

СХЕМЫ ТИПА TVD ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ДЕКАРТОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

С. К. Барабанов

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

Введение

Для численного решения кинетического уравнения, описывающего процесс переноса частиц, широкое распространение получили схемы DS_n -метода [1]. Такие схемы относятся к линейным схемам и имеют порядок точности близкий ко второму, что, как известно, делает эти схемы немонотонными [2]. Для проведения расчетов с порядком выше 1-го при одновременном отсутствии в результатах нефизических осцилляций следует рассматривать другие классы разностных схем, например, нелинейные схемы. В настоящее время широко применяются схемы повышенного порядка аппроксимации, построенные на основе принципа невозрастания полной вариации решения или TVD-схемы (Total Variation Diminishing) [3–5].

В работах [6–8] на основе TVD-методологии были созданы схемы для решения задач переноса на регулярных сетках. Целью данной работы является адаптация этих TVD-схем для произвольных выпуклых многоугольных ячеек неструктурированной сетки в задачах переноса частиц. Эти схемы были реализованы в комплексе CONCORD [9] в рамках модуля KEFFALL, с помощью которого в данном комплексе решается двумерное уравнение переноса нейтронов в декартовой системе координат.

1. Постановка задачи

Рассмотрим двумерное стационарное кинетическое уравнение переноса нейтронов в одногрупповом приближении, записанное в декартовой системе координат:

$$\operatorname{div}(\bar{\Omega}N) + \alpha N = F, \quad (1)$$

где

$$\operatorname{div}(\bar{\Omega}N) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi N \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi N \right);$$

$F = \frac{1}{2\pi} (\beta n^{(0)} + Q)$ – правая часть кинетического

уравнения; $n^{(0)} = \int \int_0^{2\pi} N d\varphi d\mu$; x, y – координаты по-

ложения частиц в пространстве; $\alpha(x, y)$ – коэффициент поглощения частиц; $\beta(x, y)$ – коэффициент размножения частиц; $Q(x, y)$ – независимый источ-

ник частиц; $N = N(x, y, \mu, \varphi)$ – плотность потока частиц в точке (x, y) , летящих в направлении $\bar{\Omega}$; $\bar{\Omega}(\mu, \varphi)$ – единичный вектор, указывающий направление полета частицы; $\mu = \cos \theta$, θ – угол между $\bar{\Omega}$ и осью \vec{z} ; φ – угол между проекцией $\bar{\Omega}$ на плоскость xu и осью x .

Данное уравнение решается в области фазового пространства $D = \{(x, y) \in L, 0 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ и дополняется граничным условием на внешней поверхности $N(x, y, \mu, \varphi)_{(x, y) \in \Gamma} = \psi(x_\Gamma, y_\Gamma, \mu, \varphi)$, где Γ – внешняя граница L ; \bar{n} – внешняя нормаль к Γ ; $\psi(x_\Gamma, y_\Gamma, \mu, \varphi)$ – заданная функция (поток).

В результате конечно-разностной аппроксимации уравнение (1) примет вид:

$$\sum_{l=1}^k \chi_l N_l + S \alpha N_0 = SF,$$

где k – число сторон или узлов ячейки;

$\chi_l = \sqrt{1-\mu_\omega^2} (\cos \varphi_{q(\omega)} (y_{l+1} - y_l) - \sin \varphi_{q(\omega)} (x_{l+1} - x_l))$, узел с индексом $(l+1) > k$ соответствует узлу с индексом 1; S – площадь ячейки; $n^{(0)} = \sum_{\omega} \sum_{q(\omega)} N_0 \Delta \varphi_{q(\omega)} \Delta \mu_{\omega}$.

Ячейка представляет собой произвольный выпуклый многоугольник (рис. 1).

Для некоторого заданного направления полета частиц $\bar{\Omega}$ в ячейке определяются известные и неизвестные величины. Обозначим освещенными сторонами те, у которых $\chi_l < 0$, а неосвещенными те, у которых, соответственно, $\chi_l \geq 0$. Граничные условия задаются на сторонах ячейки, для которых $\chi_l < 0$ (N_1, N_2, N_3). Поток на сторонах ячейки, для которых $\chi_l \geq 0$ (N_4, N_5), а также решение в центре ячейки (N_0) являются искомыми величинами. Для возможности решения уравнения (1) необходимо иметь столько дополнительных соотношений, чтобы получить замкнутую систему уравнений. Обычно, в качестве таких выступают соотношения, связывающие искомое решение $N(x, y, \mu, \varphi)$ в центре ячейки с решениями на серединах неосвещенных сторонах. Число

дополнительных соотношений определяется числом неосвещенных сторон.

