

# ПОДХОД TFS В ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОСА

*И. А. Низамова, В. В. Евдокимов*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

При решении прикладных задач возникают такие проблемы, как, например, вытянутые ячейки, в которых возникают определенные трудности при решении уравнения переноса. Сюда же относятся и ячейки большого размера, на которых сложно получить решение с приемлемой точностью. Такие проблемы решаются с помощью перестроения сетки или построения адаптивной сетки. Однако не во всех случаях сетку можно перестроить.

Еще одна проблема – это отрицательное решение, которое недопустимо при решении уравнения переноса, так как значения потока нейтронов должны быть положительными. Для борьбы с отрицательностью решения также предложено множество подходов, например, метод балансного зануления.

В данном докладе рассмотрен еще один подход, в котором осуществляется попытка частично решить вышеописанные проблемы. В этом подходе предлагается виртуально разбить исходную сетку на подячейки, решить уравнение переноса в этих подячейках последовательно. Полученное на выходе из последних подячеек решение после суммирования будет решением для всей исходной ячейки.

В докладе приводится описание подхода и его применения в одномерном случае и в двумерном случае в декартовой прямоугольной системе координат, а также результаты тестирования.

## Постановка задачи

Рассмотрим стационарное кинетическое уравнение переноса для одной группы с заданной правой частью в декартовой системе координат [1]:

$$\operatorname{div}(\vec{\Omega} \cdot N) + \alpha N = F, \quad F = \sum \beta n^{(0)} + Q \quad (1)$$

$\alpha$  – полное макроскопическое сечение взаимодействия частиц со средой;  $\beta$  – коэффициент рассеяния нейтронов;  $\vec{\Omega} = \vec{\Omega}(\mu, \varphi)$  – единичный вектор в направлении полета частиц;  $\mu = \cos \theta$ ,  $\theta$  – угол между вектором  $\vec{\Omega}$  и осью  $X$ ;  $N = N(\mathbf{x}, \mu)$  – поток частиц, летящих в направлении  $\mu$ ;  $\mathbf{X}$  – вектор координат;  $Q = Q(\mathbf{x})$  – независимый источник частиц;

$$n^{(0)} = \int_{-1}^1 N d\mu$$

Уравнение определено в области  $a < x < b$ ,  $-1 < \mu < 1$  и дополняется граничными условиями

$$N(x, \mu) \Big|_{\mu > 0, x=a} = \varphi_a(\mu),$$

$$N(x, \mu) \Big|_{\mu < 0, x=b} = \varphi_b(\mu)$$

## Метод TFS

Иногда для выполнения условия положительности схемы следует уменьшить шаг расчетной сетки. Основная идея метода TFS – «разбиение» пространственной ячейки на множество подячеек с таким размером, который удовлетворяет условию положительности, и последовательное решение уравнения переноса в каждой ячейке.

Рассмотрим, как этот процесс разбиения будет выглядеть, на примере двумерной ячейки, рис.1. Этот пример более нагляден.

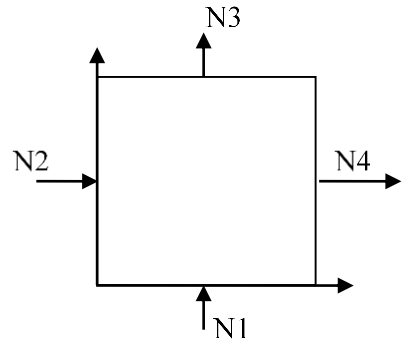


Рис. 1. Двумерная ячейка с обозначениями входящих и выходящих потоков

Рассмотрим ячейку, на двух гранях которой заданы входящие потоки N1 и N2 и выходящие потоки N3 и N4. Она изображена на рис. 1. Решая уравнение баланса (1) (предполагается, что правая часть тоже задана) для этой ячейки (в соответствии с выбранным способом аппроксимации), получим значения потоков на выходе.

