

УДК 519.6

DS_n -МЕТОД РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА, ЗАПИСАННОГО В СФЕРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

А. И. Бочков, В. В. Сучкова, А. П. Трубицын
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Сформулирован метод численного решения двумерного нестационарного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Конечно-разностная аппроксимация уравнения выполнена на неортогональных четырехугольных пространственных сетках, строится по схеме с дополнительными соотношениями и является консервативной. Для решения полученной системы сеточных уравнений разработан алгоритм, основанный на методе бегущего счета. Приводятся результаты тестирования данного метода на одномерной задаче с источником.

Ключевые слова: осевая симметрия, двумерное уравнение переноса, сферическая система координат, метод решения.

Введение

Численное моделирование многомерных процессов переноса частиц является одной из наиболее сложных и трудоемких задач, так как при решении уравнения переноса искомая функция зависит от большого числа переменных. В основе многих методик численного решения уравнения переноса лежат методы дискретных ординат [1, 2] с аппроксимацией по схемам типа DS_n .

При решении многомерных задач с оптически тонкими областями и сильно локализованными источниками по DS_n -схемам получаются результаты с нефизическими осцилляциями, известными как *лучевые эффекты* [1, 3]. Лучевые эффекты являются достаточно устойчивыми относительно увеличения числа направлений полета частиц. Использование подробных угловых сеток хотя и позволяет уменьшить лучевые эффекты, но приводит к существенному удорожанию расчетов.

В зависимости от класса решаемых задач удобно использовать ту или иную форму записи уравнения переноса [1, 2]. Удачный выбор формы записи уравнения может повысить точность численного моделирования.

Одним из путей минимизации лучевых эффектов, возникающих при решении двумерных осесимметричных задач переноса, и повышения тем самым точности расчетов может явиться применение метода решения, основанного на записи уравнения переноса в сферической системе координат. Особенностью этой формы записи уравнения является использование подвижного базиса угловой системы координат, отвечающей за направления полета частиц. Среди первых работ, где была рассмотрена и теоретически исследована аппроксимация трехмерного уравнения переноса в сферических координатах, следует отметить [4].

В настоящей работе предлагается метод численного решения двумерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Конечно-разностная аппроксимация уравнения строится на произвольных четырехугольных пространственных сетках по схеме с дополнительными соотношениями и является консервативной. Дается описание алгоритма численного решения полученной системы сеточных уравнений. Приводятся результаты тестирования данного метода на одномерной задаче с источником.

Постановка задачи

Двумерное нестационарное кинетическое уравнение переноса частиц в одногрупповом приближении, записанное в сферической системе координат, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{N}{v} \right) + \text{div} \left(\vec{\Omega} N \right) + \alpha N = F, \tag{1}$$

$$\text{div} \left(\vec{\Omega} N \right) = \frac{\mu}{R^2} \frac{\partial (R^2 N)}{\partial R} + \frac{\xi}{R \sin \theta} \frac{\partial (\sin \theta N)}{\partial \theta} + \frac{1}{R} \frac{\partial ((1 - \mu^2) N)}{\partial \mu} - \frac{\text{ctg} \theta}{R} \frac{\partial (\eta N)}{\partial \varphi}, \tag{2}$$

$$F = \frac{1}{2\pi} \left(\beta n^{(0)} + Q \right), \quad n^{(0)} = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^\pi N d\varphi.$$

Здесь t — время; θ и R — сферические координаты положения частиц в пространстве: $R = |\vec{R}|$ — расстояние от точки положения частицы до начала координат, θ — угол между радиусом-вектором \vec{R} положения частицы и осью \vec{z} ; $v(\theta, R, t)$ — скорость частиц; $\alpha(\theta, R, t)$ — коэффициент поглощения частиц; $\beta(\theta, R, t)$ — коэффициент размножения частиц; $N = N(\theta, R, t, \mu, \varphi)$ — плотность потока частиц в точке (θ, R, t) , летящих в направлении $\vec{\Omega}$, $\vec{\Omega}(\mu, \varphi)$ — единичный вектор в направлении полета частиц; $F(\theta, R, t)$ — правая часть кинетического уравнения; $Q(\theta, R, t)$ — внешний источник частиц.

На рис. 1 приведена сферическая система координат. Для наглядного понимания связи между сферическими и цилиндрическими координатами¹ на рисунке изображена также цилиндрическая система координат. Сферические (R, θ) и цилиндрические (r, z) координаты связаны между собой следующим образом:

$$\theta = \text{arctg} \frac{r}{z}; \quad R = \sqrt{z^2 + r^2}. \tag{3}$$

С каждой пространственной точкой с координатами R, θ для описания направлений полета частиц связана угловая система координат с центром в точке (R, θ) , как показано на рис. 2. Направление первой оси этой системы координат совпадает с направлением радиуса-вектора \vec{R} . Вторая ось \vec{R}_\perp лежит в плоскости OzR и перпендикулярна \vec{R} : $\vec{R}_\perp = \vec{R} \times (\vec{R} \times \vec{z}) = \vec{R}(\vec{R} \cdot \vec{z}) - \vec{z}R$. Третья ось \vec{z}_\perp перпендикулярна первым двум осям: $\vec{z}_\perp = \vec{R} \times \vec{R}_\perp$. Плоскость, перпендикулярную радиусу-век-

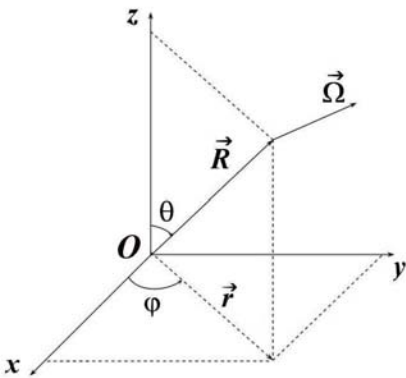


Рис. 1. Сферическая (R, θ, φ) и цилиндрическая (r, z, φ) системы координат

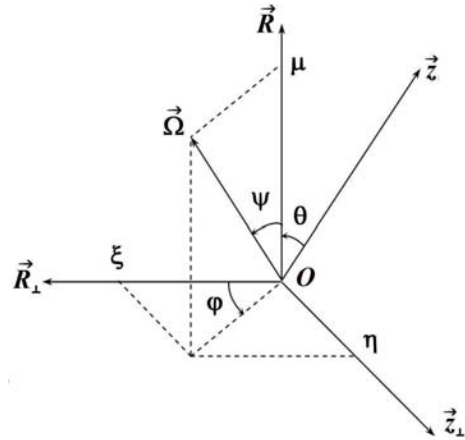


Рис. 2. Угловая система координат

¹Здесь и далее следует различать R и r — расстояния от точки положения частицы до начала координат и до оси симметрии соответственно.

