

УДК 519.6:536.71

УЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ДИФФУЗИОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ РАСЧЕТА ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Н. Г. Карлыханов, М. Ю. Козманов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Рассматриваются два подхода для учета кинетических эффектов при расчете задач переноса излучения в приближении спектральной диффузии. Исследована область применимости рассматриваемых методик. Показано, что при выполнении определенных условий результаты расчетов, полученных с использованием предлагаемых подходов, близки к результатам расчетов, проведенных в кинетической постановке.

Ключевые слова: перенос излучения, спектральная квазидиффузия, спектральная диффузия, учет кинетических эффектов.

Введение

В данной работе рассматриваются два подхода для учета кинетических эффектов в спектральном диффузионном приближении. Расчет переноса излучения в диффузионной постановке обладает рядом преимуществ. Основные из них — это выполнение принципа максимума [1], простота построения монотонных разностных схем второго порядка точности для уравнений параболического типа, особенно в многомерном случае. Кроме того, имеется большое количество рабочих методик для расчета задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке. В этих методиках можно применить рассматриваемые подходы без существенных изменений в соответствующих программах. Эти подходы являются аналогом квазидиффузии [2] в том смысле, что эффективный пробег излучения определяется из расчета кинетического уравнения. Кинетическое уравнение рассчитывается один раз на шаге по известной температуре, взятой, например, с предыдущего шага [3].

Очевидно, что уравнениями параболического типа нельзя описать весь класс решений уравнений гиперболического типа. Проведенное исследование представленных подходов при решении ряда методических задач выявило ряд ограничений на класс решаемых задач. На этих задачах продемонстрировано, что результаты расчетов, полученных с использованием предлага-

емых подходов при выполнении определенных условий, близки к результатам расчетов, проведенных в кинетической постановке. При этом на расчет задач с использованием предлагаемых подходов требуется примерно то же время, что и на расчет в квазидиффузионной постановке.

Постановка задачи и методы ее решения

Коротко рассмотрим суть предлагаемых подходов. Для простоты рассмотрим кинетическое уравнение переноса излучения в сферическом одномерном случае без учета движения (плотность среды положим равной единице):

$$\frac{1}{c} \frac{\partial (I_\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial (\mu r^2 I_\varepsilon)}{r^2 \partial r} + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1 - \mu^2}{r} I_\varepsilon \right) + (\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s}) I_\varepsilon = \kappa_{\varepsilon a} I_{\varepsilon r} + \kappa_{\varepsilon s} \int_{-1}^1 I_\varepsilon d\mu. \quad (1)$$

Здесь используются стандартные обозначения: c — скорость света; t — время; r — пространственная координата; I_ε — интенсивность излучения с энергией ε ; μ — косинус угла полета фотона относительно нормали к поверхности сферы; $\kappa_{\varepsilon a}, \kappa_{\varepsilon s}$ — коэффициенты поглощения и рассеяния излучения соответственно; $I_{\varepsilon r}$ — интенсивность равновесного излучения.

Метод 1 (первый подход). Если проинтегрировать уравнение (1) дважды, сначала с весом 1, а затем с весом μ , то получится следующая система уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial r^2 S_\varepsilon}{r^2 \partial r} + c \kappa_{\varepsilon a} v_\varepsilon &= c \kappa_{\varepsilon a} v_{\varepsilon r}; \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial D_\varepsilon v_\varepsilon}{\partial r} + \frac{3D_\varepsilon - 1}{r} v_\varepsilon + \\ &+ \frac{1}{c} (\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s}) S_\varepsilon = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} v_\varepsilon &= \frac{1}{c} \int_{-1}^1 I_\varepsilon d\mu; & v_{\varepsilon r} &= \frac{1}{c} \int_{-1}^1 I_{\varepsilon r} d\mu; \\ S_\varepsilon &= \int_{-1}^1 \mu I_\varepsilon d\mu; \\ D_\varepsilon &= \frac{\int_{-1}^1 \mu^2 I_\varepsilon d\mu}{\int_{-1}^1 I_\varepsilon d\mu}. \end{aligned} \quad (3)$$