В двумерном плоском случае с аппроксимацией по DD-схеме уравнение (1) с учетом введенных обозначений входящих и выходящих потоков будет выглядеть так:

$$\mu \frac{N_4 - N_2}{\Delta x} + \xi \frac{N_3 - N_1}{\Delta y} + \alpha N_{1/2} = F$$

Не уточняя аппроксимации, для каждой ячейки можно получить явную зависимость выходящих потоков от входящих и правой части:

$$\begin{aligned} N_3 &= A_3 \cdot F + B_3 \cdot N_1 + C_3 \cdot N_2 \\ N_4 &= A_4 \cdot F + B_4 \cdot N_1 + C_4 \cdot N_2 \end{aligned} \quad (2)$$

Коэффициенты А, В и С вычисляются с учетом схемы аппроксимации потоков в ячейке.

Теперь разобьем исходную ячейку на две части по каждой грани. Получим 4 подъячейки, в каждой из которых решаем уравнение переноса и находим значения выходящих потоков. На рис. 2 эти потоки обозначены стрелочками и для каждой подъячейки подписан выходящий поток с каждой грани.

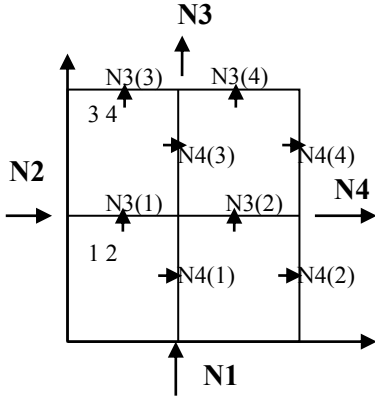


Рис. 2. Разбиение двумерной ячейки на 4 подъячейки (2 по каждому направлению)

При этом предполагается, что правые части и значения входящих потоков на гранях постоянны, и свойства всех подъячеек (2 внутри исходной ячейки) одинаковы. А значения, которые мы получим на выходах из каждой подъячейки, будут входящими значениями для следующих по направлению подъячеек.

Чтобы находить значения потоков последовательно во всех подъячейках, можно использовать формулы (2). Таким образом, можно получить последовательность формул для выражения значений на неосвещенных гранях через известные значения на освещенных гранях. Далее можем продолжать такое разбиение, вообще говоря, до бесконечности.

Получив значения на выходе из ячейки, мы можем по уравнению баланса рассчитать значения в центре ячейки. Таким образом, получается общая картина распределения потоков в области решения.

### TFS подход в одномерном случае

Описанный подход был применен к построению схемы решения уравнения переноса в одномерном декартовом случае. В этом случае  $\text{div}(\vec{\Omega} \cdot N) = \mu \frac{\partial N}{\partial x}$ , тогда из уравнения (1) получим уравнение

$$\mu \frac{\partial N}{\partial x} + \alpha N = F. \quad (3)$$

Выполним аппроксимацию уравнения (3) по трехточечному шаблону (DD-схема второго порядка

аппроксимации [2]): в производной по пространству возьмем разность значений на входе и выходе из ячейки, а в центре возьмем среднее арифметическое этих значений. Шаблон DD-схемы изображен на рис. 3.

$$\mu \frac{N_1 - N_0}{\Delta x} + \alpha N_{1/2} = F$$

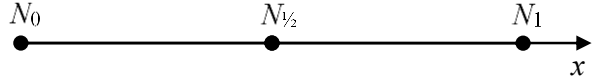


Рис. 3. Шаблон DD-схемы

Значение в центре определяется по соотношению:

$$N_{1/2} = \frac{1}{2}(N_0 + N_1) \Rightarrow N_1 = 2N_{1/2} - N_0 \quad (4)$$

Подставляем дополнительное соотношение (4) в уравнение баланса и выражаем значение потока нейтронов в центре ячейки:

$$\mu \frac{2 \cdot (N_{1/2} - N_0)}{\Delta x} + \alpha N_{1/2} = F$$

$$N_{1/2} \left( \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha \right) - \mu \frac{2 \cdot N_0}{\Delta x} = F \Rightarrow N_{1/2} \left( \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha \right) = F + \mu \frac{2 \cdot N_0}{\Delta x}$$

$$\left( \frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha \right) = F + \mu \frac{2 \cdot N_0}{\Delta x} \Rightarrow N_{1/2} = \frac{F + \mu \frac{2 \cdot N_0}{\Delta x}}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha}$$

