

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951505309_2022_27_1_78

DS_n -метод решения трехмерного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат

Сформулирован метод численного решения трехмерного нестационарного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Конечно-разностная аппроксимация уравнения выполнена на пространственно-трехмерных регулярных сетках, строится по схеме с дополнительными соотношениями и является консервативной. Для решения полученной системы сеточных уравнений разработан алгоритм, основанный на алгоритме «бегущего счета». Приведены результаты тестирования данного метода на модельной задаче.

А. И. Бочков, В. В. Сучкова

Введение

В работе [1] изложен DS_n -метод решения двумерного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Метод основан на конечно-разностной аппроксимации уравнения переноса на произвольных четырехугольных пространственных сетках по схеме с дополнительными соотношениями. Для решения полученной системы сеточных уравнений разработан алгоритм, основанный на алгоритме бегущего счета [2].

Проведенные численные исследования [1] показали, что данный метод может являться эффективным средством борьбы с лучевыми эффектами [3, 4], возникающими при решении двумерных осесимметричных задач переноса частиц.

В настоящей работе предложен DS_n -метод численного решения трехмерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Конечно-разностная аппроксимация уравнения строится на пространственно-трехмерных регулярных сетках по схеме с дополнительными соотношениями и является консервативной. Приведен алгоритм численного решения полученной системы сеточных уравнений. На примере решения одной модельной задачи продемонстрированы преимущества данного метода по сравнению с решением уравнения переноса в цилиндрической системе координат.

Постановка задачи

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{N}{v} \right) + \operatorname{div}(\vec{\Omega}N) + \alpha N = F; \quad (1)$$

$$\operatorname{div}(\vec{\Omega}N) = \frac{\mu}{R^2} \frac{\partial(R^2 N)}{\partial R} + \frac{\xi}{R \sin \theta} \frac{\partial(\sin \theta N)}{\partial \theta} + \frac{\eta}{R \sin \theta} \frac{\partial N}{\partial \Phi} + \frac{1}{R} \frac{\partial((1-\mu^2)N)}{\partial \mu} - \frac{\operatorname{ctg} \theta}{R} \frac{\partial(\eta N)}{\partial \Phi};$$

$$F = \frac{1}{4\pi} (\beta n^{(0)} + Q), \quad n^{(0)} = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} N d\varphi.$$

Здесь t – время; θ , R и Φ – 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} ; Φ – угол между проекцией радиуса-вектора \vec{R} на плоскость, перпендикулярную оси \vec{z} ; $v(\theta, R, \Phi, t)$ – скорость частиц; $\alpha(\theta, R, \Phi, t)$, $\beta(\theta, R, \Phi, t)$ – коэффициенты поглощения и размножения частиц соответственно; $Q(\theta, R, \Phi, t)$ – внешний источник частиц; $F(\theta, R, \Phi, t)$ – правая часть кинетического уравнения; $N = N(\theta, R, \Phi, t, \mu, \varphi)$ – плотность потока частиц в точке (θ, R, Φ, t) , летящих в направлении $\vec{\Omega}$; $\vec{\Omega}(\mu, \varphi)$ – единичный вектор в направлении полета частиц.

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

$$\theta = \arctg\left(\frac{r}{z}\right), \quad R = \sqrt{z^2 + r^2}, \quad (2)$$

а координаты по третьей переменной совпадают.

С каждой пространственной точкой с координатами (R, θ, Φ) для описания направлений полета частиц связана угловая система координат с центром в этой точке, 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 (z, R) и перпендикулярна \vec{R} : $\vec{R}_\perp = \vec{R} \times (\vec{R} \times \vec{z}) = \vec{R}(\vec{R}\vec{z}) - \vec{z}R$. Третья ось \vec{z}_\perp перпендикулярна первым двум осям, $\vec{z}_\perp = \vec{R} \times \vec{R}_\perp$. Плоскость, перпендикулярную радиусу-вектору \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.

¹ Здесь и далее по тексту следует различать R – расстояние от точки положения частицы до начала координат и r – расстояние от точки нахождения частицы до оси симметрии.

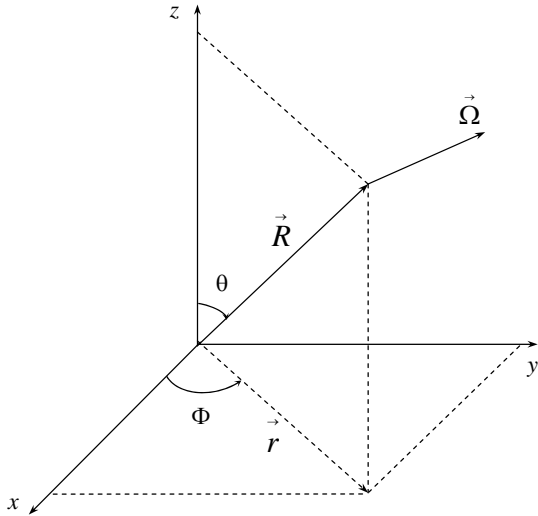


Рис. 1. Сферическая (R, θ, Φ) и цилиндрическая (r, z, Φ) системы координат

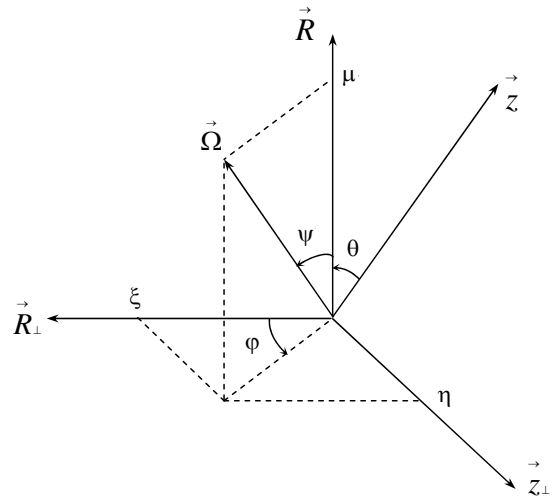


Рис. 2. Угловая система координат

Уравнение (1) решается в области фазового пространства $D = \{0 \leq t \leq T; (r, z) \in L(\Phi), \Phi_1 \leq \Phi \leq \Phi_2, -1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$, где $L(\Phi)$ – сечение тела вращения плоскостью, проходящей через ось симметрии \vec{z} ; Φ_1, Φ_2 – ограничивающие область решения сечения: $\Phi_1 = \text{const}, \Phi_2 = \text{const}, 0 \leq \Phi_1 \leq \Phi_2 \leq 2\pi$.