Система уравнений (2) является системой уравнений квазидиффузии. Запишем систему уравнений (2) в виде

$$\frac{\partial v_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial r^2 S_\varepsilon}{r^2 \partial r} + c \kappa_{\varepsilon a} v_\varepsilon = c \kappa_{\varepsilon a} v_{\varepsilon r}; \quad (4)$$

$$\frac{1}{3} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial r} + \frac{1}{c} (\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k}) S_\varepsilon = 0, \quad (5)$$

введя обозначение

$$\kappa_{\varepsilon k} = \frac{c}{S_\varepsilon} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial (D_\varepsilon - 1/3) v_\varepsilon}{\partial r} + \frac{3D_\varepsilon - 1}{r} v_\varepsilon \right).$$

В рассматриваемом случае величину $\kappa_{\varepsilon k}$ предлагается вычислять по значениям интенсивности излучения, полученным на промежуточном этапе, как это делается при квазидиффузионном расчете. При этом для решения уравнения (1) на промежуточном этапе можно использовать простую монотонную схему первого порядка точности, как это делается в [3].

Система уравнений (4), (5) в некотором смысле аналогична системе уравнений квазидиффузии, только вместо коэффициента квазидиффузии фигурирует $\kappa_{\varepsilon k}$. Данная величина, также как и коэффициент квазидиффузии, слабо зависит от исходного решения. Поскольку величина $(\kappa_{\varepsilon k})^{-1}$ имеет размерность пробега, то имеет

смысл назвать данный коэффициент *кинетическим пробегом*.

Если $\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k} \geq 0$, то система уравнений (4), (5) является системой параболического типа, для которой построены монотонные схемы второго порядка точности, что позволяет после несложной модификации использовать данный подход в уже существующих программах, реализующих спектральное диффузионное приближение.

Отметим, что коэффициент $\kappa_{\varepsilon k}$ может принимать отрицательные значения. В этом случае, когда $\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k} < 0$, уравнение (4) становится термодинамически неустойчивым, поэтому использовать его в расчетах не представляется возможным. Для обеспечения термодинамической устойчивости при проведении расчетов величину $\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k}$ полагаем равной нулю в том случае, когда она становится отрицательной.

Исследуем поведение величины $\kappa_{\varepsilon k}$. Очевидно, что в оптически плотных средах, где коэффициент квазидиффузии стремится к $1/3$, а производной от потока по времени можно пренебречь, $\kappa_{\varepsilon k} \rightarrow 0$. Можно показать, что положительность величины $\kappa_{\varepsilon k}$ будет тогда, когда знак потока и знак градиента плотности энергии совпадают.

Метод 2 (второй подход). Если в первом подходе к сумме коэффициентов поглощения и рассеяния прибавляется некоторая эффективная величина, то второй подход основан на введении множителя. Введем данный множитель следующим образом:

$$m_\varepsilon = \frac{S_{\varepsilon k}}{S_{\varepsilon d}},$$

где $S_{\varepsilon k}$ — поток излучения, рассчитанный на основе решения уравнения (1); $S_{\varepsilon d} = \frac{c}{3(\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s})} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial r}$ — диффузионный поток, рассчитанный по плотности энергии излучения v_ε . Плотность энергии излучения v_ε также рассчитывается на основе решения уравнения (1). Таким образом, m_ε является безразмерным множителем, который определяет, во сколько раз кинетический поток больше (меньше) диффузионного. Для множителя m_ε можно предположить, что по аналогии с коэффициентом квазидиффузии он будет слабо зависеть от исходного решения.