тору \vec{R} , в которой лежат оси \vec{R}_\perp и \vec{z}_\perp , назовем азимутальной. Тогда φ — угол между проекцией вектора $\vec{\Omega}$ на азимутальную плоскость и осью \vec{R}_\perp (азимутальный угол); ψ — угол между векторами $\vec{\Omega}$ и \vec{R} (полярный угол); $\mu = \cos \psi$, $\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi$ и $\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi$ — направляющие косинусы.

Уравнение (1) решается в области фазового пространства $D = \{(z, r) \in L; -1 \leq \mu \leq 1; 0 \leq \varphi \leq \pi\}$, где область L — половина сечения тела вращения плоскостью, проходящей через ось \vec{z} и образующую Γ .

Начальное условие:

$$N(t, \theta, R, \mu, \varphi)|_{t=0} = N^0(\theta, R, \mu, \varphi).$$

Граничное условие задается на внешней поверхности при $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$ в виде потока частиц, входящих в тело:

$$N(t, \theta, R, \mu, \varphi)_{(\theta, R)} \in \Gamma = N^\Gamma(t, \theta_\Gamma, R_\Gamma, \mu, \varphi),$$

где Γ — образующая тела вращения; \vec{n} — внешняя нормаль к образующей Γ ; $N^\Gamma(t, \theta_\Gamma, R_\Gamma, \mu, \varphi)$ — заданная функция (плотность потока).

Наряду с уравнением (1) рассматриваются уравнения, которые используются как дополнительные (внутренние) граничные условия:

– при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$

$$\frac{\partial N}{\partial \varphi} = 0; \quad (4)$$

– при $\mu = -1$

$$\frac{\partial \left(\frac{N}{v} \right)}{\partial t} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial (R^2 N)}{\partial R} + \frac{2N}{R} + \alpha N = F; \quad (5)$$

– при $\varphi = \pi$

$$\frac{\partial \left(\frac{N}{v} \right)}{\partial t} + \frac{\mu}{R^2} \frac{\partial (R^2 N)}{\partial R} + \frac{\xi}{R \sin \theta} \frac{\partial (\sin \theta N)}{\partial \theta} + \frac{1}{R} \frac{\partial ((1 - \mu^2) N)}{\partial \mu} - \frac{\text{ctg } \theta N \xi}{R} + \alpha N = F. \quad (6)$$

Конечно-разностная аппроксимация

При численном решении уравнения (1) производная по времени аппроксимируется следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{N}{v} \right) = \frac{\left(\frac{N}{v} \right)^{n+1} - \left(\frac{N}{v} \right)^n}{\Delta t}.$$

Все величины, зависящие от пространственных переменных, задаются на момент времени $t_n + \gamma \Delta t$ ($0,5 \leq \gamma \leq 1$).

Для получения аппроксимации по угловым и пространственным переменным строим сетку в области D . На интервале $[-1, 1]$ выбираются узловые значения переменной μ_ω ($0 \leq \omega \leq N_\mu$). Для каждого интервала $\hat{\omega}$ переменной μ интервал изменения переменной $\varphi \in [0, \pi]$ разбивается на подынтервалы $\varphi_{q-1} \geq \varphi \geq \varphi_q$ ($1 \leq q \leq 2N_{\hat{\omega}}$), где

$$\pi = \varphi_0 > \varphi_1 > \dots > \varphi_{N_{\hat{\omega}}} = \frac{\pi}{2} > \varphi_{N_{\hat{\omega}}+1} > \dots > \varphi_{2N_{\hat{\omega}}} = 0.$$

Геометрическая область L покрывается четырехугольной сеткой.

Рассмотрим случай, когда пространственная сетка задается *цилиндрическими координатами* вершин ячеек (z, r) . Сферические и цилиндрические координаты связаны между собой соотношениями (3).

Для построения конечно-разностной схемы применяется интегроинтерполяционный метод и метод дополнительных соотношений.

Производные по угловым переменным μ и φ аппроксимируются следующим образом:

$$\frac{\partial ((1 - \mu^2) N)}{\partial \mu} = \frac{W_{\omega+1}^\mu N_{\omega+1} - W_\omega^\mu N_\omega}{\mu_{\omega+1} - \mu_\omega};$$

$$\frac{\partial (\eta N)}{\partial \varphi} = \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})+1}^\varphi N_{q(\hat{\omega})+1} - \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})}^\varphi N_{q(\hat{\omega})}}{\varphi_{q(\hat{\omega})+1} - \varphi_{q(\hat{\omega})}}.$$

Теперь рассмотрим счетную ячейку в плоскости Ozr , вершины которой определены цилиндрическими координатами (рис. 3).