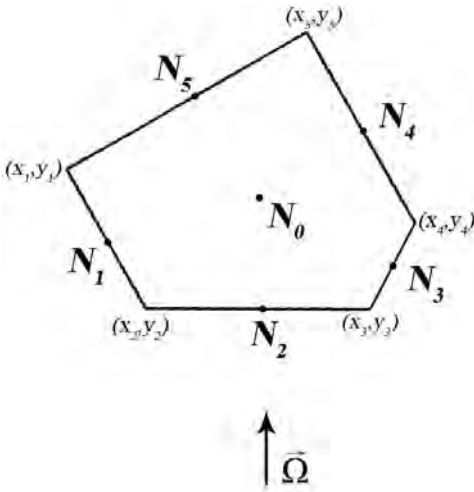


Рис. 1. Представление многоугольной ячейки на примере пятиугольника

В работах [6–8] для схем типа *TVD* таким дополнительным соотношением является:

$$N_l = D_l N_0, \quad (2)$$

где D_l – некоторый коэффициент, определяющий величину градиента решения. Градиент нужно определить таким образом, чтобы не нарушить условие устойчивости разностной схемы и чтобы численное решение имело свойства аналогичные свойствам исходной задачи. В результате величина градиента определяется с использованием некоторых функций-ограничителей L (Limiters), которые рассчитываются на основе односторонних производных. В *TVD*-схемах вводятся такие ограничители, чтобы схема имела 2-й (или выше) порядок аппроксимации и сохраняла при этом монотонность в смысле *TVD*.

Подставляя соотношение (2) в уравнение (1), получим в общем виде уравнение (в многогрупповом приближении – систему уравнений), содержащее одно неизвестное N_0 , которое после преобразования полученного уравнения находится по формуле:

$$N_0 = \frac{SF - \sum_{\chi_l < 0} \chi_l N_l}{S\alpha + \sum_{\chi_l \geq 0} \chi_l D_l}. \quad (3)$$

После нахождения N_0 по формуле (3) находятся искомые значения потоков на сторонах.

Рассмотрим теперь вариант определения коэффициентов D_l для уравнения (3) применительно к неструктурированной сетке.

2. Определение коэффициента D , учитывающего неравномерность и кривизну пространственной сетки

В общем виде коэффициент D в *TVD*-схемах находится по следующей формуле:

$$D_l = 1 + \frac{h_0}{2N_0} L(a, b),$$

где L – ограничитель, определяемый на основе производных:

$$a = \frac{N_0 - N_{-1}}{0,5(h_0 + h_{-1})}, \quad b = \frac{N_1 - N_0}{0,5(h_1 + h_0)}.$$

На рис. 2 показан пример взаимного расположения величин N_{-1} , N_0 , N_1 для неосвещенной стороны i .

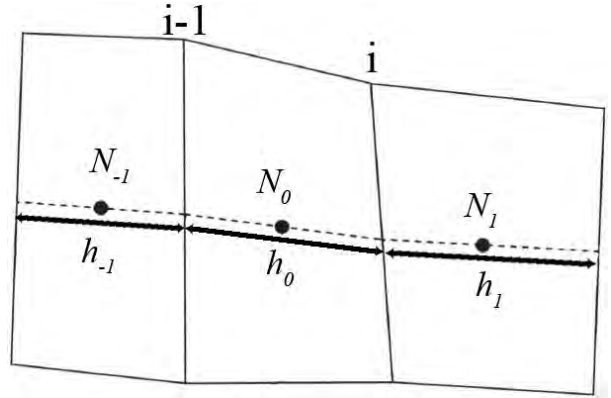


Рис. 2. Фрагмент некоторой сетки

В схеме, которая рассматривается в данной работе (условно назовем ее *TVD_I*), значения N_1 и N_{-1} ищутся с помощью интерполяции. А также находятся соответствующие расстояния h для определения ограничителей. Таким образом, учитывается кривизна неструктурированных сеток, в которых могут присутствовать ячейки различных форм и размеров.

Для пояснения *TVD_I*-схемы рассмотрим рис. 3.