Подставляем полученное центральное значение в дополнительные соотношения:

$$N_1 = 2 \cdot \frac{F + \mu \frac{2 \cdot N_0}{\Delta x}}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha} - N_0. \quad (5)$$

Группируя коэффициенты, можно прийти к уравнению вида

$$N_1 = A + CN_0,$$

где

$$A = 2 \cdot \frac{F}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha}, \quad A = 2 \cdot \frac{F}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha}, \quad C = \frac{\mu \frac{2}{\Delta x} - \alpha}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha}, \quad C = \frac{\mu \frac{2}{\Delta x} - \alpha}{\frac{2 \cdot \mu}{\Delta x} + \alpha} \quad (6)$$

Это зависимость выходящего значения от входящего для одной ячейки.

DD-схема положительна при условии  $h \leq \frac{|\mu|}{\alpha}$ .

С помощью разбиения ячейки на множество подъячеек можно уменьшить шаг настолько, что условие будет выполняться, и таким образом схема окажется положительной. Следуя идее TFS-подхода, разобьем исходную ячейку на несколько подъячеек и будем

последовательно находить в них решение. При этом решение, полученное на выходе из первой ячейки, будет граничным условием на входе во вторую и так далее по направлению бегущего счета.

Найдем выходящие потоки из  $K$  последовательных подъячеек. Обозначим  $N_{1(K)}$  значение на выходе из ячейки, разбитой на  $K$  подъячеек.

$$N_{1(2)} = A + CN_1 = A + C(A + CN_0) = A(1 + C) + C^2 N_0$$

$$N_{1(3)} = A + CN_2 = A + C(A(1 + C) + C^2 N_0) =$$

$$= A(1 + C + C^2) + C^3 N_0$$

...

$$N_{1(K)} = A(1 + C + \dots + C^{K-1}) + C^K N_0$$

$$N_{1(K)} = A \frac{1 - C^K}{1 - C} + C^K N_0$$

Таким образом, мы получили выражения, с помощью которых можно получить значение на выходе из ячейки как для конечного, так и для бесконечного количества разбиений ячейки. Случай бесконечного количества разбиений далее будем называть предельным.

### TFS подход в двумерном случае

На примере внутренней сетки с двумя и тремя разбиениями по каждой из сторон рассмотрим, как получаются коэффициенты для расчета значений потоков нейтронов на неосвещенных гранях.

На рис. 4 представлены ячейки, разбитые по каждой стороне на 2, рис. 4, а, и 3, рис. 4, б, разбиения. На них выделен предпоследний «слой» внутренней сетки. Значения выходящих потоков, полученные для этого «слоя», используются для получения значения на выходе из исходной ячейки. В случае двух разбиений для расчета значений в под-

ячейках 2, 3 и 4 используются значения, полученные для неосвещенных граней ячейки 1. В случае трех разбиений для получения значений в ячейках 5, 6, 7, 8 и 9 используются значения потоков на неосвещенных гранях, полученных для ячейки, состоящей из подъячеек 1, 2, 3 и 4. То есть, в формулах используются средние значения на гранях «большой ячейки», объединяющей ячейки 1, 2, 3 и 4.

Всякий раз при увеличении количества разбиений необходимо будет получать значения с предыдущего «слоя» внутренней сетки. Таким образом, структура программы для вычисления значений в случае конечного числа разбиений предполагает расчет значений для всех разбиений, начиная с одного.

Запишем коэффициенты для уравнения (2):

$$A_3 = A_4 = \frac{1}{\chi_3 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha}$$

$$B_3 = \frac{-\left(\chi_1 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha\right)}{\chi_3 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha} \quad B_4 = \frac{-(\chi_1 - \chi_3)}{\chi_3 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha}$$

$$C_3 = \frac{-(\chi_2 - \chi_4)}{\chi_3 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha} \quad C_4 = \frac{-\left(\chi_2 + \chi_3 + \frac{1}{2} m\alpha\right)}{\chi_3 + \chi_4 + \frac{1}{2} m\alpha}$$

Если увеличивать количество разбиений, то в этом случае можно проследить некую закономерность в развитии коэффициентов у значений. Эту закономерность можно обобщить так, как показано в формулах ниже:

$$N_3^{(k)} = A_3^{(k)} mF + B_3^{(k)} N_1 + C_3^{(k)} N_2 +$$

$$+ D_3^{(k)} N_3^{(k-1)} + E_3^{(k)} N_4^{(k-1)}$$

$$N_4^{(k)} = A_4^{(k)} mF + B_4^{(k)} N_1 + C_4^{(k)} N_2 +$$

$$+ D_4^{(k)} N_3^{(k-1)} + E_4^{(k)} N_4^{(k-1)}$$

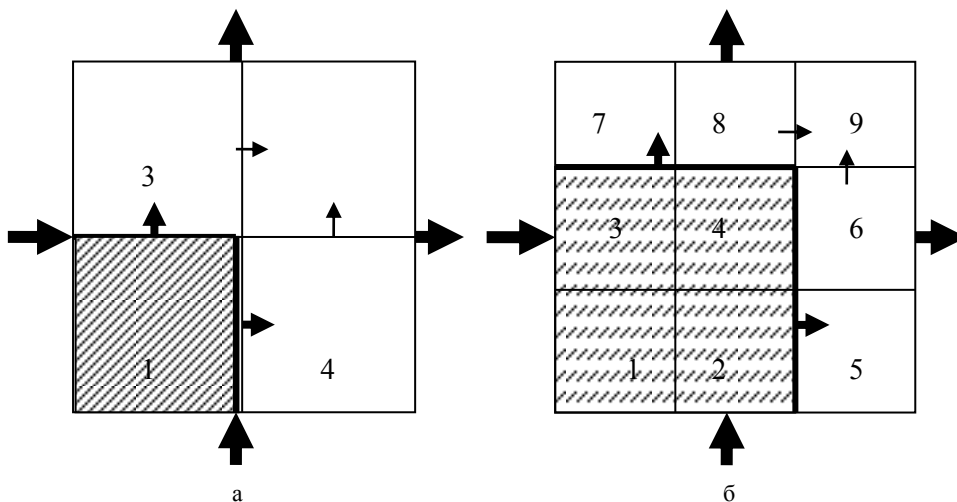


Рис. 4. Схемы расчета ячеек: а – с двумя разбиениями, б – с тремя разбиениями

И выпишем отдельно все полученные выражения для коэффициентов:

$$A_3^{(k)} = \frac{1}{k} A_3 \left( \sum_{i=0}^{k-1} \left( 1 + C_3 \sum_{j=0}^{i-1} C_4^j \right) + \sum_{i=0}^{k-1} B_3^i \right)$$

$$B_3^{(k)} = \frac{1}{k} B_3^k$$

$$C_3^{(k)} = \frac{1}{k} C_3 \sum_{i=0}^{k-1} C_4^i$$

$$D_3^{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=0}^{k-1} \left( B_3 + B_4 C_3 \sum_{j=0}^{i-1} C_4^j \right)$$

$$E_3^{(k)} = \frac{1}{k} B_3 C_3 \sum_{i=0}^{k-2} B_3^i$$

$$A_4^{(k)} = \frac{1}{k} A_4 \left( \sum_{i=0}^k \left( 1 + B_4 \sum_{j=0}^{i-1} B_3^j \right) + \sum_{i=0}^{k-1} C_4^i \right)$$

$$B_4^{(k)} = \frac{1}{k} B_4 \sum_{i=0}^{k-1} B_3^i$$

$$C_4^{(k)} = \frac{1}{k} C_4^k$$

$$D_4^{(k)} = \frac{1}{k} B_4 C_4 \sum_{i=0}^{k-2} C_4^i$$

$$E_4^{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=0}^{k-1} \left( C_4 + B_4 C_3 \sum_{j=0}^{i-1} B_3^j \right)$$