Умножим уравнение (1) на элемент фазового объема $R^2 \sin \theta 5dR d\theta$ и проинтегрируем по счетной ячейке, границы которой представляют собой отрезки в цилиндрической системе координат. Осуществляя с помощью формулы Грина переход к интегралу по замкнутому контуру (по границе ячейки) и используя квадратурные формулы типа *центральных прямоугольников*, получаем в результате конечно-разностной аппроксимации следующее уравнение баланса частиц в счетной ячейке:

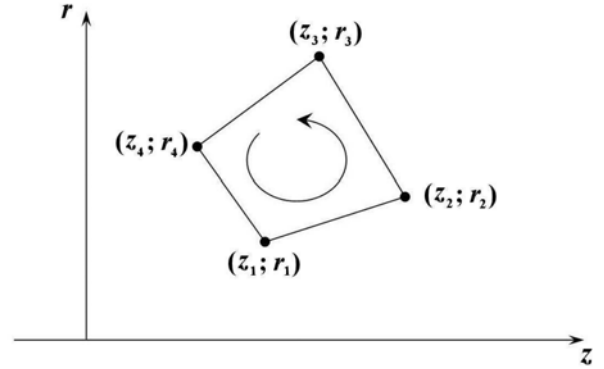


Рис. 3. Счетная ячейка в плоскости Ozr

$$V \frac{\left(\frac{N}{v}\right)^{n+1} - \left(\frac{N}{v}\right)^n}{\Delta t} + \sum_{\ell=1}^4 \chi_\ell N_\ell + \chi_{II}^\mu N_2^\mu - \chi_I^\mu N_1^\mu + \chi_{II}^\varphi N_2^\varphi - \chi_I^\varphi N_1^\varphi + V\alpha N_0 = VF, \quad (7)$$

где V — объем вращения ячейки в плоскости Ozr вокруг оси симметрии \vec{z} ; $\chi_\ell = 2\pi (\mu_{\hat{\omega}} \chi_\ell^\mu - \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \cos \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \chi_\ell^\xi)$ — коэффициент освещенности стороны ячейки, $\mu_{\hat{\omega}} \in [\mu_\omega, \mu_{\omega+1}]$, $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \in [\varphi_{q(\hat{\omega})}, \varphi_{q(\hat{\omega})+1}]$;

$$\chi_\ell^\mu = \frac{(r_{\ell+1} - r_\ell)(R_{\ell+1} - R_\ell) M_\ell}{L_\ell^2} - \frac{|z_{\ell+1} - z_\ell| M_\ell^2}{L_\ell^3} B_\ell,$$

$$\chi_\ell^\xi = \frac{1}{2} \left[R_{\ell+1} r_{\ell+1} - R_\ell r_\ell - \frac{(z_{\ell+1} - z_\ell)(R_{\ell+1} - R_\ell) M_\ell}{L_\ell^2} - \frac{|r_{\ell+1} - r_\ell| M_\ell^2}{L_\ell^3} C_\ell \right],$$

$$B_\ell = \ln \left| \frac{R_{\ell+1} |z_{\ell+1} - z_\ell| L_\ell + z_{\ell+1} L_\ell^2 - (r_{\ell+1} - r_\ell) M_\ell}{R_\ell |z_{\ell+1} - z_\ell| L_\ell + z_\ell L_\ell^2 - (r_{\ell+1} - r_\ell) M_\ell} \right|,$$

$$C_\ell = \ln \left| \frac{R_{\ell+1} |r_{\ell+1} - r_\ell| L_\ell + r_{\ell+1} L_\ell^2 + (z_{\ell+1} - z_\ell) M_\ell}{R_\ell |r_{\ell+1} - r_\ell| L_\ell + r_\ell L_\ell^2 + (z_{\ell+1} - z_\ell) M_\ell} \right|,$$

$$M_\ell = z_\ell r_{\ell+1} - r_\ell z_{\ell+1}, \quad L_\ell = \sqrt{(r_{\ell+1} - r_\ell)^2 + (z_{\ell+1} - z_\ell)^2};$$

$$\chi_{II}^\mu = 2\pi \frac{W_{\omega+1}^\mu S_\mu}{\Delta \mu_{\hat{\omega}}}; \quad \chi_I^\mu = 2\pi \frac{W_\omega^\mu S_\mu}{\Delta \mu_{\hat{\omega}}};$$

$$\chi_{II}^\varphi = 2\pi \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})+1}^\varphi S_\varphi}{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}; \quad \chi_I^\varphi = 2\pi \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})}^\varphi S_\varphi}{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}};$$

W_{ω}^{μ} и $W_{\omega+1}^{\mu}$ имеют смысл функции $1 - \mu^2$ соответственно в точках μ_{ω} и $\mu_{\omega+1}$; $\Delta\mu_{\widehat{\omega}} = \mu_{\omega+1} - \mu_{\omega}$;
 $S_{\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^4 \chi_{\ell}^{\mu}$; $W_{q(\widehat{\omega})}^{\varphi}$ и $W_{q(\widehat{\omega})+1}^{\varphi}$ имеют смысл функции $\sin \varphi$ соответственно в точках $\varphi_{q(\widehat{\omega})}$ и $\varphi_{q(\widehat{\omega})+1}$;
 $\Delta\varphi_{\widehat{q}(\widehat{\omega})} = \varphi_{q(\widehat{\omega})} - \varphi_{q(\widehat{\omega})+1}$; $S_{\varphi} = - \sum_{\ell=1}^4 \chi_{\ell}^{\xi}$; N_{ℓ} ($\ell = \overline{1,4}$) — средние значения искомой функции на сторонах ячейки в плоскости Ozr ; N_0 — значение в *центре* ячейки фазового пространства;

$$N_2^{\mu} = N|_{\mu_{\omega+1}}; \quad N_1^{\mu} = N|_{\mu_{\omega}}; \quad N_2^{\varphi} = N|_{\varphi_{q(\widehat{\omega})+1}}; \quad N_1^{\varphi} = N|_{\varphi_{q(\widehat{\omega})}}; \quad n^{(0)} = \sum_{\widehat{\omega}} \sum_{\widehat{q}(\widehat{\omega})} N_0 \Delta\varphi_{\widehat{q}(\widehat{\omega})} \Delta\mu_{\widehat{\omega}}.$$

Отметим, что значения функций в точках $l + k$ тождественны значениям в точках $\text{mod } (l + k, 4)$.

Граничные условия задаются на тех сторонах четырехугольников, для которых $\chi_{\ell} < 0$ ($\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$).

На оси симметрии \vec{z} $\chi_{\ell} = 0$, так как площадь вращения стороны ячейки вокруг оси \vec{z} равна нулю. Однако для организации *бегающего счета* [5] по пространственным ячейкам нужно знать знак скалярного произведения $\vec{\Omega} \cdot \vec{n}$. Из геометрических соображений знак $\vec{\Omega} \cdot \vec{n}$ на оси симметрии \vec{z} определяется как

$$\text{sign}(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) = \text{sign} \left(\sqrt{1 - \mu_{\widehat{\omega}}^2} \cos \varphi_{\widehat{q}(\widehat{\omega})} (R_{\ell} - R_{\ell+1}) \right).$$

Рассмотрим теперь аппроксимацию внутренних граничных условий (4)–(6).

При $\theta = 0$ и $\theta = \pi$ (ось симметрии \vec{z}) условие $\frac{\partial N}{\partial \varphi} = 0$ аппроксимируется как $N|_{\varphi} = N|_{\pi - \varphi}$.

При $\mu = -1$ граничное условие имеет вид (5). Аппроксимация этого граничного условия удовлетворяет аппроксимации исходного уравнения, если положить $\chi_I^{\mu} = 0$; $\chi_{II}^{\mu} = 4\pi S_{\mu}$.

При $\varphi = \pi$ граничное условие имеет вид (6). Граничное условие при $\varphi = \pi$ удовлетворяет аппроксимации исходного уравнения при $\chi_I^{\varphi} = 0$; $\chi_{II}^{\varphi} = 2\pi S_{\varphi} \sqrt{1 - \mu_{\widehat{\omega}}^2}$.

Для замыкания полученной системы разностных уравнений (7) ее необходимо дополнить соотношениями, связывающими значения искомой функции в разных точках фазового пространства. Для этого воспользуемся дополнительными соотношениями DS_n -метода.

По переменной времени используется следующее соотношение связи:

$$\frac{N_0}{v} = \gamma \left(\frac{N}{v} \right)^{n+1} + (1 - \gamma) \left(\frac{N}{v} \right)^n, \quad 0,5 \leq \gamma \leq 1.$$

Аппроксимация по угловым переменным μ и φ . Для аппроксимации по угловой переменной μ используется WDD -схема из работы [4].

В случае симметричного относительно нуля расположения узлов μ_{ω} WDD -схема определяется следующими параметрами W^{μ} , $\mu_{\widehat{\omega}}$ и $\delta\mu_{\widehat{\omega}}$ (вес аппроксимации):

$$W_{\omega}^{\mu} - W_{\omega+1}^{\mu} = 2\mu_{\widehat{\omega}} \Delta\mu_{\widehat{\omega}}; \quad \delta\mu_{\widehat{\omega}} = \frac{\mu_{\widehat{\omega}} - \mu_{\omega}}{\Delta\mu_{\widehat{\omega}}};$$

при $\mu > 0$

$$W_{N_{\mu}}^{\mu} = W|_{\mu=1} = 0; \quad \mu_{\widehat{\omega}} = \frac{\mu_{\omega} + \sqrt{\mu_{\omega}^2 + 3(1 - W_{\omega+1}^{\mu})}}{3}; \quad (8)$$

при $\mu < 0$

$$W_0^{\mu} = W|_{\mu=-1} = 0; \quad \mu_{\widehat{\omega}} = \frac{\mu_{\omega+1} - \sqrt{\mu_{\omega+1}^2 + 3(1 - W_{\omega}^{\mu})}}{3}. \quad (9)$$

Значения $|\mu_{\widehat{\omega}}|$ и W^{μ} являются симметричными относительно $\mu = 0$; $\delta\mu_{\mu < 0} = 1 - \delta\mu_{\mu > 0}$.

Рассмотрим оставшиеся параметры аппроксимации по угловым переменным для двух видов сеток: равномерных и задаваемых ES_n -квadrатурой [1].

При равномерной сетке в области изменения переменной $\mu \in [-1, 1]$ выбираются соответствующие одинаковой длине интервалов узловые значения переменной μ_ω . Для каждого интервала $\hat{\omega}$ переменной μ область изменения переменной $\varphi \in [0, \pi]$ разбивается на одинаковое число равных интервалов. Число интервалов по угловым переменным задается кратным 2. Параметры сетки определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_\omega &= -1 + 2\frac{\omega}{N_\mu}, \quad \omega = 0, 1, \dots, N_\mu; \quad \varphi_\omega = \pi \frac{2N_{\hat{\omega}} - q(\hat{\omega})}{2N_{\hat{\omega}}}, \quad q(\hat{\omega}) = 0, 1, \dots, 2N_{\hat{\omega}}; \\ \cos \varphi_{q(\hat{\omega})} &= \cos \left(\frac{\varphi_{q(\hat{\omega})+1} + \varphi_{q(\hat{\omega})}}{2} \right); \quad W_0^\varphi = 0; \quad W_{q(\hat{\omega})+1}^\varphi = W_{q(\hat{\omega})}^\varphi - \cos \varphi_{q(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{q(\hat{\omega})}. \end{aligned} \quad (10)$$

Сетка, задаваемая ES_n -квadrатурой, определяется одним параметром — положительным целым четным числом n (порядок квадратуры). Поверхность единичной полусферы разбивается на $\frac{n(n+2)}{2}$ ячеек одинаковой площади. Параметры сетки определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu_\omega &= \begin{cases} -1 + 4\frac{\hat{\omega}(\hat{\omega}+1)}{n(n+2)}, & \hat{\omega} = 0, 1, \dots, \frac{n}{2}; \\ 1 - 4\frac{(n-\hat{\omega})(n-\hat{\omega}+1)}{n(n+2)}, & \hat{\omega} = \frac{n}{2} + 1, \dots, n; \end{cases} \quad N_{\hat{\omega}} = \begin{cases} \hat{\omega}, & \hat{\omega} = 1, 2, \dots, \frac{n}{2}; \\ n - \hat{\omega} + 1, & \hat{\omega} = \frac{n}{2} + 1, \dots, n; \end{cases} \\ \varphi_\omega &= \pi \frac{2N_{\hat{\omega}} - q(\hat{\omega})}{2N_{\hat{\omega}}}, \quad q(\hat{\omega}) = 0, 1, \dots, 2N_{\hat{\omega}}; \\ \cos \varphi_{q(\hat{\omega})} &= \cos \left(\frac{\varphi_{q(\hat{\omega})+1} + \varphi_{q(\hat{\omega})}}{2} \right); \quad W_0^\varphi = 0; \quad W_{q(\hat{\omega})+1}^\varphi = W_{q(\hat{\omega})}^\varphi - \cos \varphi_{q(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{q(\hat{\omega})}. \end{aligned}$$

Для ES_n -квadrатур в соседних интервалах по угловой переменной μ содержится разное число интервалов по угловой переменной φ , поэтому переход от одного интервала по μ к другому сопровождается линейной интерполяцией значений N^μ по переменной φ .

В общем случае на неравномерной сетке по переменной μ значение под корнем в (8) и (9) может быть отрицательным, а $\mu_{\hat{\omega}}$ может выйти за границы интервала $[\mu_\omega, \mu_{\omega+1}]$. Численные исследования показали, что для рассмотренных сеток по угловым переменным этого не происходит.

Заметим, что для равномерной сетки по угловой переменной φ вместо рекуррентной формулы (10) для расчета коэффициентов W^φ может быть использована эквивалентная формула [6]

$$W_{q(\hat{\omega})}^\varphi = \sin \varphi_{q(\hat{\omega})} \frac{\frac{\Delta \varphi_{q(\hat{\omega})}}{2}}{\sin \left(\frac{\Delta \varphi_{q(\hat{\omega})}}{2} \right)}.$$

Для замыкания системы сеточных уравнений по угловым переменным используются дополнительные соотношения DS_n -метода:

$$N_0 = \delta_\varphi N_2^\varphi + (1 - \delta_\varphi) N_1^\varphi, \quad 0,5 \leq \delta_\varphi \leq 1; \quad N_0 = \delta_{\mu_{\hat{\omega}}} N_2^\mu + (1 - \delta_{\mu_{\hat{\omega}}}) N_1^\mu.$$

При аппроксимации граничных условий (5) и (6) веса аппроксимации по угловым переменным следует положить равными 1.

Рассмотренные сетки по угловым переменным μ и φ обеспечивают следующие свойства:

- 1) симметричность сетки по μ относительно $\mu = 0$;
- 2) $\Delta \mu \Delta \varphi = \text{const}$;

- 3) $\operatorname{div}_h(\vec{\Omega}N) = \frac{1}{V} \left(\sum_{\ell=1}^4 \chi_{\ell} N_{\ell} + \chi_{II}^{\mu} N_2^{\mu} - \chi_I^{\mu} N_1^{\mu} + \chi_{II}^{\varphi} N_2^{\varphi} - \chi_I^{\varphi} N_1^{\varphi} \right) \equiv 0$ при $N = \text{const}$;
- 4) $|\vec{\Omega}| = 1$.

Покажем, что рассмотренные сетки обеспечивают выполнение свойства диффузионного предела. Для WDD -схемы выполнение равенства

$$\frac{\sum_{\hat{\omega}} \mu_{\hat{\omega}}^2 \Delta \mu_{\hat{\omega}}}{\sum \Delta \mu_{\hat{\omega}}} = \frac{1}{3}$$

показано в работе [4].

Покажем, что в случае равномерной сетки по угловой переменной φ выполняется также

$$\frac{\sum_{\hat{\omega}} (1 - \mu_{\hat{\omega}}^2) \Delta \mu_{\hat{\omega}} \sum_{\hat{q}(\hat{\omega})} \cos^2 \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{\sum_{\hat{\omega}} \Delta \mu_{\hat{\omega}} \sum_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}} = \frac{1}{3}.$$

Определим сумму

$$\begin{aligned} \sum \cos^2 \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} &= 2 \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \left[\cos^2 \frac{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{2} + \cos^2 \left(\frac{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{2} + \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \right) + \dots + \right. \\ &\quad \left. + \cos^2 \left(\frac{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{2} + (N_{\hat{\omega}} - 1) \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \right) \right]. \end{aligned}$$

Введем обозначение $k = \frac{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{2} = \frac{\pi}{4N_{\hat{\omega}}}$. Воспользовавшись суммой ряда $\sum_{i=1}^n \cos^2 ix = \frac{n}{2} + \frac{\cos(n+1)x \sin nx}{2 \sin x}$, получим

$$\begin{aligned} \cos^2 k + \cos^2(3k) + \dots + \cos^2((2N_{\hat{\omega}} - 1)k) &= \left[\cos^2 k + \cos^2(2k) + \dots + \cos^2((2N_{\hat{\omega}} - 1)k) \right] - \\ - \left[\cos^2(2k) + \cos^2(4k) + \dots + \cos^2(2(N_{\hat{\omega}} - 1)k) \right] &= \frac{N_{\hat{\omega}}}{2} + \frac{\cos 2N_{\hat{\omega}} k}{2 \sin k} \left[\sin((2N_{\hat{\omega}} - 1)k) - \sin(2(N_{\hat{\omega}} - 1)k) \right] = \\ = \frac{N_{\hat{\omega}}}{2} + \frac{\cos \pi/2}{2 \sin k} \left[\sin((2N_{\hat{\omega}} - 1)k) - \sin(2(N_{\hat{\omega}} - 1)k) \right] &= \frac{N_{\hat{\omega}}}{2}. \end{aligned}$$

В результате, независимо от числа интервалов в равномерной сетке по угловой переменной φ , имеем

$$\sum \cos^2 \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} = \frac{\pi}{2}.$$

Используя последнее выражение, получаем

$$\frac{\sum_{\hat{\omega}} (1 - \mu_{\hat{\omega}}^2) \Delta \mu_{\hat{\omega}} \sum_{\hat{q}(\hat{\omega})} \cos^2 \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{\sum_{\hat{\omega}} \Delta \mu_{\hat{\omega}} \sum_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}} = \frac{1}{4} \sum_{\hat{\omega}} (1 - \mu_{\hat{\omega}}^2) \Delta \mu_{\hat{\omega}} = \frac{1}{3}.$$

Таким образом, рассмотренные сетки по угловым переменным μ и φ обеспечивают выполнение важного свойства — свойства диффузионного предела.