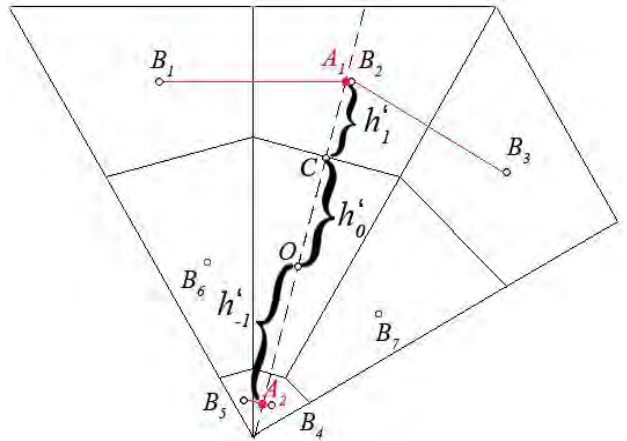


Рис. 3. Фрагмент неструктурированной сетки со схемой интерполяции значений N_1 и N_{-1}

Точка O – центр ячейки, в которой ищется значение N (обозначим N_0). В качестве примера допустим, что сторона с серединой в точке C не освещена. Необходимо определить значения производных a и b для нахождения ограничителя L и, затем, коэффициента D .

Для начала проведем прямую OC . Найдем точку пересечения прямой OC с отрезками B_1B_2 и B_2B_3 . В рассматриваемом случае эта прямая пересекает отрезок B_1B_2 в точке A_1 . Аналогично определяем точку пересечения с отрезком B_4B_5 и находим точку A_2 . Обозначим точки $B_l (l = 1 \div 7)$ – середины соседних ячеек. Значения потока в них соответственно обозначаются N_{B_l} . Также обозначим N_{A_1} как значение потока N_1 в точке A_1 , а N_{A_2} – значение N_{-1} в точке A_2 .

Путем линейной интерполяции определяем значения функций в точках пересечения:

$$N_{A_1} = N_{B_2} \frac{|A_1B_2|}{|B_1B_2|} + N_{B_1} \frac{|A_1B_1|}{|B_1B_2|},$$

$$N_{A_2} = N_{B_4} \frac{|A_2B_4|}{|B_4B_5|} + N_{B_5} \frac{|A_2B_5|}{|B_4B_5|}.$$

В результате, используя эти значения, вычислим коэффициент D для рассматриваемой стороны:

$$D = 1 + \frac{|OC|}{N_0} L \left(\frac{N_0 - N_{A_2}}{|OA_2|}, \frac{N_{A_1} - N_0}{|OA_1|} \right).$$

Выше рассматривалась ситуация, когда точка пересечения лежит между тремя соседями через сторону с точкой C . В общем же случае на неструктурированных сетках прямая OC может не пересекать ни отрезок B_1B_2 , ни B_2B_3 . Но при этом заметим, что для внутренних ячеек такая ситуация не означает, что не существует точки пересечения с другим отрезком. В таком случае работает другой алгоритм для поиска двух ячеек (ближайших к рассматриваемой), между центрами которых находилась бы точка пересечения с прямой OC . Обратимся к рис. 4.

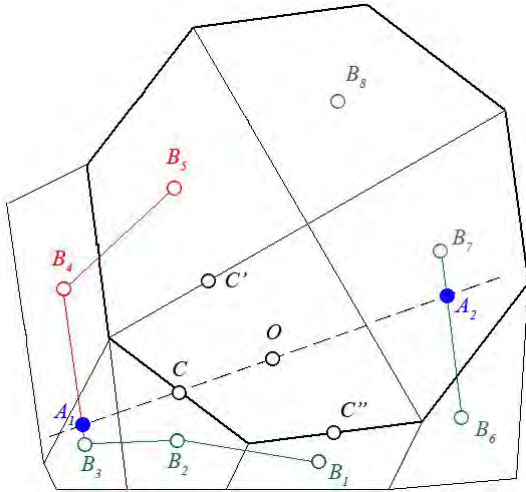


Рис. 4. Фрагмент сетки с алгоритмом поиска интерполяционных ячеек

Здесь в ячейке с центром в точке O также нужно искать точку пересечения прямой OC с отрезками, соединяющими центры ячеек, расположенных спереди рассматриваемой стороны (имеются ввиду три соседа, расположенных через сторону C). Но OC

здесь не пересекает отрезки B_1B_2 и B_2B_3 . В таком случае мы начинаем обход ячеек с правой стороны. То есть, начиная со стороны C' , начинаем обход соседних ячеек против часовой стрелки. Сначала проверяется, пересекает ли OC отрезок B_5B_4 , если нет, то переходим в ячейку B_4 , проверяем, пересекает ли OC отрезок B_4B_3 и так далее, и таким образом рано или поздно находим точку пересечения A_1 (в данном случае на пересечении OC и B_4B_3).