Таким образом, если диффузионный поток умножить на множитель m_ε , то получится кинетический поток. С учетом множителя m_ε си-

система уравнений спектральной диффузии примет вид

$$\frac{\partial v_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial r^2 S_\varepsilon}{r^2 \partial r} + c \kappa_{\varepsilon a} v_\varepsilon = c \kappa_{\varepsilon a} v_{\varepsilon r}; \quad (6)$$

$$S_\varepsilon = -m_\varepsilon \frac{c}{3(\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s})} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial r}. \quad (7)$$

Уравнения (6), (7) можно свести к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial t} - \frac{\partial}{r^2 \partial r} \left(r^2 m_\varepsilon \frac{c}{3(\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s})} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial r} \right) + \\ + c \kappa_{\varepsilon a} v_\varepsilon = c \kappa_{\varepsilon a} v_{\varepsilon r}. \end{aligned} \quad (8)$$

Множитель m_ε вычисляется так же, как и при первом подходе: по значениям интенсивности излучения, полученным на промежуточном этапе.

Если множитель m_ε положителен, то система уравнений (6), (7) и уравнение (8) будут уравнениями параболического типа со всеми вытекающими отсюда положительными свойствами. Положительность коэффициента m_ε гарантирована, как и в первом подходе, при условии, что знак потока совпадает со знаком градиента плотности энергии. Очевидно, что в оптически плотных средах $m_\varepsilon \rightarrow 1$. Если множитель m_ε меньше некоторой положительной константы m_{\min} , которая подбирается экспериментально, то данный множитель полагается равным этой константе. Полагать константу m_{\min} равной нулю нельзя, поскольку в этом случае поток энергии через границу ячейки невозможен, что физически не оправданно.

Отрицательное значение множителя m_ε приводит к термодинамической неустойчивости, поэтому использовать такое значение множителя при решении задач не представляется возможным. Сверху, как показала практика расчетов, множитель m_ε можно не ограничивать. Из вида формулы для вычисления множителя m_ε видно, что в отличие от первого подхода второй подход нельзя использовать в областях с нулевыми коэффициентами поглощения и рассеяния.

Для согласованности граничных условий в кинетическом приближении и в рассматриваемых подходах воспользуемся тем же приемом, что и в [3]. Запишем поток на левой границе (см. формулу (3)) в виде двух слагаемых:

$$S_\varepsilon = \int_0^1 \mu I_\varepsilon d\mu + \int_{-1}^0 \mu I_\varepsilon d\mu. \quad (9)$$

Первое слагаемое полностью определяется заданной граничной интенсивностью. Второе слагаемое запишем в виде дроби. Тогда выражение (9) примет следующий вид:

$$S_\varepsilon = \int_0^1 \mu I_\varepsilon d\mu + \frac{\int_{-1}^0 \mu I_\varepsilon d\mu}{\frac{1}{c} \int_{-1}^1 I_\varepsilon d\mu} v_\varepsilon.$$

Если ввести обозначения

$$\alpha_\varepsilon = \frac{\int_{-1}^0 \mu I_\varepsilon d\mu}{\frac{1}{c} \int_{-1}^1 I_\varepsilon d\mu}; \quad \beta_\varepsilon = \int_0^1 \mu I_\varepsilon d\mu,$$

то для уравнений (4)–(8) граничное условие на левой границе можно записать в следующем виде:

$$S_\varepsilon = \alpha_\varepsilon v_\varepsilon + \beta_\varepsilon.$$

Отметим, что значение коэффициента α_ε находится в интервале от 0,5 до 1.

На правой границе согласование граничных условий происходит аналогично.

Исследование методов на модельных задачах

Решим ряд методических задач с использованием описанных подходов и исследуем их влияние на полученное решение. Первые три задачи описывают распространение излучения в средах с нулевыми коэффициентами поглощения и рассеяния — их расчет возможен только по методу 1.

Задача 1. Рассчитывается распределение излучения в сферической системе с внутренним радиусом 0,4 см и наружным радиусом 4 см. На внутренней границе задан падающий поток равновесного излучения с температурой 1 кэВ, на внешней границе задано условие на свободной поверхности. Коэффициенты поглощения и рассеяния равны нулю.