Аппроксимация по пространственным переменным. Для аппроксимации и замыкания системы разностных уравнений по пространственным переменным используем дополнительные соотношения [7, 8].

Назовем освещенными стороны пространственной ячейки, на которых коэффициенты $\chi_\ell < 0$. Напротив, стороны, где $\chi_\ell \geq 0$, будем называть неосвещенными. Число дополнительных соотношений и их вид определяются освещенностью сторон ячейки.

Подвижный относительно пространственной сетки базис угловой системы координат делает возможным шесть вариантов освещенности сторон четырехугольной ячейки, изображенной на рис. 4.

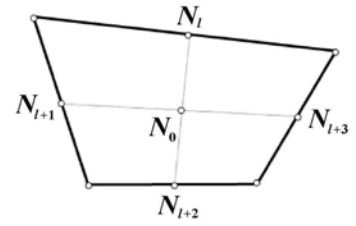


Рис. 4. Пространственная ячейка

Вариант 1. Пусть для определенности освещены три стороны ячейки: $l + 1$, $l + 2$ и $l + 3$. В этом случае известны N_{l+1} , N_{l+2} и N_{l+3} . Для замыкания системы сеточных уравнений по пространственным переменным вводится одно дополнительное соотношение:

$$N_0 = \delta N_l + (1 - \delta) N_{l+2}, \quad 0,5 \leq \delta \leq 1.$$

Вариант 2. Освещены две смежные стороны l и $l + 3$ — известны N_l и N_{l+3} . По пространственным переменным вводятся следующие дополнительные соотношения:

$$N_0 = \delta N_{l+2} + (1 - \delta) N_l, \quad N_0 = \delta N_{l+1} + (1 - \delta) N_{l+3}, \quad 0,5 \leq \delta \leq 1.$$

Вариант 3. Освещена только одна сторона l — известно N_l . По пространственным переменным используются дополнительные соотношения

$$N_{l+1} = N_{l+3} = N_0; \quad N_0 = \delta N_{l+2} + (1 - \delta) N_l, \quad 0,5 \leq \delta \leq 1.$$

Вариант 4. Освещены две противоположные стороны $l + 1$ и $l + 3$ — известны N_{l+1} и N_{l+3} . По пространственным переменным вводятся следующие соотношения связи:

$$N_l = N_{l+2} = N_0.$$

Вариант 5. Не освещена ни одна из сторон ячейки. В этом случае по пространственным переменным используются следующие соотношения:

$$N_l = N_{l+1} = N_{l+2} = N_{l+3} = N_0.$$

Вариант 6. Освещены все стороны ячейки. В этом случае дополнительные соотношения по пространственным переменным не вводятся.

Если весовой множитель δ положить равным 0,5, то для вариантов 1 и 2 введенные по пространственным переменным дополнительные соотношения обеспечивают второй порядок точности. Для вариантов 3—5 используются дополнительные соотношения, основанные на представлении решения в ячейке в виде константы, что обеспечивает только первый порядок аппроксимации. Однако отметим, что в практических расчетах наиболее часто встречается вариант 2, что позволяет надеяться в целом на близкий ко второму порядок точности.

Представленная разностная аппроксимация уравнения (1), (2) является консервативной как относительно переноса частиц, так и относительно взаимодействия частиц со средой. При этом разностная схема является немонотонной, поэтому для обеспечения положительности сеточного решения применяется метод балансного зануления [8].

Алгоритм численного решения

Разностные уравнения баланса, дополнительные соотношения по угловым, пространственным и временной переменным, а также сеточные уравнения, аппроксимирующие начальные и граничные условия, вместе образуют замкнутую систему алгебраических уравнений. С применением метода

итераций по источнику эта система может быть разрешена по алгоритму типа алгоритма бегущего счета, который формулируется ниже.

Обратим внимание на некоторые особенности численного решения уравнения переноса, записанного в сферической системе координат.

При переходе радиуса-вектора \vec{R} через ось \vec{r} ($z = 0$) происходит смена направления по угловой переменной φ относительно вращения вокруг оси симметрии. При аппроксимации уравнения это выражается в том, что для симметричных относительно оси \vec{r} счетных ячеек коэффициенты S_φ будут равны по абсолютной величине, но противоположны по знаку. При этом $S_\varphi > 0$ для ячеек, которые находятся "справа" от оси \vec{r} ($z > 0$).

Для численного решения полученной системы сеточных уравнений пространственные ячейки разбиваются на две подобласти, для которых соответственно выполняются условия $S_\varphi \geq 0$ и $S_\varphi < 0$. Счет подобластей выполняется независимо друг от друга, при этом происходит обмен их итерационными граничными условиями.

В результате на текущей итерации по правой части система сеточных уравнений для отдельно взятой подобласти решается по следующему алгоритму:

1. Система разностных уравнений разрешается последовательно (в порядке возрастания μ) для каждого $\mu_{\hat{\omega}}$ из множества заданных интервалов, причем сначала для *фиктивного* направления $\mu = -1$.
2. Для каждого фиксированного $\mu_{\hat{\omega}}$ система разностных уравнений решается последовательно для выбранных значений $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$. При этом используется следующий порядок решения подынтервалов по φ .

Для подобласти ячеек, где $S_\varphi \geq 0$, сначала решается уравнение, соответствующее $\varphi = \pi$. Затем последовательно рассчитываются уравнения в порядке убывания $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$ от π до 0. Для подобласти ячеек, где $S_\varphi < 0$, реализуется обратный порядок разрешения подынтервалов, т. е. сначала решается уравнение, соответствующее $\varphi = 0$, а затем последовательно рассчитываются уравнения в порядке возрастания $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$ от 0 до π .