Аналогично можно определить значение N_{A_2} позади рассматриваемой стороны для поиска производной a . Единственное отличие обхода состоит в том, что начинается он через сторону левее (C'' на рис. 4) от рассматриваемой и дальше идет аналогично против часовой стрелки: сначала через ячейку B_1 , затем B_6 и так далее до нахождения точки пересечения.

Таким образом, данные алгоритмы позволяют разрешить уравнение (в многогрупповом приближении – систему уравнений) (3) на неструктурированных сетках, состоящих из произвольных выпуклых многоугольников.

3. TVD-ограничители

Монотонность и точность TVD-схемы определяются ограничителями. В работах [4, 10] были приведены и исследованы ограничители. Приведем некоторые из них в качестве примера:

- Ограничитель minmod:

$$L(a, b) = \frac{1}{2} (\text{sign}(a) + \text{sign}(b)) \min(|a|, |b|).$$

- Ограничитель Чакравати – Ошера:

$$L(a, b) = \frac{1-\delta}{2} \min \text{mod}(a, \beta b) + \frac{1+\delta}{2} \min \text{mod}(\beta a, b),$$

где δ – параметр, определяющий тип схемы и порядок аппроксимации; $0 \leq \beta \leq \frac{3-\delta}{1-\delta}$ – параметр сжатия.

- Ограничитель K-limiter:

$$L(a, b) = \frac{1}{2} (\text{sign}(a) + \text{sign}(b)) \min(2|a|, 2|b|, (1-k)|a| + k|b|),$$

$$0 \leq k \leq 1.$$

В данной работе будут приведены результаты расчетов с ограничителем K-limiter, как наиболее точные и эффективные.

4. Тестирование схем

Тестовая задача № 1 (исследование монотонности).

Данная тестовая задача представляет собой квадрат из U-233 разбитый на 128, 512, 2048 или 8192 прямоугольных ячеек.

В качестве результата рассматривается скалярный поток нейтронов $n^{(0)}$ вдоль горизонтальной оси, проходящей через центр системы. На рис. 5 показана

ны результаты, полученные по *DD*-схеме (слева) [11] и *TVD*-схеме (справа) для разного числа ячеек.

Как видно из представленных рисунков, по *TVD*-схеме получается монотонное решение.

Тестовая задача № 2.

Бенчмарк *C5G7MOX* [12] предназначен для расчета задачи реакторной решетки без использования пространственной гомогенизации в двумерной и трехмерной декартовых геометриях.

В качестве результата рассматривается значение k_{eff} . Поскольку этот бенчмарк не является реаль-

ной реакторной установкой (или критическим стендом), то в качестве точного решения выступает прецизионное решение, полученное по программе *MCNP* методом Монте-Карло.

Точность сходимости итераций в задаче задавалась 10^{-7} .

На рис. 6 приведена постановка задачи и фрагмент сетки ячейки *C5G7MOX* в двумерной *XY* геометрии для одной четверти активной зоны. В расчетах же использовалась полная геометрия (исключающая граничные условия отражения).