Начальное условие:

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

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

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

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

В случае $\Phi_1 = 0, \Phi_2 = 2\pi$ граничных условий, приведенных выше, достаточно для корректной постановки задачи. В случае наличия в трехмерном теле выреза необходимо задать также граничные условия и на торцах, т. е. при $\Phi = \Phi_1$ и $\Phi = \Phi_2$.

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

– при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$

$$\sin \varphi \frac{\partial N}{\partial \Phi} - \sin \varphi \cos \theta \frac{\partial N}{\partial \varphi} = 0;$$

– при $\mu = -1$

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

при $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$

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

Конечно-разностная аппроксимация

Аппроксимация по времени

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

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

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

Аппроксимация по угловым переменным μ и φ

В общем случае сетка по угловым переменным μ и φ строится следующим образом. На интервале $-1 \leq \mu \leq 1$ выбираются узловые значения переменной μ_ω ($0 \leq \omega \leq N_\mu$). Для каждого интервала $\hat{\omega}$ переменной μ интервал изменения переменной $\varphi \in [0, 2\pi]$ разбивается на подынтервалы $\varphi_{q(\hat{\omega})} \geq \varphi \geq \varphi_{q(\hat{\omega})+1}$ для $\varphi \in [0, \pi]$ и $\varphi_{q(\hat{\omega})} \leq \varphi \leq \varphi_{q(\hat{\omega})+1}$ для $\varphi \in [\pi, 2\pi]$ ($0 \leq q \leq 2N_{\hat{\omega}}$), где

$$\pi = \varphi_0 > \varphi_1 > \dots > \varphi_{N_{\hat{\omega}}} = \pi/2 > \varphi_{N_{\hat{\omega}}+1} > \dots > \varphi_{2N_{\hat{\omega}}} = 0 \quad \text{для } \varphi \in [0, \pi];$$

$$\pi = \varphi_0 < \varphi_1 < \dots < \varphi_{N_{\hat{\omega}}} = 3\pi/2 < \varphi_{N_{\hat{\omega}}+1} < \dots < \varphi_{2N_{\hat{\omega}}} = 2\pi \quad \text{для } \varphi \in [\pi, 2\pi];$$

N_μ – число интервалов по переменной μ , $4N_{\hat{\omega}}$ – число интервалов по переменной φ в $\hat{\omega}$ -м интервале по μ .

В работе [1] для аппроксимации уравнения по угловым переменным μ и φ рассматривались равномерные сетки и ES_n -квадратура. При этом по угловой переменной μ использовалась WDD -схема [5].

В данной статье дополнительно рассмотрим сочетание DD -схемы и равномерной сетки по переменным ψ (напомним, что $\mu = \cos \psi$) и φ .

В области изменения переменной $\psi \in [0, \pi]$ выбираются соответствующие одинаковой длине интервалов узловые значения переменной ψ_ω . Для каждого интервала $\hat{\omega}$ переменной $\psi(\mu)$ область изменения переменной φ разбивается на одинаковое число равных интервалов:

$$\begin{aligned} \psi_\omega &= \pi \left(1 - \frac{\omega}{N_\mu} \right), \quad \omega = 0, 1, \dots, N_\mu; \\ \mu_\omega &= \cos \psi_\omega, \quad \mu_{\hat{\omega}} = \cos \left(\frac{\psi_\omega + \psi_{\omega+1}}{2} \right); \\ \varphi_{q(\hat{\omega})} &= \pi \frac{2N_{\hat{\omega}} - q(\hat{\omega})}{2N_{\hat{\omega}}}, \quad q(\hat{\omega}) = 0, 1, \dots, 2N_{\hat{\omega}} \quad \text{для } \varphi \in [0, \pi]; \\ \varphi_{q(\hat{\omega})} &= \pi \frac{2N_{\hat{\omega}} + q(\hat{\omega})}{2N_{\hat{\omega}}}, \quad q(\hat{\omega}) = 0, 1, \dots, 2N_{\hat{\omega}} \quad \text{для } \varphi \in [\pi, 2\pi]. \end{aligned}$$

Для дальнейшей аппроксимации на каждом интервале определяется значение

$$\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} = \frac{\varphi_{q(\hat{\omega})+1} + \varphi_{q(\hat{\omega})}}{2}.$$

Производные по угловым переменным μ и φ аппроксимируются так же, как в двумерном случае [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left((1 - \mu^2) N \right)}{\partial \mu} &\approx \frac{W_{\omega+1}^\mu N_{\omega+1} - W_\omega^\mu N_\omega}{\Delta \mu_{\hat{\omega}}}, \quad \Delta \mu_{\hat{\omega}} = \mu_{\omega+1} - \mu_\omega; \\ \frac{\partial (\eta N)}{\partial \varphi} &\approx \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})+1}^\varphi N_{q(\hat{\omega})+1} - \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{q(\hat{\omega})}^\varphi N_{q(\hat{\omega})}}{\Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}, \quad \Delta \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} = \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})+1} - \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}. \end{aligned}$$

Значения коэффициентов W связаны со значениями $\mu_{\hat{\omega}}$ и $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$ следующими соотношениями, которые могут быть получены из условия выполнения свойства $\text{div}_h(\bar{\Omega}N) \equiv 0$ при $N = \text{const}$:

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

Аппроксимация по пространственным переменным

Для аппроксимации уравнения по пространственным переменным применим интегроинтерполяционный метод.

Сетка по пространственным переменным θ , R , Φ задается *цилиндрическими координатами* r , z , Φ вершин ячеек, а сферические и цилиндрические координаты связаны между собой соотношениями (2).

Область изменения переменной Φ разбивается на интервалы: $\Phi_s < \Phi < \Phi_{s+1}$, $s = 0, 1, \dots, \hat{s}$. В каждом сечении (*листе*) $\Phi = \Phi_s$ вводится регулярная, т. е. имеющая матричную структуру, четырехугольная сетка. Сетки, отвечающие разным сечениям, топологически эквивалентны, т. е. содержат одинаковое число строк и столбцов. Соединяя вершины соответствующих четырехугольников двух последовательных листов, получаем *слой* пространственных ячеек, на которых аппроксимируем уравнение переноса.

Рассмотрим счетную ячейку в пространстве (z, r, Φ) , вершины которой определены цилиндрическими координатами (рис. 3). Координаты z^{s+1} и r^{s+1} относятся к листу Φ_{s+1} , а координаты z^s и r^s – к листу Φ_s , $\Delta\Phi = \Phi_{s+1} - \Phi_s$. Грани трехмерной ячейки, лежащие в листах, называются основаниями, остальные грани – боковыми. Сеточные значения функции N определены в следующих точках: на основаниях (N_s^Φ, N_{s+1}^Φ), боковых гранях (N_l) и в центре ячейки (N_0).

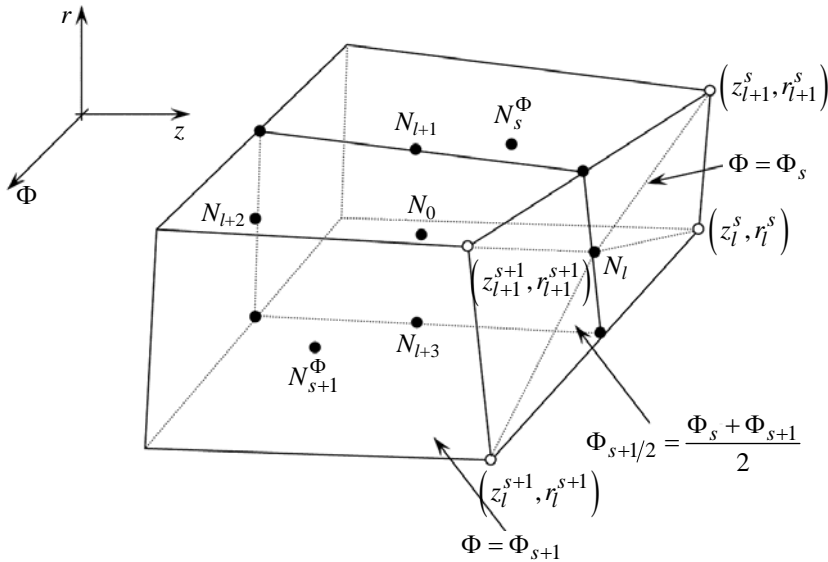


Рис. 3. Ячейка в пространстве (z, r, Φ)

В результате аппроксимации по времени и угловым переменным уравнение (1) примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\left(\frac{N}{v}\right)_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+1} - \left(\frac{N}{v}\right)_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^n}{\Delta t} + \frac{\mu_{\hat{\omega}}}{R^2} \frac{\partial \left(R^2 N_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma} \right)}{\partial R} + \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \cos \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{R \sin \theta} \frac{\partial \left(\sin \theta N_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})} \right)}{\partial \theta} + \\ & + \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \sin \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}}{R \sin \theta} \frac{\partial N_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma}}{\partial \Phi} + \frac{1}{R} \frac{W_{\omega+1}^\mu N_{\omega+1, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma} - W_\omega^\mu N_{\omega, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma}}{\mu_{\omega+1} \mu_\omega} - \\ & - \frac{\operatorname{ctg} \theta \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{\omega, q(\hat{\omega})+1}^\Phi - \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{\omega, q(\hat{\omega})}^\Phi N_{\omega, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma}}{\Phi_{q(\hat{\omega})+1} - \Phi_{q(\hat{\omega})}} + \alpha N_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma} = F_{\hat{\omega}, \hat{q}(\hat{\omega})}^{n+\gamma}. \end{aligned} \quad (3)$$

Умножим уравнение (3) на элемент объема $R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi$ и проинтегрируем по счетной ячейке. Далее воспользуемся формулой Остроградского и перейдем от интеграла по объему пространственной ячейки (V) к интегралу по замкнутой поверхности (S), ограничивающий этот объем (по границе ячейки).

В результате аппроксимации уравнение баланса частиц в счетной ячейке примет следующий вид:

$$V \frac{\left(\frac{N}{v}\right)^{n+1} - \left(\frac{N}{v}\right)^n}{\Delta t} + \left\{ \sum_{l=1}^4 \chi_l N_l + \left(\chi_{s+1}^\Phi N_{s+1}^\Phi + \chi_s^\Phi N_s^\Phi \right) + \left(\chi_{\omega+1}^\mu N_{\omega+1}^\mu + \chi_\omega^\mu N_\omega^\mu \right) + \left(\chi_{q+1}^\phi N_{q+1}^\phi + \chi_q^\phi N_q^\phi \right) \right\} + V \alpha N_0 = V F_0. \quad (4)$$

Здесь

$$V = \iiint r dz d\Phi \approx -\frac{\Delta\Phi}{72} \sum_{l=1}^4 \left\{ \left(r_{l+1}^s \right)^2 + r_{l+1}^s r_l^s + \left(r_l^s \right)^2 \right\} \left(3(z_{l+1}^s - z_l^s) + z_{l+1}^{s+1} - z_l^{s+1} \right) +$$

$$+ \left(\left(r_{l+1}^{s+1} \right)^2 + r_{l+1}^{s+1} r_l^{s+1} + \left(r_l^{s+1} \right)^2 \right) \left(3(z_{l+1}^{s+1} - z_l^{s+1}) + z_{l+1}^s - z_l^s \right) + \left(z_{l+1}^s - z_l^s + z_{l+1}^{s+1} - z_l^{s+1} \right) \times$$

$$\times \left(2(r_l^s r_l^{s+1} + r_{l+1}^s r_{l+1}^{s+1}) + r_l^s r_{l+1}^{s+1} + r_{l+1}^s r_l^{s+1} \right) \left. \right\} - \text{объем пространственной ячейки};$$