Сетка по энергии имеет вид $\varepsilon = 0,0001; 0,02; 0,04; 0,06; 0,08; 0,1; 0,15; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,7; 1,0; 1,4; 1,8; 2,2; 2,6; 3,0; 3,5; 4,0; 4,5; 5,0; 5,5; 6,0; 7,0; 8,0; 10,0; 12,0; 15,0$ (кэВ). Сетка по пространству берется неравномерная. Вблизи внутренней и внешней границ интервал равен 10^{-4} . К середине системы размер ячейки увеличивается по

геометрической прогрессии. Всего в расчете задается 134 пространственных интервала. Сетка по угловой переменной — равномерная с числом углов 16.

Стационарное распределение температуры излучения в этой задаче описывается формулой

$$T_f = T_{lg} \sqrt[4]{1 - \sqrt{1 - \frac{r_{lg}^2}{r^2}}}.$$

Здесь T_{lg} — заданная температура на внутренней поверхности сферы с радиусом r_{lg} ; r — текущий радиус.

На рис. 1 представлена температура излучения, рассчитанная из уравнений квазидиффузии и по методу 1. Для этой задачи кинетический пробег во всех точках системы положителен. Хорошо видно, что в этом случае обе методики на одинаковых сетках дают одинаковое приближение к точному решению.

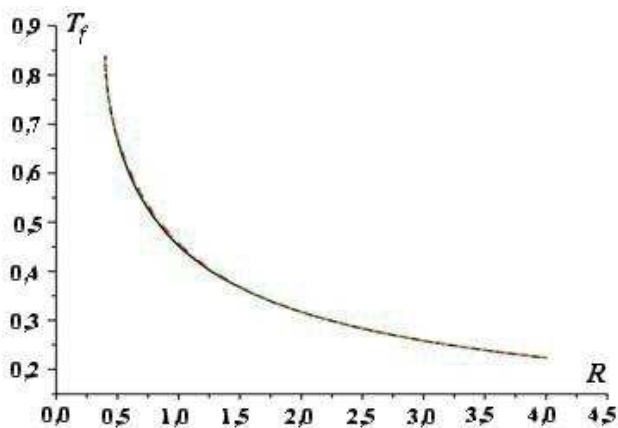


Рис. 1. Задача 1. Профили температуры излучения: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1

Задача 2. Рассматривается задача в плоской геометрии. В области по оси X от 0 до 7 задана подобласть $3 < X < 4$, где в нулевой момент времени определена изотропно распределенная интенсивность излучения с плотностью энергии излучения, равной 1. Коэффициенты поглощения и рассеяния равны нулю. Данная задача имеет аналитическое решение, полученное А. В. Вронским.

Задача рассчитывалась на равномерной сетке по пространству и угловой переменной в двух вариантах. В первом варианте бралось 175 интервалов по пространству и 8 направлений по угло-

вой переменной. Во втором варианте — 350 интервалов по пространству и 32 направления по углу. Шаг по времени в обоих вариантах выбирался из условия $\frac{ct}{\Delta X} = 0,5$. Расчеты проводились до момента времени $ct = 1,5$. Результаты расчетов представлены на рис. 2, где решение получено на грубой сетке, и на рис. 3, где решение получено на более подробной сетке.

Из рис. 2, 3 видно, что использование классической квазидиффузии дает немонотонное решение, в то время как предлагаемая методика дает монотонный профиль. Фронты обе методики описывают примерно одинаково. При расчете данной задачи по предлагаемой методике также не возникает отрицательных кинетических пробегов.