Однако эти формулы выражают достаточно сложную зависимость, при реализации которой придется хранить значения потоков на неосвещенных гранях каждого предыдущего «слоя» внутренней сетки. Нас интересует исходный вид уравнений (немного видоизменим обозначения коэффициентов, чтобы не путать с только что полученными):

$$\begin{aligned} N_3^{(k)} &= \tilde{A}_3^{(k)} \cdot mF + \tilde{B}_3^{(k)} \cdot N_1 + \tilde{C}_3^{(k)} \cdot N_2 \\ N_4^{(k)} &= \tilde{A}_4^{(k)} \cdot mF + \tilde{B}_4^{(k)} \cdot N_1 + \tilde{C}_4^{(k)} \cdot N_2 \end{aligned} \quad (8)$$

Последовательные подстановки приводят к следующим выражениям для коэффициентов  $A$ :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_3^{(k)} &= A_3^{(k)} + D_3^{(k)} \cdot \tilde{A}_3^{(k-1)} + E_3^{(k)} \cdot \tilde{A}_4^{(k-1)} \\ \tilde{A}_4^{(k)} &= A_4^{(k)} + D_4^{(k)} \cdot \tilde{A}_3^{(k-1)} + E_4^{(k)} \cdot \tilde{A}_4^{(k-1)} \end{aligned} \quad (9)$$

Аналогично получается и для коэффициентов  $B$  и  $C$ .

Данная рекурсивная зависимость реализуется в программе с помощью цикла по количеству разбиений.

### Одномерный случай

В одномерном случае метод был протестирован на задаче Рида [2, 3]. Расчеты проводились с использованием TFS-подхода для конечного и бесконечного количества разбиений. Стоит отметить, что ни один из этих вариантов метода не приводит к сколько-нибудь существенному удорожанию счета, так как расчет значений на выходе из ячейки производится по заранее известной формуле, в которой меняется только количество разбиений.

Рассматривается плоскопараллельная одномерная область, состоящая из 5 подобластей с разными параметрами. Граничные условия: зеркало с левой стороны, с правой стороны свободная граница. По угловой переменной взято 16 разбиений. На рис. 5 приведены геометрия и параметры расчетной системы.

Расчеты проводились на пространственных сетках различного размера – от 0,5 см до 0,03125 см. В качестве результата рассматривается скалярный поток  $n(0)$ .

Для подтверждения правильности результатов, получаемых при применении новой схемы, было проведено сравнение этих результатов с результатами, получаемыми при использовании стандартного подхода на разных сетках по пространству. На рис. 6 приведены расчетные профили плотности частиц на разных сетках.

Также для разных сеток в данной задаче был рассчитан интегральный показатель – количество актов взаимодействия в системе. Данный показатель рассчитывается как проинтегрированное по объему произведение плотности частиц на сечение взаимодействия.

$$KV = \int_V \alpha n^{(0)} dV. \quad (10)$$

Интеграл берется по объему всей системы, в которой решается задача. На основе этого показателя можно исследовать сходимость схемы TFS.

Возьмем в качестве точного решения значение количества взаимодействий в системе, полученное с помощью схемы TFS на сетке с шагом порядка 0,001, который в 10 раз меньше шага самой мелкой сетки из тех, на которых были проведены расчеты, результаты которых представлены на рис. 6.

В таблице приведены значения количества взаимодействий, полученные с использованием TFS-схемы с конечным и бесконечным количеством раз-



Рис. 5. Геометрия и параметры расчетной системы

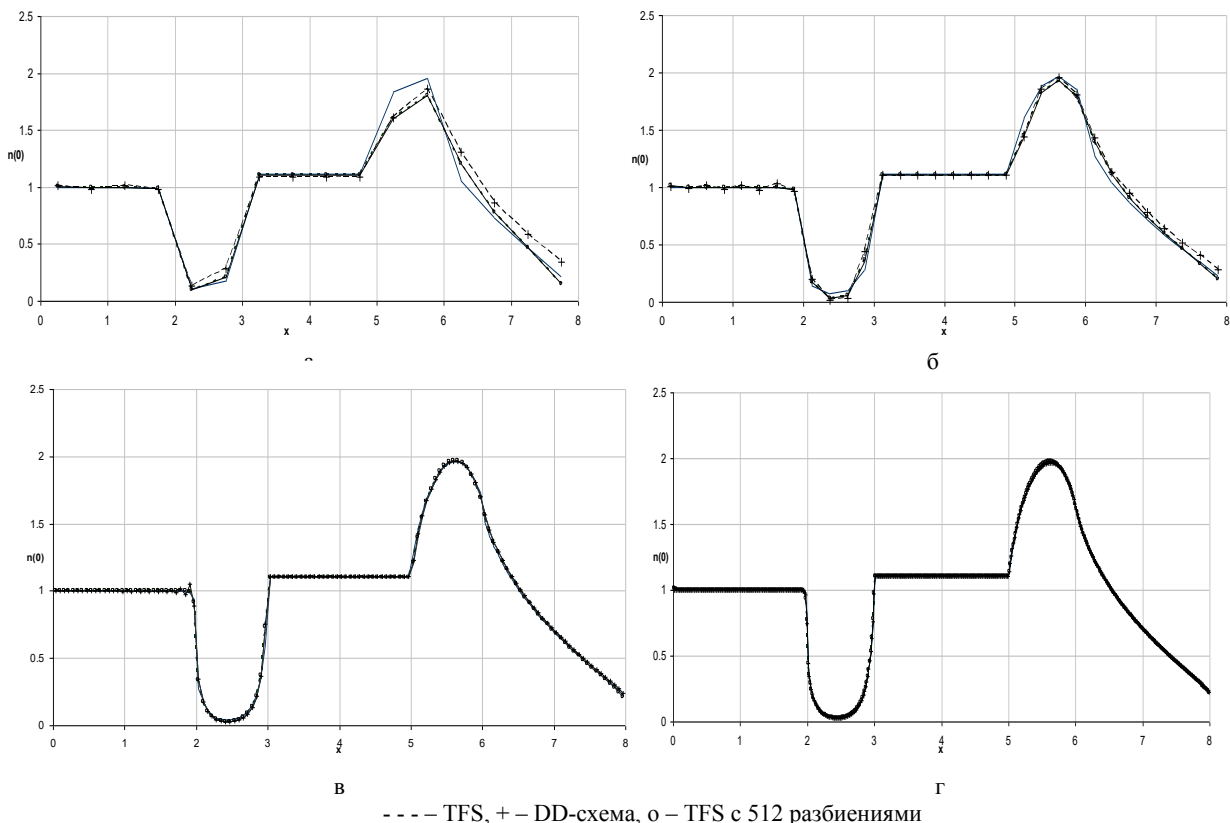


Рис. 6. Расчетные профили плотности частиц для теста Риды на сетке: а – результат на сетке с шагом 0,5; б – результат на сетке с шагом 0,25; в – результат на сетке с шагом 0,0625; г – результат на сетке с шагом 0,015625

Количество взаимодействий для задачи Риды на разных сетках

| Шаг сетки | TFS-схема в предельном случае | TFS-схема 512 разбиений | DD-схема | Погрешность           |                   |
|-----------|-------------------------------|-------------------------|----------|-----------------------|-------------------|
|           |                               |                         |          | TFS предельный случай | TFS 512 разбиений |
| 0,5       | 103,7022                      | 103,708                 | 104,365  | 0,389346              | 0,393715          |
| 0,25      | 103,9177                      | 103,925                 | 104,152  | 0,173849              | 0,176796          |
| 0,125     | 104,0112                      | 104,0194                | 104,0962 | 0,080364              | 0,082359          |
| 0,0625    | 104,0535                      | 104,0622                | 104,0921 | 0,038106              | 0,039509          |
| 0,03125   | 104,0734                      | 104,0826                | 104,0924 | 0,018179              | 0,01912           |
| 0,015625  | 104,083                       | 104,0927                | 104,0925 | 0,00852               | 0,00908           |
| 0,001563  | 104,0916                      | 104,1018                | 104,0925 | 0                     | 0                 |

биений, а так же, для сравнения, – значения, полученные с использованием DD-схемы (с балансным занулением), которая является стандартной для многих методик.

По определению сходимости [4] разностное решение  $N(x)$  сходится к точному  $N^*$ , если  $\|N(x) - N^*\| \rightarrow 0$  при уменьшении шага сетки ( $h \rightarrow 0$ ).