3. Численное решение системы разностных уравнений, соответствующих фиксированным значениям $\mu_{\hat{\omega}}$ и $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$, основывается на преобразовании разностного оператора к блочно-треугольному виду посредством обобщения алгоритма бегущего счета [5].

Заметим, что для уравнения переноса в сферических координатах (1), (2) характеристики в плоскости Ozr не являются прямыми линиями, поэтому преобразование разностного оператора рассматриваемой системы сеточных уравнений к блочно-треугольному виду не всегда возможно. В связи с этим, подобно [9], в общем случае для счета всех ячеек подобласти организуется итерационный процесс по блокам, включающим в себя множество пространственных ячеек, которое при наличии граничных условий на внешней границе блока может быть разрешено методом бегущего счета.

4. При наличии граничных условий на освещенной поверхности ячейки фазового пространства уравнение баланса частиц (7) и введенные дополнительные соотношения позволяют определить значения искомой функции в центре ячейки и на неосвещенных гранях.

Тестирование метода

Тестирование представленного метода решения двумерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат, проводилось на примере одномерной задачи с источником. Рассматривается сферически-симметричная система, состоящая из двух физических областей, ограниченных радиусами 0,1 см и 2 см. Параметры $\alpha = \beta = 0$, $v = 1$. В области, ограниченной радиусом 0,1 см, задавался источник частиц $Q = 1$, в остальной части системы $Q = 0$. Граничное условие — для нулевого входящего потока.

Сетка по пространственным переменным задавалась равномерной и содержала соответственно 160 строк и 100 столбцов. Вес аппроксимации по пространственным переменным $\delta = 0,5$. Для аппроксимации по угловым переменным использовалась ES_{10} -квадратура. Вес аппроксимации δ_φ задавался равным 0,5.

Расчеты проводились до момента времени 2,0 с постоянным шагом 0,0125. Вес аппроксимации по времени $\gamma = 1$. В качестве результата решения задачи рассматривалась зависимость плотности потока частиц ($n^{(0)}$) от пространственного угла.

На рис. 5 представлен график на момент окончания расчетов, характеризующий симметрию численного решения: приведена функция $\varepsilon = \frac{n_{\max}^{(0)} - n_{\min}^{(0)}}{n_{\min}^{(0)}} \cdot 100\%$, где $n_{\max}^{(0)}$ и $n_{\min}^{(0)}$ — соответственно максимальное и минимальное значения плотности потока частиц в строке сетки. Приведенная зависимость показывает, что решение двумерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат, обладает хорошей симметрией: разница между максимальным и минимальным значениями плотности потока частиц в каждой из строк счетной сетки не превышает 0,35 %.

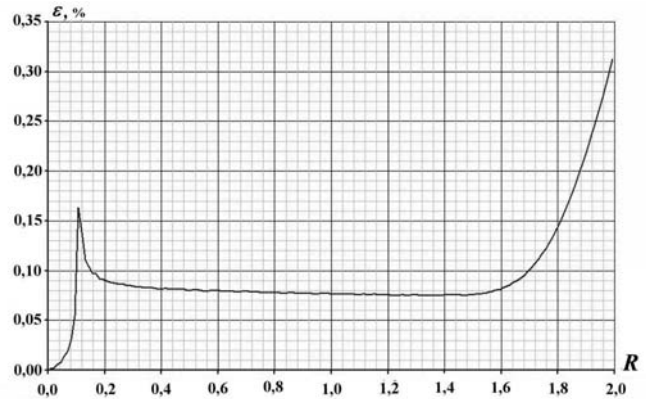


Рис. 5. Зависимость $\varepsilon = \frac{n_{\max}^{(0)} - n_{\min}^{(0)}}{n_{\min}^{(0)}} \cdot 100\%$ от радиуса

В таблице представлены средние по строке сетки значения плотности потока частиц, полученные на момент окончания расчетов задачи с решением двумерного и одномерного уравнений переноса. Из таблицы видно, что результаты расчетов с решением двумерных уравнений переноса очень хорошо согласуются с решением одномерного уравнения.

Плотность потока частиц в отдельных строках счетной сетки (нумерация строк от центра)

Номер строки	$n^{(0)}$		$\varepsilon = \frac{n_{2D}^{(0)} - n_{1D}^{(0)}}{n_{1D}^{(0)}} \cdot 100\%$
	1D [10]*	2D	
9	$4,0831 \cdot 10^{-2}$	$4,0841 \cdot 10^{-2}$	0,02%
80	$3,4955 \cdot 10^{-4}$	$3,4963 \cdot 10^{-4}$	0,02%
160	$3,1433 \cdot 10^{-5}$	$3,1378 \cdot 10^{-5}$	-0,17%

*Для аппроксимации по угловой переменной μ применялась ES_{10} -квадратура в сочетании с WDD -схемой.

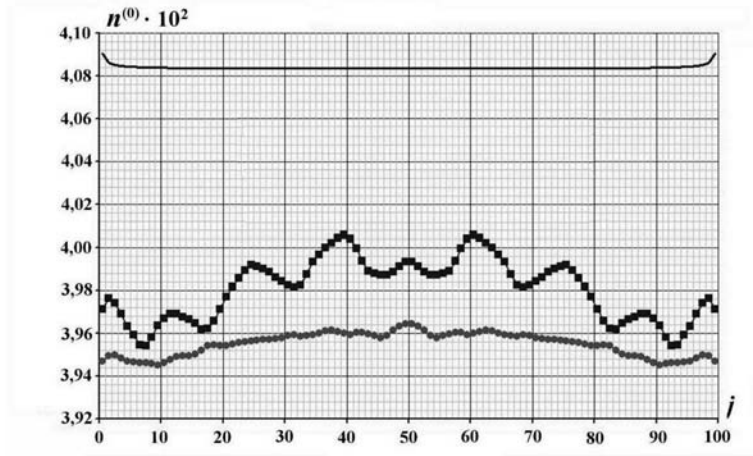
Для сравнения на рис. 6 представлены результаты расчетов этой же задачи, полученные при решении уравнения переноса в сферической и цилиндрической [7]² системах координат: для 9-й ($R \sim 0,1$ см), 80-й ($R \sim 1,0$ см) и 160-й ($R \sim 2,0$ см) строк счетной сетки изображены зависимости плотности потока частиц от угла θ (j — номер столбца). Представленные результаты свидетельствуют о том, что при решении уравнения переноса, записанного в цилиндрической системе координат, для минимизации лучевых эффектов требуется значительное число направлений полета частиц.

Сравнивая временные характеристики двух методов решения, можно отметить, что для рассмотренной задачи метод решения двумерного уравнения переноса в сферической системе координат является в два раза более дорогостоящим, чем метод решения двумерного уравнения переноса в цилиндрических координатах [7].

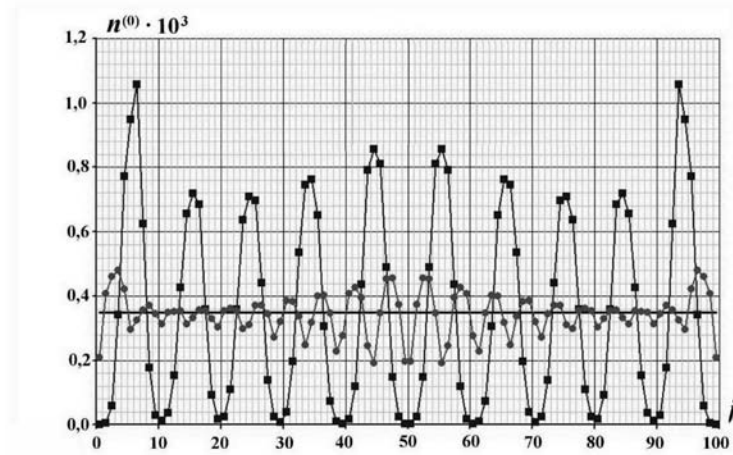
Заключение

В настоящей работе сформулирован метод решения двумерных осесимметричных задач переноса, основанный на решении двумерного нестационарного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Предложенная конечно-разностная аппроксимация уравнения

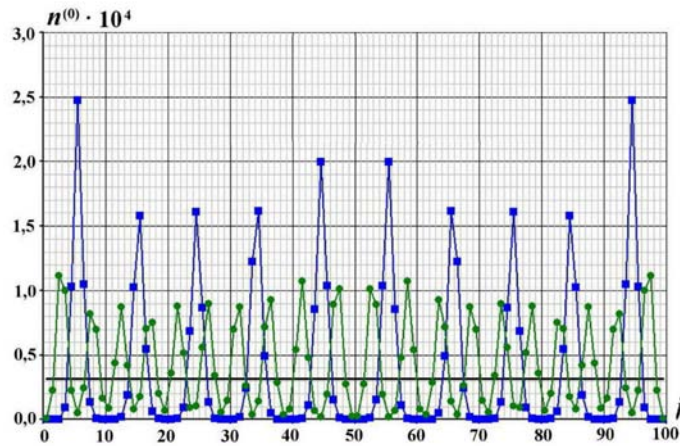
²По угловой переменной φ использовалась усовершенствованная аппроксимация [6].



а



б



в

Рис. 6. Зависимость плотности потока частиц от пространственного угла θ : а — 9-я строка; б — 80-я строка; в — 160-я строка; — — ES_{10} , сферическая система координат; —■— — ES_{10} , цилиндрическая система координат; —●— — ES_{20} , цилиндрическая система координат

переноса, которая строится по схеме с дополнительными соотношениями, является консервативной. Для решения полученной системы разностных уравнений разработан алгоритм, основанный на методе бегущего счета.

Тестирование численного метода выполнено на одномерной задаче с источником. Проведенные численные исследования показывают, что для некоторого класса осесимметричных задач предложенный метод может являться эффективным средством для борьбы с лучевыми эффектами. Так, например, по сравнению с решением уравнения переноса в цилиндрических координатах новый метод решения двумерных задач переноса позволяет значительно уменьшить лучевые эффекты в задачах с точечным источником.

Список литературы

1. *Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМ АН СССР, 1986.
2. *Карлсон Б., Латрон К.* Теория переноса. Метод дискретных ординат // Вычислительные методы в физике реакторов. М.: Атомиздат, 1972. С. 102—137.
3. *Lathrop K. D.* Ray-effects in discrete ordinates equations // Nucl. Science. and Eng. 1968. Vol. 32, No 3. P. 357—369.
4. *Reed Wm. H., Lathrop K. D.* Truncation error analysis of finite difference approximations to the transport equation // Ibid. 1970. Vol. 41. P. 237—248.
5. *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.
6. *Алексеев А. В., Мжачих С. В., Плетенёва Н. П., Шагалиев Р. М.* Некоторые методы аппроксимации двумерного уравнения переноса по угловым переменным // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 2. С. 5—11.
7. *Троцкий В. Е., Шумилин В. А.* Разностная схема решения двумерного уравнения переноса на нерегулярных четырехугольных сетках // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1986. Т. 26, № 2. С. 230—241.
8. *Елесин В. А., Троцкий В. Е., Федянин В. И., Юдинцев В. Ф.* Численная методика и организация программы для решения многогруппового нестационарного кинетического уравнения // Комплексы программ математической физики. Новосибирск, 1972. С. 18—23.
9. *Алексеев А. В., Евдокимов В. В., Шагалиев Р. М.* Методика численного решения нестационарного трехмерного уравнения переноса частиц в комплексе САТУРН // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 3. С. 3—8.
10. *Троцкий В. Е.* О математических свойствах S_n -методов решения кинетических уравнений // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1975. Т. 15, № 5. С. 1209—1221.

Статья поступила в редакцию 31.08.10.