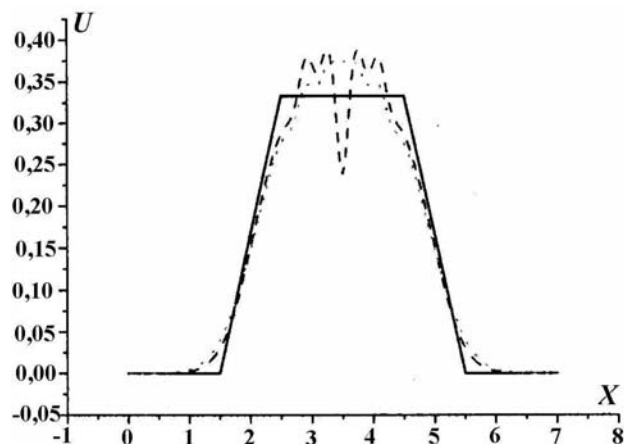


Рис. 2. Задача 2. Профили плотности энергии излучения: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1

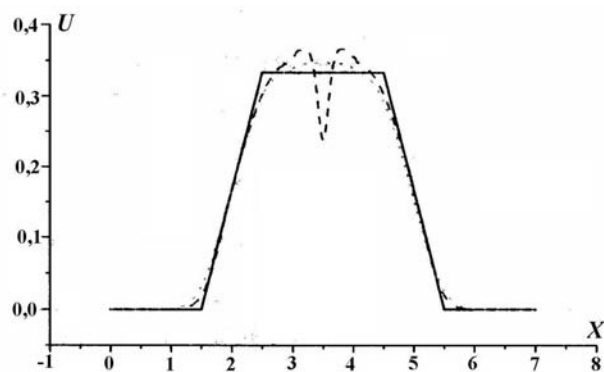


Рис. 3. Задача 2. Профили плотности энергии излучения: — — точное решение; - - - — решение, полученное по классической квазидиффузии; ··· — решение, полученное по методу 1

Задача 3. Рассматривается задача в сферической геометрии. В сферической области по R от 0 до 4 задана подобласть $0 < R < 1$, где в нулевой момент времени определена изотропно распределенная интенсивность излучения с плотностью энергии излучения, равной 1. Коэффициенты поглощения и рассеяния равны нулю. Данная задача имеет аналитическое решение, полученное А. В. Вронским.

Расчеты проводились на равномерной сетке по пространству со 100 интервалами. По угловой переменной бралось 32 направления. Результаты расчетов представлены на рис. 4, 5.

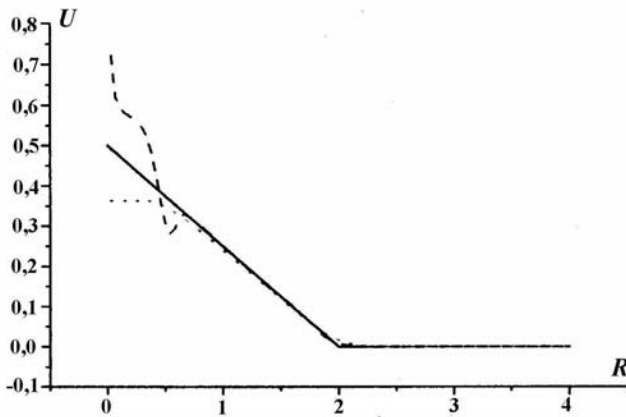


Рис. 4. Задача 3. Профили плотности энергии излучения на момент времени $ct = 1$: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1

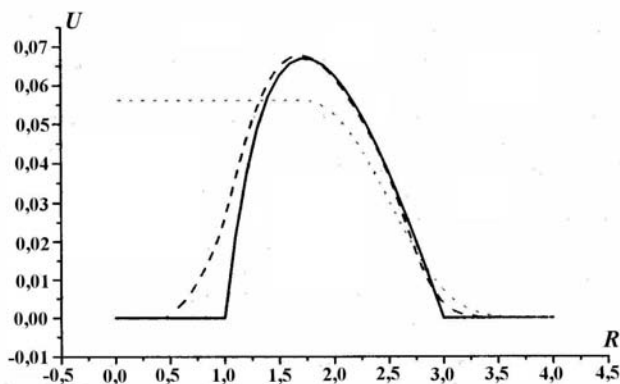


Рис. 5. