+1}) - E^{\sigma+1/2} = E^{k+1} - E^{\sigma+1/2} = \\ &= E^k + E_T^k (T^{k+1} - T^k) - E^{\sigma+1/2} = E^k + E_T^k \delta T^{k+1} - E^{\sigma+1/2}; \\ \delta B_g^{\sigma+1} &= B_g^k + B_{gT}^k \delta T^{k+1} - B_g^{\sigma+1/2}, \end{aligned}$$

где k — индекс ньютоновских итераций на втором этапе; $T^{k=0} = T^{\sigma+1/2}$.

Подставляя эти выражения в уравнение энергии (16), получаем выражение для нахождения температуры:

$$\delta T_{i+1/2}^{k+1} = \left[\frac{E^{\sigma+1/2} - E^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma (\delta U_g^{k+1} - B_g^k + B_g^{\sigma+1/2})}{E_T^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k} \right]_{i+1/2}. \quad (17)$$

Подставляя значения (17) в линеаризованную по температуре правую часть уравнения (14), получаем выражение в правой части уравнения (14) относительно δU_g^{k+1} с заменой индекса $\sigma + 1$ на индекс $k + 1$:

$$\begin{aligned} \alpha_{cg}^\sigma \delta B_g^{\sigma+1} + \alpha_{sg}^\sigma \delta U_g^{\sigma+1} + \delta Q_g^{\sigma+1/2} &= \alpha_{cg}^\sigma \delta B_g^{k+1} + \alpha_{sg}^\sigma \delta U_g^{k+1} + \delta Q_g^{\sigma+1/2} = \\ &= \alpha_{cg}^\sigma \left(B_g^k - B_g^{\sigma+1/2} \right) + \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k \left[\frac{E^{\sigma+1/2} - E^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \left(\delta U_g^{k+1} - B_g^k + B_g^{\sigma+1/2} \right)}{E_T^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k} \right]_{i+1/2} + \\ &+ \alpha_{sg}^\sigma \delta U_g^{k+1} + \delta Q_g^{\sigma+1/2} = \alpha_{sg}^\sigma \delta U_g^{k+1} + \tau \lambda^k \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \delta U_g^{k+1} + \delta F_g^k + \delta Q_g^{\sigma+1/2}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \delta F_g^k &= \alpha_{cg}^\sigma \left\{ \left(B_g^k - B_g^{\sigma+1/2} \right) + \lambda B_{gT}^k \left[E^{\sigma+1/2} - E^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \left(B_g^{\sigma+1/2} - B_g^k \right) \right] \right\}; \\ \lambda_{i+1/2} &= \left(E_T + \tau \sum_{g'=1}^G \alpha_{cg'} B_{g'T} \right)_{i+1/2}^{-1}. \end{aligned}$$

Для решения системы (14), (15) введем дополнительные соотношения, связывающие значения поправок в центрах и узлах интервалов разностной сетки:

$$\delta U_i = \frac{\delta U_{i+1/2} + \delta U_{i-1/2}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \left(\delta S_{i+1/2} - \delta S_{i-1/2} \right); \quad (18)$$

$$\delta S_i = \frac{\delta S_{i+1/2} + \delta S_{i-1/2}}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\delta U_{i+1/2} - \delta U_{i-1/2} \right). \quad (19)$$

Подставляя соотношения связи (18), (19) в систему (14), (15), получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} a_i^0 \delta U_{i-1/2} + b_i^0 \delta U_{i+1/2} + c_i^0 \delta U_{i+3/2} + d_i^0 \delta S_{i-1/2} + e_i^0 \delta S_{i+1/2} + g_i^0 \delta S_{i+3/2} &= f_i^0; \\ a_i^1 \delta U_{i-1/2} + b_i^1 \delta U_{i+1/2} + c_i^1 \delta U_{i+3/2} + d_i^1 \delta S_{i-1/2} + e_i^1 \delta S_{i+1/2} + g_i^1 \delta S_{i+3/2} &= f_i^1, \end{aligned} \quad (20)$$

где $a_i^0 = -\frac{r_i^\eta}{\sqrt{3}}$; $b_i^0 = 2V_{i+1/2} (q_1)_{i+1/2}^\sigma + \frac{r_i^\eta + r_{i+1}^\eta}{\sqrt{3}}$; $c_i^0 = -\frac{r_{i+1}^\eta}{\sqrt{3}}$; $d_i^0 = -r_i^\eta$; $e_i^0 = r_{i+1}^\eta - r_i^\eta$; $g_i^0 = r_{i+1}^\eta$;
 $a_i^1 = -1$; $b_i^1 = 0$; $c_i^1 = 1$; $d_i^1 = -\sqrt{3}$; $e_i^1 = 6hq_{i+1/2}^\sigma + 2\sqrt{3}$; $g_i^1 = -\sqrt{3}$; $q = \frac{1}{c\tau} + \alpha$; $q_1 = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c$;

$$f_i^0 = 2V_{i+1/2} \left(\frac{\tau \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \delta U_g^{k+1}}{E_T^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k} + \delta F_g^k + \delta Q_g^{\sigma+1/2} \right)_{i+1/2}; \quad f_i^1 = 0; \quad i = 0, \dots, I-1.$$

Если выражение $\left(\sum_{g'=1}^G \alpha_{cg'} \delta U_{g'}^{k+1} \right)_{i+1/2}$ в системе (20) перенести в левую часть уравнения, объединив диагональные члены при $g' = g$ с коэффициентами b_i^0 , то система (20) примет вид

$$\left(a_i^0 \delta U_{i-1/2} + \bar{b}_i^0 \delta U_{i+1/2} + c_i^0 \delta U_{i+3/2} + d_i^0 \delta S_{i-1/2} + e_i^0 \delta S_{i+1/2} + g_i^0 \delta S_{i+3/2} \right)_g^{k+1} -$$

$$-2\tau \left[V\lambda^k \alpha_{cg} B_{gT}^k \sum_{g'=1}^G (\alpha_{cg'} - \alpha_{cg}) \delta U_{g'}^{k+1} \right]_{i+1/2} = (f_i^{01})_g^{\sigma+1/2}; \quad (21)$$

$$(a_i^1 \delta U_{i-1/2} + b_i^1 \delta U_{i+1/2} + c_i^1 \delta U_{i+3/2} + d_i^1 \delta S_{i-1/2} + e_i^1 \delta S_{i+1/2} + g_i^1 \delta S_{i+3/2})_g^{k+1} = (f_i^1)_g^{\sigma+1/2},$$

где $(f_i^{01})_g^{\sigma+1/2} = 2V_{i+1/2} (\delta F_g^k + \delta Q_g^{\sigma+1/2})_{i+1/2}$; $(f_i^1)_g^{\sigma+1/2} = 0$; $\lambda_{i+1/2} = \left(E_T + \tau \sum_{g'=1}^G \alpha_{cg'} B_{g'T} \right)_{i+1/2}^{-1}$;

$$\bar{b}_i^0 = b_i^0 - 2\tau (V\lambda^k B_{gT}^k \alpha_{cg}^2)_{i+1/2}; \quad i = 0, \dots, I-1; \quad g = 1, \dots, G.$$

Разностная система (21) решается с граничными условиями $0,5\delta U_g \pm \delta S_g = 0$.

Систему уравнений (21) решаем сразу для всех групп G прямым обращением всей матрицы коэффициентов разностной системы. После обращения матрицы вычисляем температуру по формуле $T_{i+1/2}^{k+1} = T_{i+1/2}^k + \delta T_{i+1/2}^{k+1}$.

При сходимости итераций второго этапа переходим на новую внешнюю итерацию σ . При сходимости итераций σ переходим на следующий шаг по времени.

Численные расчеты

Для исследования новой схемы рассмотрим аналог задачи Флека [10] в сферически-симметричной геометрии. На внутреннюю поверхность сферического слоя толщиной 4 см падает планковский поток излучения, соответствующий температуре вещества $T = 1$ кэВ. Слой состоит из трех физических областей. Радиус внутренней сферы 100 см, внешней — 104 см. Спектральные граничные условия на внешней границе имеют вид $\varphi_R = 0$. На внутренней границе $\varphi_L = 0,5B$ ($T = 1$ кэВ). Коэффициент поглощения вычислялся по формуле $\alpha_c = \frac{\chi (1 - e^{-\epsilon/T})}{\epsilon^3}$, $\chi = 27$ в области 1 ($102 \text{ см} < r < 102,4 \text{ см}$) и в области 3 ($102,4 \text{ см} < r < 104 \text{ см}$), $\chi = 10000$ в области 2 ($102 \text{ см} < r < 102,4 \text{ см}$). Коэффициент рассеяния $\alpha_s = 0$. Начальная температура в областях $T = 0,00001$ кэВ, уравнение состояния вещества $E = 0,81T$.