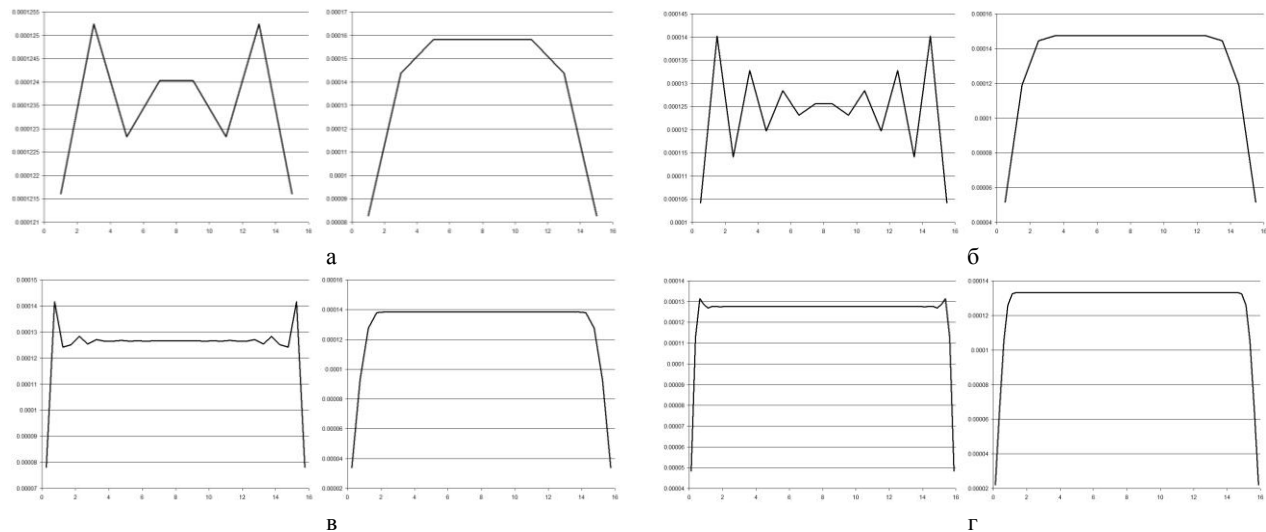


Рис. 5. Скалярный поток нейтронов в квадрате, разбитом на: а – 128 ячеек, б – 512 ячеек, в – 2048 ячеек, г – 8192 ячейки

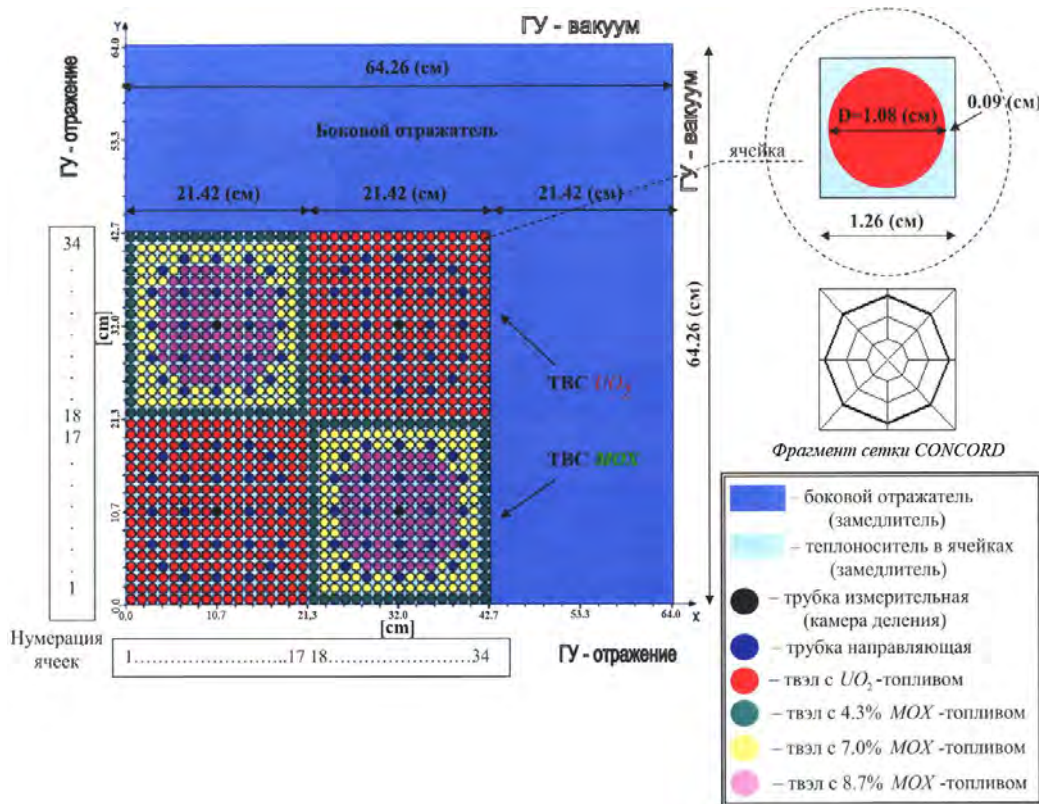


Рис. 6. Геометрия бенчмарка *C5G7MOX*

В табл. 1 приведены результаты проведенных вычислений. Также отметим, что, наравне с результатами расчетов в режиме без ускорения, также приведены результаты расчетов с использованием *КМ*-метода ускорения сведения итераций [13].