Рассчитаем для каждой сетки значение погрешности. Погрешность схемы на какой-либо сетке определим как модуль разности между точным решением и значением, полученным на этой сетке.

В таблице приведены значения погрешностей, полученных как модуль разности значений количества разбиений, полученного с использованием TFS-схемы с конечным (равным 512) и бесконечным ко-

личеством разбиений. Погрешности рассчитывались относительно значений на самой мелкой сетке для TFS-схемы с конечным и бесконечным количеством разбиений, а также относительно значения для DD-схемы на самой мелкой сетке.

Из таблицы видно, что интегральный показатель для схемы TFS в случае конечного количества разбиений отличается от показателя, полученного с помощью DD-схемы, сильнее, чем в предельном случае. Сходимость к значению самой схемы TFS на самой мелкой сетке примерно такая же, как и в предельном случае

Двумерный случай

Для тестирования двумерного варианта метода TFS была выбрана задача, поставленная по мотивам задачи из [2], в качестве решения в ней рассматрива-

ется распределение нейтронов между областью с источником и поглощающей областью. Рассматривалась двумерная квадратная область со стороной 16 см. В центре большого квадрата – меньший квадрат со стороной 8 см. На рис. 7 приведена схема расчетной области задачи. Во внутренней области находится источник нейтронов.

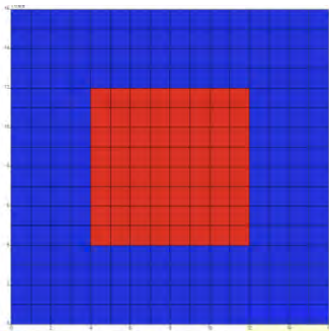


Рис. 7. Схема расчетной области задачи

Задача решалась на нескольких сетках – от  $16 \times 16$  до  $240 \times 240$  ячеек. В качестве результата рассматривались распределения плотности нейтронов по областям. Для получения решения производился расчет Кэфф методом Келлога, итерации сводились для одной попытки с фиксированным источником

деления. Величина источника деления одинакова для всех сеток. Таким образом, моделировалось стационарное распространение нейтронов от объемного источника. Полученное с помощью новой схемы аппроксимации решение сравнивалось с решением, полученным стандартным способом по DD-схеме и St-схеме (1 порядка аппроксимации). Для подхода TFS рассматривалось несколько вариантов количества разбиений ячейки – 10, 100 и 1000.

Полученные результаты (приведены на рис. 8 для двух сеток) демонстрируют сходимость решения, полученного с применением подхода TFS. Еще можно отметить, что на грубых сетках DD-схема дает немонотонное решение, а в случае применения схемы, построенной по методу TFS, решение не имеет немонотонностей.

Также для исследования предложенного подхода по сравнению с другими подходами был рассмотрен интегральный показатель – количество нейтронов. Количество нейтронов определяется как интеграл потока частиц по объему ячейки. Точнее, мы рассмотрели погрешность количества нейтронов, полученного на каждой из сеток относительно количества нейтронов, полученного при расчете на самой мелкой сетке. Т. е. взяв для каждой схемы за «эталонное» значение то значение, которое было получено на самой мелкой сетке.

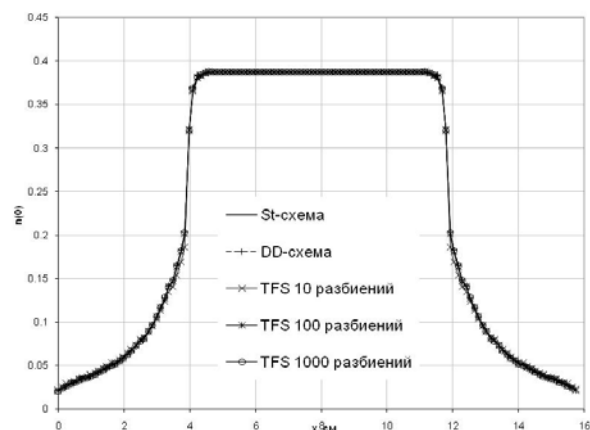
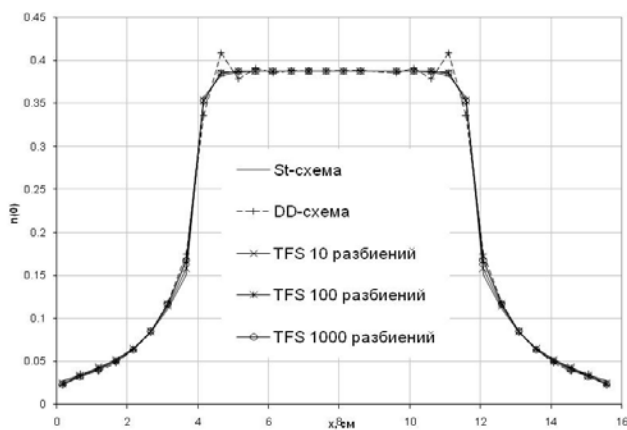


Рис. 8. Результаты на сетках  $16 \times 16$  и  $240 \times 240$  ячеек

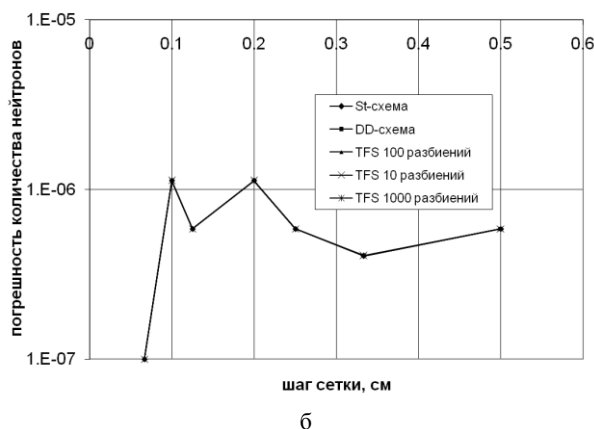
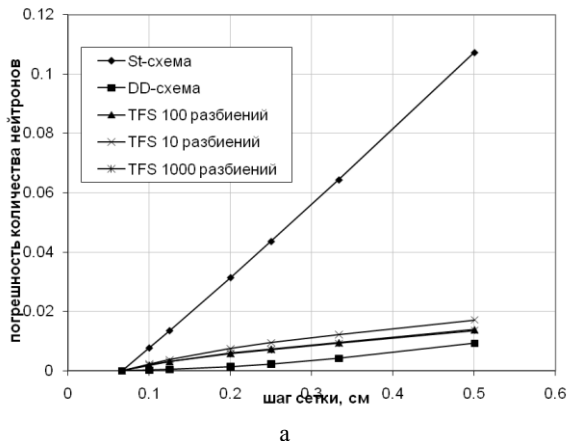


Рис. 9. Результаты для погрешности количества нейтронов: а – погрешности для внешней области, б – погрешности для внутренней области

Отдельно рассмотрели погрешности во внутренней и внешней областях. На рис. 9 представлены результаты для погрешности количества нейтронов. Для внешней области видим сходимость с уменьшением размера сетки, и видно, что погрешности для подхода TFS ближе к погрешностям DD-схемы второго порядка точности. Так же заметно, что увеличение количества разбиений тоже уменьшает погрешность. Во внутренней области все погрешности совпадают и имеют небольшие значения.

### **Заключение**

Расчеты показали, что описанный в данном докладе подход работоспособен для случая одномерного стационарного уравнения переноса и для двумерного в декартовой прямоугольной системе координат. Полученная схема обладает положительностью

и показала свойство монотонности на представленных задачах.

В дальнейшем планируется обобщить схему на случай нестационарного уравнения.

### **Литература**

1. Гичук А. В. Численные методы теории переноса. Учебно-методическое пособие. Саров, 2011.
2. Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения // препринт Ин. прикл. матем. им. В. М. Келдыша АН СССР, 1986.
3. Reed W. H. New difference schemes for the neutron transport equation. Nucl. Sci. Eng., 1971, 46, № 2, 309–314.
4. Калиткин Н. Н. Численные методы: Учеб. Пособие. М.: Наука, 1978.