По энергетической переменной расчеты выполнены на сетке $\epsilon_g = 0; 0,3; 0,6; 0,8; 1,2; 1,5; 1,8; 2,4; 2,7; 3; 4; 5; 7; 9; 11; 15$ кэВ (число групп 15). По пространству использовалась неравномерная сетка (24, 14, 18 интервалов в областях 1, 2, 3 соответственно) со следующими узлами (в см): $r_1 = 100; 100,004; 100,04; r_4 = 100,1; \dots; r_{22} = 101,9$ (18 интервалов равномерно по r , $\Delta r = 0,1$); $r_{23} = 101,987; 101,999; 102; 102,001; 102,004; 102,013; r_{29} = 102,04; \dots; r_{37} = 102,36$ (8 интервалов равномерно по r , $\Delta r = 0,04$); $r_{38} = 102,396; 102,4; 102,404; 102,44; r_{42} = 102,5; \dots; r_{57} = 104$ (15 интервалов равномерно по r , $\Delta r = 0,1$). В пространстве направлений использовалась равномерная сетка $\Delta\mu = 0,2$.

Расчеты проводились по TVD- и St-схемам. В качестве ограничителей для схемы TVD взяты ограничители Чакравати—Ошера [11] и min mod, который является его частным случаем.

Для ограничителя Чакравати—Ошера имеем

$$L(a, b) = 0,5(1 - \delta) \min \text{mod}(a, \beta b) + 0,5(1 + \delta) \min \text{mod}(\beta a, b),$$

или в виде функции-ограничителя

$$\phi_{i+1/2} = 0,5(1 - \delta) \min \text{mod}\left(1, \beta \hat{\theta}_{i+1/2}\right) + 0,5(1 + \delta) \min \text{mod}\left(\beta, \hat{\theta}_{i+1/2}\right),$$

где $\phi_{i+1/2} = \frac{L(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2})}{\Delta J_{i-1/2}} = L\left(1, \hat{\theta}_{i+1/2}\right)$, $\hat{\theta}_{i+1/2} = \frac{\Delta J_{i+1/2}}{\Delta J_{i-1/2}}$; a — значение разности на входе в ячейку; b — значение разности на выходе из ячейки; β — параметр сжатия. Параметр δ определяет тип схемы и порядок аппроксимации. Для ограничителя Чакравати—Ошера полагалось $\delta = 1/3$, $\beta = 3$.

Для ограничителя $\min \text{mod}$ ($\delta = 0$, $\beta = 1$) имеем $\phi_{i+1/2}^n = \frac{1 + \text{sign}(\hat{\theta}_{i+1/2}^n)}{2} \min(1, |\hat{\theta}_{i+1/2}^n|)$.

На рис. 1 приведены профили температуры вещества на три момента времени. Выбраны характерные моменты движения тепловой волны: $ct = 3$ см — прогрев области 1, вхождение и начало распространения излучения в плотном веществе; $ct = 7,5$ см — прогрев области 2; $ct = 180$ см — прогрев области 3, выход на стационарный режим (соответственно 10, 25 и 600-й шаги по времени при $\tau = 10^{-11}$ с, $\varepsilon_{\text{сх}} = 0,0001$). Решение сравнивается с эталонным расчетом, проведенным на 4000 интервалах разностной сетки. Для наглядности на рис. 1 снизу изображен фрагмент указанных про-