Таблица 1

Результаты расчетов тестовой задачи № 2

Схема \ Режим	Без поправок	КМ-поправки
<i>DS_n</i> -схема	1,18534208	1,18534208
<i>TVD</i> -схема	1,18491229	1,18491226
Монте-Карло	1,186550	

Из табл. 1 видно, что отклонение результатов, полученных по *TVD*-схеме от:

- *DS_n*-схемы не превышает 0,04 %;
- метода Монте-Карло не превышает 0,14 %.

В табл. 2 приведены времена работы программ, а также количество внешних попыток (для сходимости k_{eff}) и полное число внутренних итераций (внутри попыток), полученных в ходе расчетов.

Таблица 2

Характеристики работы схем расчета тестовой задачи № 2

Характеристика \ Схема и режим	Время расчета	Попытки \ Итерации
<i>DS_n</i> -схема	7 h. 55 m. 54 s.	233 \ 8468
<i>TVD</i> -схема	12 h. 39 m. 36 s.	230 \ 8313
<i>DS_n</i> -схема + <i>КМ</i>	17 h. 9 m. 34 s.	207 \ 14348
<i>TVD</i> -схема + <i>КМ</i>	4 h. 36 m. 13 s.	210 \ 1904

Из табл. 2 видно, что *TVD*-схема работает дольше, потому что присутствуют дополнительные вычисления в виде пересчета коэффициентов D на каждой итерации. Но заметим, что *DS_n*-схема в режиме с использованием поправок показала очень большое время работы. Дело в том, что в силу немоности этой схемы совместно с методами ускорения итераций могут возникать осцилляции решения на последовательных внутренних итерациях, вследствие чего увеличивается число итераций для достижения сходимости. В *TVD*-схеме же таких ситуаций не возникает.

Заключение

В работе рассмотрена схема типа *TVD* для решения уравнения переноса частиц в декартовой системе координат на неструктурированных сетках. Данная схема была реализована в программном комплексе CONCORD, проведены численные исследо-

вания и сравнительный анализ *TVD*-схемы со схемой *DS_n*-метода. *TVD*-схема обеспечивает монотонное положительное решение, что позволяет заметно сократить число итераций при использовании *КМ*-метода.

В дальнейшем будут продолжены работы по оптимизации рассмотренной схемы в части уменьшения времени счета задач в рамках программы CONCORD.

Литература

1. Трошиев В. Е., Шумилин А. В. Разностная схема решения двумерного уравнения переноса на нерегулярных четырехугольных сетках // Вычислительная математика и математическая физика. 1986. Т. 26, № 2. С. 230–241.
2. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Мат. сборник. 1959. Т. 47, № 3. С. 271–306.
3. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // Journal of Computational Physics. 1983. Vol. 49. P. 347–393.
4. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.
5. Osher S., Chacravarty S. A new class of high resolution *TVD* schemes for hyperbolic conservation laws // AIAA. 1985.
6. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А., Завьялов В. В. 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.
7. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А., Завьялов В. В. Применение *TVD*-подхода к *DS_n*-методу решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной *RZ*-геометрии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 2. С. 30–39.
8. Арсентьев А. П., Писарев В. Н. Особенности применения *TVD*-подхода к *DS_n*-методу решения трехмерного уравнения переноса нейтронов в криволинейной системе координат // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 25–39.
9. Алексеев А. В., Касаткин С. С., Бочков А. И. Комплекс программ расчета ячеечных констант CONCORD. Параллельная версия // Нейтронно-физические и теплофизические проблемы ядерной энергетики «Нейтроника-2011». Обнинск, 24–26 октября 2011 г.
10. Чирков Д. В., Черный С. Г. Сравнение точности и сходимости некоторых *TVD*-схем // Вычислительные технологии. 2000. Т. 5, № 5.

11. Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения // препринт ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1986.

12. Kin Hong-Chul, Han Chi Young, Kim Long Kyung. TWODANT solutions for the 2-D C5G7 MOX

benchmark // Progress in Nuclear Energy. 2004. Vol. 45, № 2–4. P. 201–213.

13. Федотова Л. П., Шагалиев Р. М. Конечно-разностный *КМ*-метод для двумерных нестационарных процессов переноса в многогрупповом кинетическом приближении // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 6.