$$\Delta\Phi = \Phi_{s+1} - \Phi_s;$$

$$\chi_l = \mu_{\hat{\omega}} S_{\chi_l}^\mu - \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \cos \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} S_{\chi_l}^\xi + \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \sin \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} S_{\chi_l}^\eta, \quad \mu_{\hat{\omega}} \in [\mu_\omega; \mu_{\omega+1}], \quad \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \in [\varphi_{q(\hat{\omega})}; \varphi_{q(\hat{\omega}+1)}];$$

$$S_{\chi_l}^\mu = \frac{\Delta\Phi}{m} \frac{1}{2} \sum_{i=0}^m \int_{K_l(\Phi_i)} \sin \theta R^2 d\theta + \int_{K_l(\Phi_{i+1})} \sin \theta R^2 d\theta;$$

$$S_{\chi_l}^\xi = \frac{\Delta\Phi}{m} \frac{1}{2} \sum_{i=0}^m \int_{K_l(\Phi_i)} R \sin \theta dR + \int_{K_l(\Phi_{i+1})} R \sin \theta dR;$$

$$\int_{K_l(\Phi_i)} R \sin \theta dR = \frac{(r_{l+1} - r_l)(R_{l+1} - R_l) M_l}{L_l^2} - \frac{|z_{l+1} - z_l| M_l^2}{L_l^3} B_l;$$

$$\int_{K_l(\Phi_i)} R \sin \theta dR = \frac{(r_{l+1} - r_l)(R_{l+1} - R_l) M_l}{L_l^2} - \frac{|z_{l+1} - z_l| M_l^2}{L_l^3} B_l;$$

$$\int_{K_l(\Phi_i)} \sin \theta R^2 d\theta = \frac{1}{2} \left[R_{l+1} r_{l+1} - R_l r_l - \frac{(z_{l+1} - z_l)(R_{l+1} - R_l) M_l}{L_l^2} - \frac{|r_{l+1} - r_l| M_l^2}{L_l^3} C_l \right];$$

$$B_l = \ln \left| \frac{R_{l+1} |z_{l+1} - z_l| L_l + z_{l+1} L_l^2 - (r_{l+1} - r_l) M_l}{R_l |z_{l+1} - z_l| L_l + z_l L_l^2 - (r_{l+1} - r_l) M_l} \right|;$$

$$C_l = \ln \left| \frac{R_{l+1} |r_{l+1} - r_l| L_l + r_{l+1} L_l^2 - (z_{l+1} - z_l) M_l}{R_l |r_{l+1} - r_l| L_l + r_l L_l^2 + (z_{l+1} - z_l) M_l} \right|;$$

$$M_l = z_l r_{l+1} - r_l z_{l+1}; \quad L_l = \sqrt{(r_{l+1} - r_l)^2 + (z_{l+1} - z_l)^2};$$

$$z_l \equiv z_l(\Phi_i) = z_l^s + (\Phi_i - \Phi_s) \frac{z_l^{s+1} - z_l^s}{\Delta\Phi}; \quad r_l \equiv r_l(\Phi_i) = r_l^s + (\Phi_i - \Phi_s) \frac{r_l^{s+1} - r_l^s}{\Delta\Phi};$$

$$\Phi_i = \Phi_s + i \frac{\Delta\Phi}{m}, \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

m – число разбиений интервала $\Delta\Phi$ (на данный момент достаточным представляется $m = 100$);

$$S_{\chi_l}^{\eta} = -\frac{(r_{l+1}^s - r_l^{s+1})(z_{l+1}^{s+1} - z_l^s) - (z_{l+1}^s - z_l^{s+1})(r_{l+1}^{s+1} - r_l^s)}{2};$$

$$\chi_{\omega}^{\mu} = -\frac{W_{\omega}^{\mu}}{\Delta\mu_{\hat{\omega}}} S_{\mu}; \quad \chi_{\omega+1}^{\mu} = \frac{W_{\omega+1}^{\mu}}{\Delta\mu_{\hat{\omega}}} S_{\mu}; \quad \Delta\mu_{\hat{\omega}} = \mu_{\omega+1} - \mu_{\omega}; \quad S_{\mu} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^4 S_{\chi_l}^{\mu};$$

$$\chi_q^{\varphi} = \frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{\varphi}}{\Delta\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}} S_{\varphi}; \quad \chi_{q+1}^{\varphi} = -\frac{\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} W_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})+1}^{\varphi}}{\Delta\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}} S_{\varphi}; \quad \Delta\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} = \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})+1} - \varphi_{q(\hat{\omega})}; \quad S_{\varphi} = -\sum_{l=1}^4 S_{\chi_l}^{\xi};$$

$$\chi_s^{\varphi} = -\sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \sin \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} S_s^{\Phi}; \quad \chi_{s+1}^{\varphi} = \sqrt{1 - \mu_{\hat{\omega}}^2} \sin \varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} S_{s+1}^{\Phi};$$

S_s^{Φ} и S_{s+1}^{Φ} – площади оснований пространственной ячейки, расположенных на листах $\Phi = \Phi_s$ и $\Phi = \Phi_{s+1}$; N_l – среднее значение $N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma}$ на боковой грани пространственной ячейки, проходящей через точки (z_l^s, r_l^s) , (z_{l+1}^s, r_{l+1}^s) и (z_l^{s+1}, r_l^{s+1}) , $(z_{l+1}^{s+1}, r_{l+1}^{s+1})$; N_s^{Φ} и N_{s+1}^{Φ} – среднее значение $N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma}$ на торцевых гранях грани пространственной ячейки, расположенных в плоскостях $\Phi = \Phi_s$

и $\Phi = \Phi_{s+1}$; $N_0 = \frac{\iiint N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma} R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}$ – среднее значение искомой функции в центре ячейки фазового пространства;

$$\left(\frac{N}{\rho v}\right)^{n+1} = \frac{\iiint \left(\frac{N}{\rho v}\right)^{n+1}_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})} R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}; \quad \left(\frac{N}{\rho v}\right)^n = \frac{\iiint \left(\frac{N}{\rho v}\right)^n_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})} R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi};$$

$$N_q^{\varphi} = \frac{\iiint N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma} R \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R \cos \theta dR d\theta d\Phi}; \quad N_{q+1}^{\varphi} = \frac{\iiint N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})+1}^{n+\gamma} R \cos \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R \cos \theta dR d\theta d\Phi};$$

$$N_{\omega}^{\mu} = \frac{\iiint N_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma} R \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R \cos \theta dR d\theta d\Phi}; \quad N_{\omega+1}^{\mu} = \frac{\iiint N_{\hat{\omega}+1, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma} R \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R \sin \theta dR d\theta d\Phi};$$

$$F_0 = \frac{1}{4\pi} (\beta \bar{n}^{(0)} + \bar{Q}), \quad \bar{Q} = \frac{\iiint Q_{\hat{\omega}, q(\hat{\omega})}^{n+\gamma} R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}{\iiint R^2 \sin \theta dR d\theta d\Phi}; \quad \bar{n}^{(0)} = \sum_{\hat{\omega}} \sum_{\hat{q}(\hat{\omega})} N_0 \Delta\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})} \Delta\mu_{\hat{\omega}}.$$

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

Граничные условия на боковых гранях пространственной ячейки задаются при $\chi_l < 0$ ($(\bar{\Omega} \bar{n}) < 0$). На оси симметрии \vec{z} $\chi_l = 0$, так как площадь вращения стороны ячейки вокруг

оси \vec{z} равна нулю. Однако для организации бегущего счета [2] по пространственным ячейкам нужно знать знак $\vec{\Omega}\vec{n}$. Из геометрических соображений знак $(\vec{\Omega}\vec{n})$ на оси симметрии \vec{z} определяется значением функции

$$\text{sign}(\vec{\Omega}\vec{n}) = \text{sign}\left(\sqrt{1-\mu_{\omega}^2} \cos \varphi_{\hat{q}(\omega)} \left(\frac{R_l^s + R_l^{s+1}}{2} - \frac{R_{l+1}^s + R_{l+1}^{s+1}}{2}\right)\right).$$

Дополнительные соотношения

Для замыкания полученной системы разностных уравнений (4) ее необходимо дополнить соотношениями, связывающими значения искомой функции в разных точках фазового пространства. Для этого воспользуемся дополнительными соотношениями DS_n -метода:

– по переменной времени

$$\left(\frac{N}{v}\right)^{n+\gamma} = \gamma \left(\frac{N}{v}\right)^{n+1} + (1-\gamma) \left(\frac{N}{v}\right)^n;$$

– по угловым переменным

$$N_0 = \delta_{\mu_{\omega}} N_{\omega+1} + (1-\delta_{\mu_{\omega}}) N_{\omega}, \quad 0,5 \leq \delta_{\mu_{\omega}} \leq 1;$$

$$N_0 = \delta_{\varphi} N_{\chi^{\varphi}>0}^{\varphi} + (1-\delta_{\varphi}) N_{\chi^{\varphi}<0}^{\varphi}, \quad 0,5 \leq \delta_{\mu_{\omega}} \leq 1;$$

– по пространственной переменной Φ

$$N_0 = \delta_{\varphi} N_{\chi^{\varphi}>0}^{\varphi} + (1-\delta_{\varphi}) N_{\chi^{\varphi}<0}^{\varphi}, \quad 0,5 \leq \delta \leq 1.$$

Для замыкания системы разностных уравнений по пространственным переменным N_l используем дополнительные соотношения [6–8].

Число дополнительных соотношений и их вид определяется освещенностью боковых граней пространственной ячейки. Назовем освещенными боковые грани пространственной ячейки, на которых коэффициенты $\chi_l < 0$. Напротив, грани, где $\chi_l \geq 0$, будем называть неосвещенными.

В трехмерном случае существует шесть возможных вариантов освещенности боковых граней пространственной ячейки, изображенной на рис. 3.

1. Пусть для определенности освещены три боковые грани ячейки $l+1$, $l+2$ и $l+3$. В этом случае известны N_{l+1} , N_{l+2} , N_{l+3} и вводится одно дополнительное соотношение

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

2. Освещены две смежные грани l и $l+3$ – известны N_l и N_{l+3} . В этом случае вводятся следующие дополнительные соотношения:

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

3. Освещена только одна грань l (известно N_l). В этом случае используются дополнительные соотношения

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

4. Освещены две противоположные грани $l + 1$ и $l + 3$ – известны N_{l+1} и N_{l+3} . В этом случае вводятся следующие соотношения связи:

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

5. Не освещена ни одна из граней ячейки. Тогда

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

6. Освещены все стороны ячейки. В этом случае дополнительные соотношения 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 порядок аппроксимации, близкий ко второму.

Представленная разностная аппроксимация уравнения является консервативной относительно как переноса частиц, так и их взаимодействия со средой. При этом разностная схема при выборе весов аппроксимации (γ , δ , δ_φ и δ_{μ_ω}), отличных от единицы, является немонотонной, поэтому для обеспечения положительности сеточного решения применяется коррекция Латропа *zero fix up*, также известная как метод балансного зануления [7, 8].

Алгоритм численного решения

Разностные уравнения баланса, дополнительные соотношения по времени, угловым и пространственным 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 [2, 7], 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 тем, 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 лежат «справа» от оси \vec{r} ($z > 0$).

Для численного решения полученной системы сеточных уравнений пространственные ячейки разбиваются на две подобласти: ячейки, для которых $S_\varphi \geq 0$, и для которых $S_\varphi < 0$. Подобласти рассчитываются независимо друг от друга, обмениваясь между собой 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 μ_ω из множества заданных интервалов. Причем сначала рассчитывается «фиктивное» направление $\mu = -1$.

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 обхода 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 и в порядке возрастания $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$ от π до 2π . Для подобласти ячеек, где $S_{\varphi} < 0$, реализуется обратный порядок обхода 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 и в порядке убывания $\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}$ от 2π до π .

3. Для фиксированного направления полета частиц $(\varphi_{\hat{q}(\hat{\omega})}, \mu_{\hat{\omega}})$ расчет ячеек проводится последовательно по слоям (интервалам) переменной Φ . Причем для $\varphi \in [0, \pi]$ обход интервалов проводится в порядке возрастания Φ , а для $\varphi \in [0, 2\pi]$, наоборот, в порядке убывания.

4. В каждом слое по переменной Φ 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.

Заметим, что для трехмерного уравнения переноса в сферических координатах преобразование разностного оператора рассматриваемой системы сеточных уравнений к блочно-треугольному виду не всегда возможно. В связи с этим по аналогии с подходом, предложенным в работе [9], в общем случае для расчета всех ячеек подобласти в слое 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.

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

Результаты тестовых расчетов

Тестирование представленного метода решения трехмерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат, проводилось на примере стационарной двумерной задачи в однополовом приближении ($\nu = 1$). Геометрия задачи в плоскости (r, z) и значения коэффициентов поглощения и размножения приведены на рис. 4.

Особенностью данной задачи является неоднородность состава в системе, т. е. значения коэффициентов поглощения и размножения в разных половинах системы различны. В левой половине системы располагается оптически плотная среда ($\alpha = 10$) – вещество 1, в правой – оптически прозрачная ($\alpha = 0,001$) – вещество 2. В области, ограниченной радиусами 0,0–0,1 см, задается источник частиц $Q = 1$ (вещество 3), в остальной части системы $Q = 0$. Граничное условие – нулевой входящий поток.

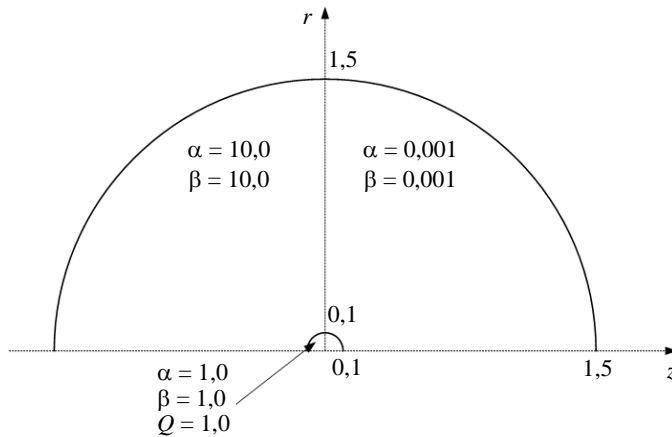


Рис. 4. Геометрия задачи в плоскости (r, z) и коэффициенты поглощения и размножения

Расчеты проводились в трехмерной постановке с геометрией, представленной на рис. 5. В качестве решения задачи рассматривалось число частиц по системе и отдельным веществам (областям), а также профили плотности потока частиц вдоль заданных линий. При этом за точное решение был принят результат, полученный в расчете в двумерной постановке в сферической системе координат при использовании равномерной сетки по угловым переменным ψ и φ с числом интервалов 256 и 130 соответственно.² В расчетах использовалась фиксированная равномерная пространственная сетка, состоящая из 270 строк, 270 столбцов и 270 слоев (19683000 ячеек).

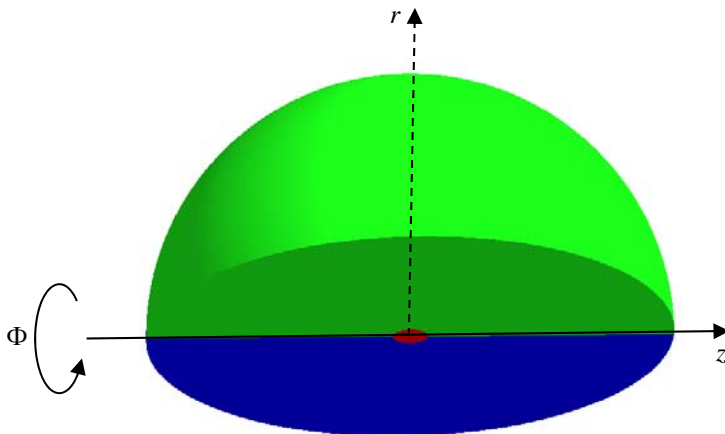


Рис. 5. Геометрия задачи в трехмерной постановке

Как известно, при решении осесимметричных задач в цилиндрической системе координат лучевые эффекты проявляются при использовании недостаточно подробной сетки по угловым переменным и уменьшаются по мере ее сгущения. Поэтому расчеты рассматриваемой тестовой задачи проводились на сгущающихся угловых сетках. При этом в расчетах в цилиндрической системе координат для аппроксимации по угловым переменным использовалась ES_n -квадратура, а в сферической системе координат применялась равномерная сетка по переменным ψ и φ в сочетании с DD -схемой.

² Здесь и далее число интервалов по угловой переменной φ приводится для интервала $[0, \pi]$.

Точность сведения итераций во всех расчетах задавалась равной 10^{-7} .

Представленные в табл. 1–3 данные демонстрируют, что при сгущении сетки по угловым переменным результаты расчетов сходятся к точному решению.

Таблица 1

Число частиц в расчете, принято за «точный»

Вещество	Число частиц
1 ($\alpha = 10, \beta = 10, Q = 0,0$)	$5,4530 \cdot 10^{-2}$
2 ($\alpha = 0,001, \beta = 0,001, Q = 0,0$)	$5,4896 \cdot 10^{-2}$
3 ($\alpha = 1,0, \beta = 1,0, Q = 1,0$)	$3,9144 \cdot 10^{-2}$
Вся система	$1,1334 \cdot 10^{-2}$

Таблица 2

Число частиц в расчетах на сетках, сгущающихся по угловым переменным

Вещество	Порядок ES_n -квadrатуры для цилиндрической системы координат или число интервалов по ψ (число интервалов по φ) для сферической системы координат		
	8(6)	16(10)	32(18)
Цилиндрическая система координат			
1	$5,8643 \cdot 10^{-2}$	$5,5948 \cdot 10^{-2}$	$5,4934 \cdot 10^{-2}$
2	$5,6599 \cdot 10^{-2}$	$5,5516 \cdot 10^{-2}$	$5,5090 \cdot 10^{-2}$
3	$3,9335 \cdot 10^{-2}$	$3,9199 \cdot 10^{-2}$	$3,9160 \cdot 10^{-2}$
Вся система	$1,1918 \cdot 10^{-2}$	$1,1538 \cdot 10^{-2}$	$1,1394 \cdot 10^{-2}$
Сферическая система координат			
1	$5,7400 \cdot 10^{-2}$	$5,5518 \cdot 10^{-2}$	$5,4844 \cdot 10^{-2}$
2	$5,6408 \cdot 10^{-2}$	$5,5439 \cdot 10^{-2}$	$5,5070 \cdot 10^{-2}$
3	$3,9199 \cdot 10^{-2}$	$3,9168 \cdot 10^{-2}$	$3,9154 \cdot 10^{-2}$
Вся система	$1,1773 \cdot 10^{-2}$	$1,1487 \cdot 10^{-2}$	$1,1383 \cdot 10^{-2}$

Таблица 3

Погрешность относительно точного решения, %

Вещество	Порядок ES_n -квadrатуры для цилиндрической системы координат или число интервалов по ψ (число интервалов по φ) для сферической системы координат		
	8(6)	16(10)	32(18)
Цилиндрическая система координат			
1	7,54	2,55	0,74
2	3,10	1,13	0,35
3	0,49	0,16	0,04
Вся система	5,15	1,78	0,53
Сферическая система координат			
1	5,26	1,81	0,58
2	2,75	0,99	0,32
3	0,14	0,06	0,03
Вся система	3,87	1,35	0,43

Профили плотности потока частиц снимались в двух плоскостях (рис. 6). Первая плоскость получена сечением геометрии системы плоскостью $z = 0$, проходящей между 135 и 136 столбцами всех слоев. Графики зависимости плотности потока частиц от пространственного угла строились для линии 1, проходившей по всем слоям для 144 строки и 136 столбца. Вторая полуплоскость, образованная плоскостями $\Phi = 0$ и $\Phi = \pi$, выделена на рис. 6 желтой пунктирной линией. Графики зависимости плотности потока частиц от пространственного угла строились для линии 2, проходившей по 144 строке по всем столбцам.

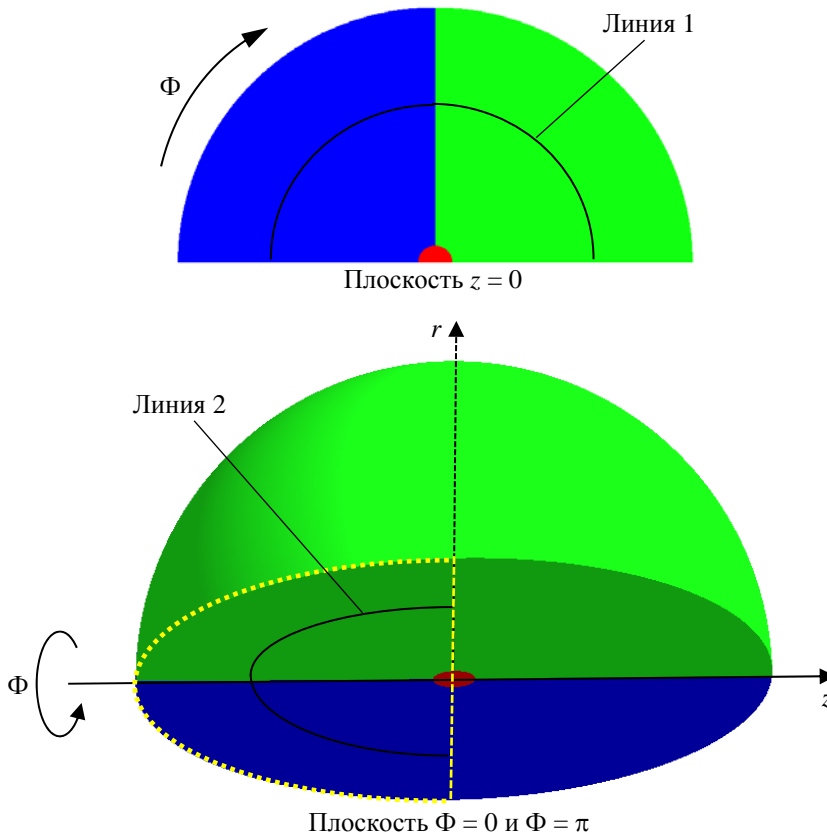


Рис. 6. Выделение линий 1 и 2, вдоль которых строились профили плотности потока частиц

На рис. 7, 8 приведены графики зависимости плотности потока частиц от косинуса пространственного угла вдоль выделенных линий, полученные в расчетах в цилиндрической и сферической системах координат на сгущающихся сетках по угловым переменным. Рисунки демонстрируют, что в пространственных распределениях плотности потока частиц, полученных в цилиндрической системе координат, наблюдаются ярко выраженные лучевые эффекты, для минимизации которых требуется еще более подробная сетка по угловым переменным, чем ES_{32} -квадратура. Особо отметим, что, хотя на графиках, построенных вдоль линии 1 в цилиндрической системе координат, отсутствуют выраженные осцилляции, наблюдаются значительное отличие от точного решения и немонотонная сходимость к точному решению. Это следствие проявления лучевых эффектов в каждом из слоев по переменной Φ . В зависимостях плотности потока частиц от пространственного угла в расчетах в сферической системе координат нефизические осцилляции даже на грубой сетке по угловым переменным практически отсутствуют.

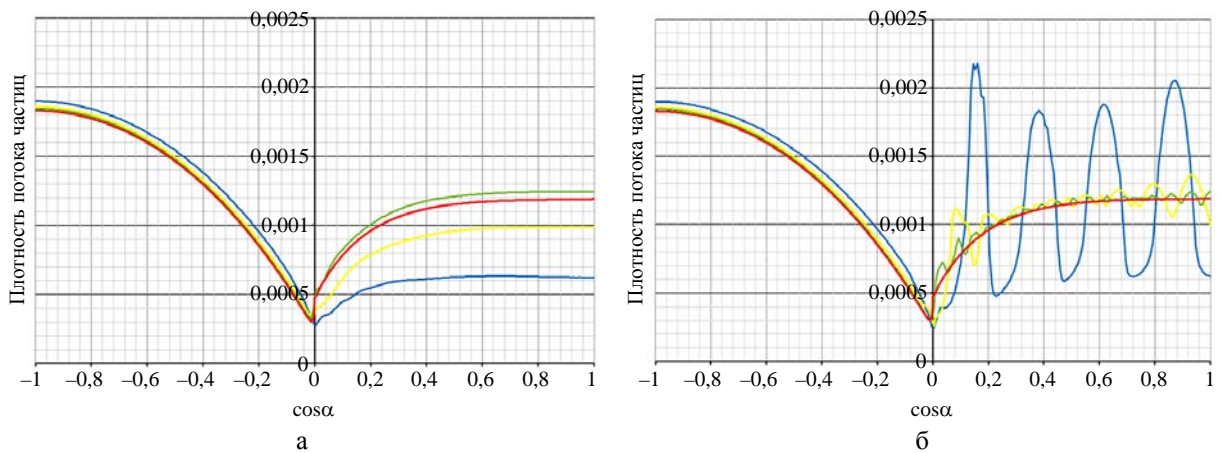


Рис. 7. Зависимость плотности потока частиц от пространственного угла в расчетах в цилиндрической системе координат вдоль линий 1 (а) и 2 (б): — ES_8 ; — ES_{16} ; — ES_{32} ; — точное решение

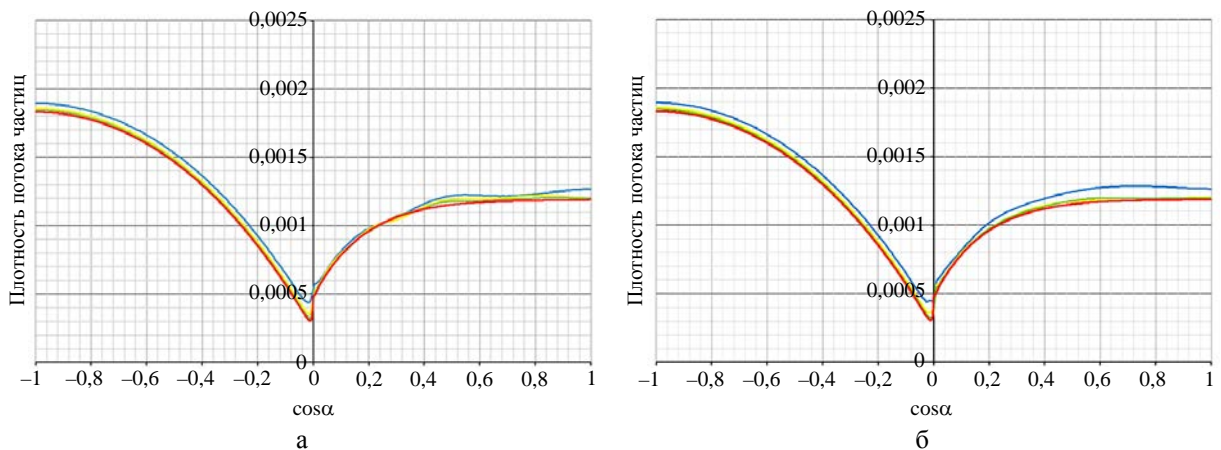


Рис. 8. Зависимость плотности потока частиц от пространственного угла в расчетах в сферической системе координат вдоль линий 1 (а) и 2 (б): — $N_\Psi = 8$, $N_\Phi = 6$; — $N_\Psi = 16$, $N_\Phi = 10$; — $N_\Psi = 32$, $N_\Phi = 18$; — точное решение

Заключение

В настоящей работе представлен DS_n -метод решения трехмерного уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Для решения полученной после аппроксимации системы разностных уравнений разработан алгоритм, основанный на методе бегущего счета.

Проведенные численные исследования показали, что для определенного класса задач предложенный метод решения трехмерных задач переноса является эффективным средством борьбы с лучевыми эффектами.

Список литературы

1. Бочков А. И., Сучкова В. В., Трубицын А. П. DS_n-метод решения двумерного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Матем. моделирование физ. процессов. 20011. Вып. 2. С. 44–55.
2. Трощиёв В. Е. О классах сеток, допускающих консервативные аппроксимации двумерного оператора переноса треугольным разностным оператором // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1976. Т. 16, № 3. С. 793–797.
3. Lathrop K. D. Ray-effects in discrete ordinates equations // Nucl. Sci. and Engin. 1968. Vol. 32, N 3. P. 357–369.
4. Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. – М.: ИПМ АН СССР, 1986.
5. Reed Wm. H., Lathrop K. D. Truncation error analysis of finite difference approximations to the transport equation // Nucl. Sci. and Engin. 1970. Vol. 41. P. 237–248.
6. Трощиёв В. Е., Шумилин В. А. Разностная схема решения двумерного уравнения переноса на нерегулярных четырехугольных сетках // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1986. Т. 26, № 2. С. 230–241.
7. Елесин В. А., Трощиёв 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.
8. Карлсон Б. Г., Латроп К. Д. Теория переноса. Метод дискретных ординат // Вычислительные методы в физике реакторов. – М.: Атомиздат, 1972.
9. Трощиёв В. Е. О математических свойствах DS_n-методов решения кинетических уравнений // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1975. Т. 15, № 5. С. 1209–1221.

A DS_n-Scheme for the 3D Kinetic Transport Equation in Spherical Coordinates

A. I. Bochkov, V. V. Suchkova

A scheme for the numerical solution of the 3D time-dependent transport equation written in spherical coordinates is presented. The finite-difference approximation to the equation is performed on spatial 3D regular grids and constructed using a scheme with additional relations, and it is conservative. To solve the resultant system of grid equations, an algorithm has been developed, which is based on the sweep method. Results of the method testing on a model problem are given.