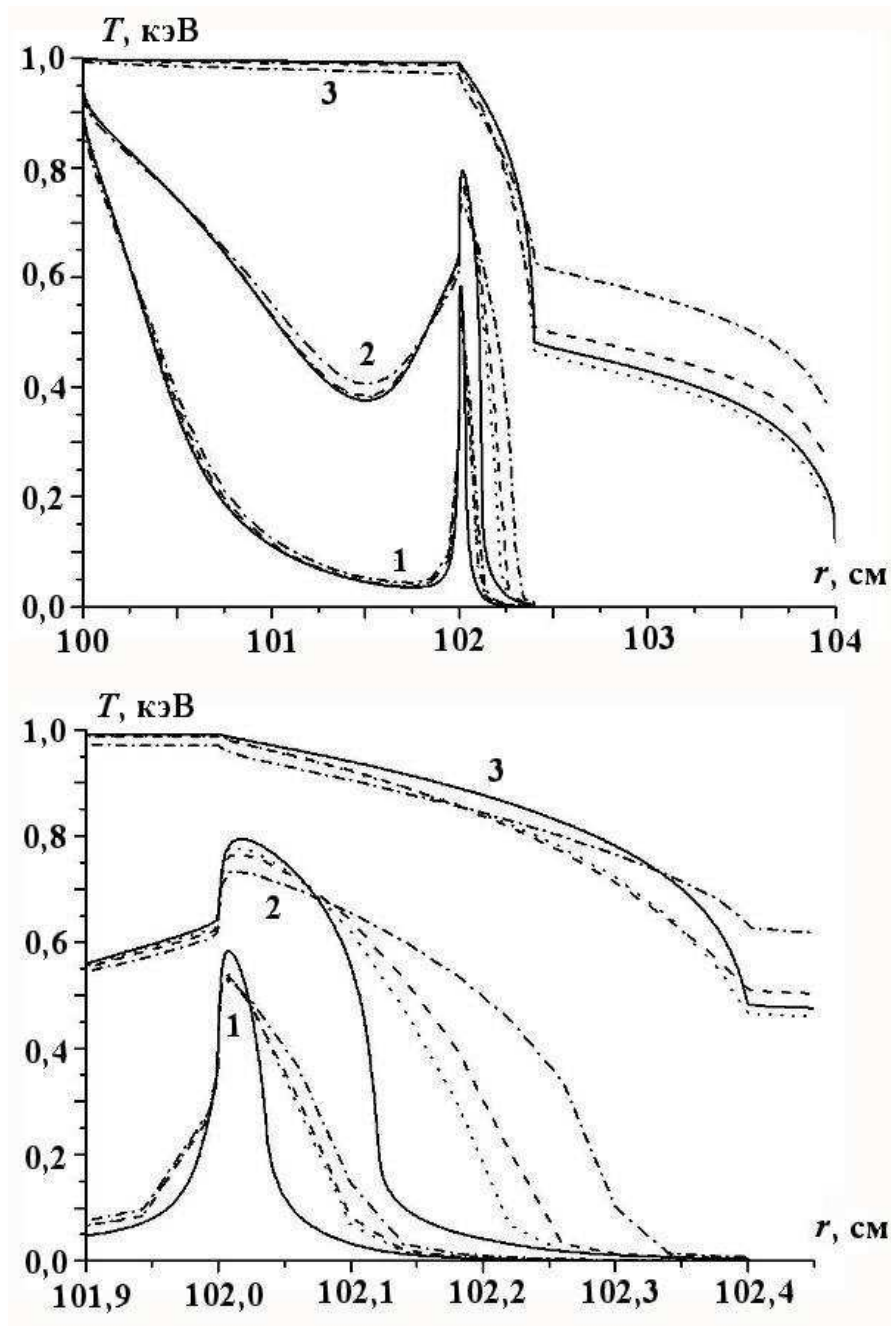


Рис. 1. Профили температуры вещества на 10 (1), 25 (2) и 600-м шаге (3): — — эталонное решение; ---- TVD-схема с ограничителем $\min \text{mod}$; ··· — TVD-схема с ограничителем Чакравати—Ошера; -·-· — St-схема

филей в увеличенном масштабе. Видно, что St-схема сильно размывает профиль, TVD-схема с ограничителем Чакравати—Ошера дает наилучший результат, TVD-схема с ограничителем min mod дает промежуточный результат.

На рис. 2 приведены профили функций-ограничителей Чакравати—Ошера и min mod на 10-м шаге для $\mu = 0,9$, $g = 13$. Видно, что на всем интервале решения задачи на данный момент времени функция-ограничитель min mod обращается в нуль только в граничных точках (функция-ограничитель Чакравати—Ошера — в четырех точках). В этих точках "работает" схема первого порядка, в остальных — схема повышенного порядка. В граничных точках для вычисления ограничителей в односторонних производных значения вне границ системы берутся из граничных интервалов, т. е. полагается $J_{g,-1/2} = J_{g,1/2}$, $J_{g,I+1/2} = J_{g,I-1/2}$, поэтому работает всегда схема первого порядка.

При выходе на стационарный режим численное решение в плоской геометрии можно сравнить с аналитическими решениями по формулам, полученным из разложения резольвенты оператора переноса в ряд Неймана:

$$T \approx \begin{cases} \sqrt[3]{1 - 0,00659 (r - r_0)} & \text{в области 1;} \\ \sqrt[3]{5,8683 - 2,44 (r - r_0)} & \text{в области 2;} \\ \sqrt[3]{0,00659 (4 + r_0 - r)} & \text{в области 3.} \end{cases}$$

На рис. 3 приведены профили температуры вещества, рассчитанные по разным схемам и аналитическим формулам в плоской геометрии. Видно, что температура вещества, полученная из численных расчетов по TVD-схеме с ограничителем Чакравати—Ошера, лучше всех согласуется с аналитической формулой.

В табл. 1—3 приведены результаты исследований зависимости метода PSAC от шагов по времени, пространству и константы сходимости внешних итераций.

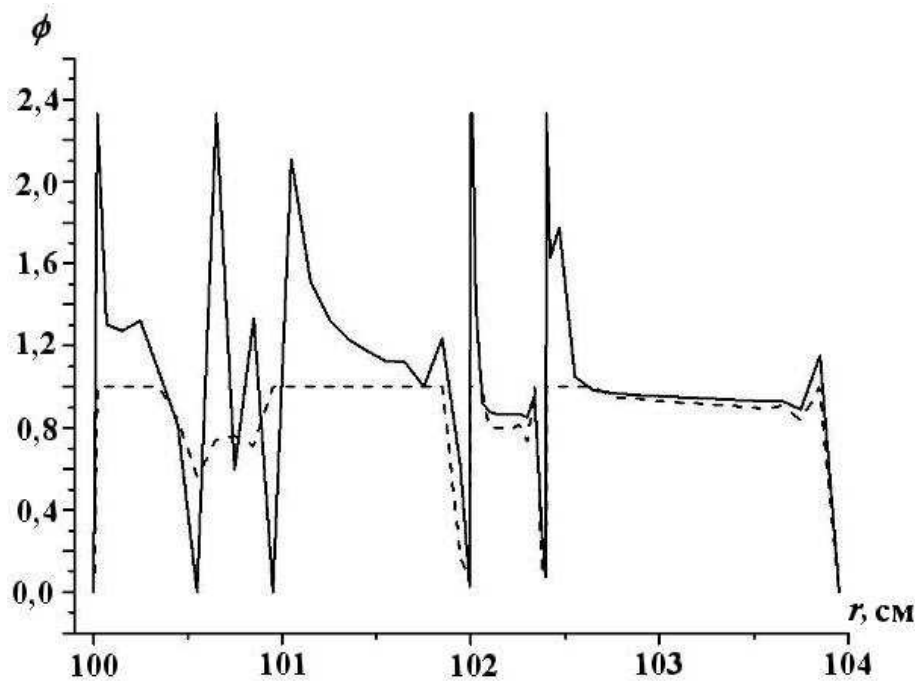


Рис. 2. Профили функций-ограничителей для $\mu = 0,9$, $g = 13$: — — ограничитель Чакравати—Ошера; --- — ограничитель min mod

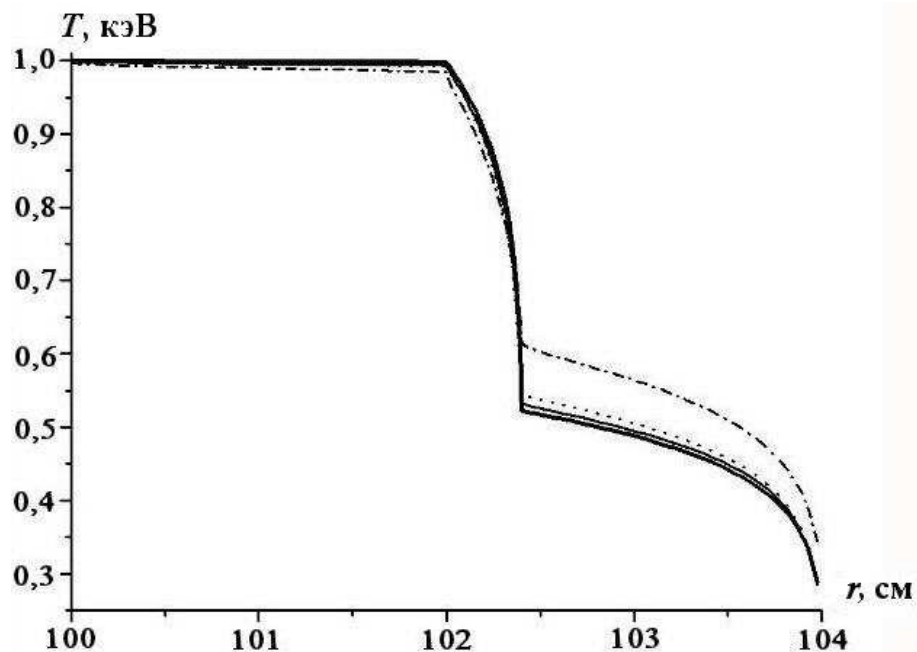


Рис. 3. Профили температуры вещества: ---- TVD-схема с ограничителем min mod; — TVD-схема с ограничителем Чакравати—Ошера; - · - · - St-схема; — — точное решение

Таблица 1

Среднее число внешних итераций за 20 временных шагов при расчете на неравномерной сетке

Схема	$\varepsilon_{cx} = 0,0001$	$\varepsilon_{cx} = 0,00001$	$\varepsilon_{cx} = 0,000001$
St	3,45	4,25	5,20
TVD с ограничителем min mod	3,45	4,25	5,15
TVD с ограничителем Чакравати—Ошера	3,50	4,30	5,20

Таблица 2

Среднее число внешних итераций на разных временных шагах при расчете на неравномерной сетке, $\varepsilon_{cx} = 0,0001$

Схема	$\tau = 10^{-11}$ с	$\tau = 10^{-12}$ с	$\tau = 10^{-13}$ с
St	3,3	2,5	2
TVD с ограничителем min mod	3,3	2,5	2
TVD с ограничителем Чакравати—Ошера	3,3	2,5	2

Таблица 3

Среднее число внешних итераций за 20 временных шагов при расчете на равномерных сетках с шагом h

Метод	$h = 0,08$ ($I = 50$)	$h = 0,04$ ($I = 100$)	$h = 0,027$ ($I = 150$)
PSAC	2,9	3,2	3,3
ВДЭ	4,9	7	8,9
Простая итерация	152	216	258

В табл. 1 приведено среднее число внешних итераций за 20 первых временных шагов с различными константами сходимости $\varepsilon_{\text{сх}}$ при $\tau = 10^{-11}$ с на неравномерной сетке. Число внутренних итераций на обоих этапах составляет приблизительно 2–3 на одной внешней итерации. Видно, что все схемы сходятся быстро и примерно с одинаковой скоростью. Скорость сходимости слабо зависит от константы. При уменьшении константы сходимости на порядок среднее число итераций увеличивается на 1.

В табл. 2 приведено среднее число внешних итераций на различных временных шагах, с которыми велся счет на неравномерной сетке до $t = 10^{-10}$ с, при константе сходимости $\varepsilon_{\text{сх}} = 0,0001$. Видно, что зависимость метода ускорения от временного шага слабая.

В табл. 3 приведено среднее число внешних итераций за 20 первых временных шагов при счете на равномерных сетках с числом ячеек (I) 50, 100, 150 при $\tau = 10^{-11}$ с, $\varepsilon_{\text{сх}} = 0,0001$ для TVD-схемы с ограничителем Чакравати—Ошера. Для сравнения в таблице приведены результаты с использованием метода ВДЭ [3] и метода простой итерации.

Видно, что при увеличении числа точек в 3 раза число внешних итераций в методе PSAC возрастает в 1,2 раза, в методе ВДЭ — в 1,8 раза, в методе простой итерации — в 1,7 раза. Это означает, что зависимость метода PSAC от размера шага более слабая. В то же время зависимость времени счета от числа ячеек в методе PSAC более сильная, что связано с квадратичной зависимостью времени обращения матрицы от числа точек. По-видимому, без распараллеливания по числу точек этот метод может стать экономически неэффективным.

В табл. 4 приведен порядок сходимости схем на трех сгущающихся сетках (40 интервалов и 20 шагов с $\tau = 2 \cdot 10^{-11}$ с, 80 интервалов и 40 шагов с $\tau = 10^{-11}$ с, 160 интервалов и 80 шагов с $\tau = 5 \cdot 10^{-12}$ с) на момент времени $t = 4 \cdot 10^{-10}$ с, получаемый в L_1 -норме по формуле

$$\delta = \log_2 \frac{\|T_h - T_{h/2}\|}{\|T_{h/2} - T_{h/4}\|},$$

где $\|T_h - T_{h/2}\|_{L_1} = \sum_{i=1}^M |T_{i+1/2} - T(r_{i+1/2})| (r_{i+1} - r_i)$, $T_{i+1/2}$ — температура на сетке с шагом h , $T(r_{i+1/2}) = \frac{T(r_{k+1/2}) + T(r_{k-1/2})}{2}$ — усредненная температура из двух соседних ячеек на сетке с шагом $h/2$.

Порядок сходимости в табл. 4 приведен для двух вариантов задачи Флека. В варианте 1 рассматривается задача, описанная выше. В варианте 2 рассматривается та же задача с одинаковым коэффициентом поглощения $\alpha_c = \frac{27(1 - e^{-\varepsilon/T})}{\varepsilon^3}$ во всех областях. Видно, что в обеих задачах сходимость TVD-схем лучше, чем сходимость St-схемы.

Таблица 4

Порядок сходимости схем при расчете на сгущающихся сетках двух вариантов задачи Флека

Схема	Вариант 1	Вариант 2
St	0,61	0,95
TVD с ограничителем min mod	0,94	1,37
TVD с ограничителем Чакравати—Ошера	1,30	1,26

В заключение следует отметить, что в построенной TVD-схеме удалось сохранить важное достоинство DS_n -метода, когда для решения разностных уравнений используется экономичный метод бегущего счета. Новая схема также сочетает в себе консервативность, улучшенную монотонность за счет применения TVD-реконструкции и повышенный порядок аппроксимации по пространству.

Список литературы

1. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Мат. сборник. 1959. Вып. 3, № 47. С. 271—306.
2. Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion-synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete ordinates equations // Nucl. Sci. and Eng. 1982. Vol. 82. P. 47—70.
3. Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 37—48.
4. Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ -геометрии // Там же. 2010. Вып. 2. С. 30—39.
5. Троциёв В. Е. Решение кинетического уравнения и уравнения квазидиффузии по согласованным разностным схемам // Численные методы решения задач математической физики. М.: Наука, 1966. С. 177—185.
6. McCoy D. R., Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete-ordinates equations. Part II: Numerical results // Nucl. Sci. and Eng. 1982. Vol. 82. P. 64.
7. Дибиров О. А., Елесин В. А., Троциёв В. Е., Юдинцев В. Ф. Метод численного решения сферически-симметричных спектральных задач переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1978. Вып. 1. С. 10—17.
8. Грошев Е. В. О применении метода Райбки к процессу решения системы уравнений переноса излучения итерациями по граничным условиям // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 1. С. 39—47.
9. Грошев Е. В. Об одном методе ускорения сходимости итераций для численного решения одномерного нестационарного уравнения переноса излучения в многогрупповом кинетическом приближении // Там же. 1992. Вып. 1. С. 67—72.
10. Fleck J. F., Cummings J. D. An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8(3). P. 313—342.
11. Osher S., Chakravarthy S. High resolution schemes and the entropy condition // SIAM J. Numer. Anal. 1984. Vol. 21(5). P. 955—984.

Статья поступила в редакцию 30.07.12.
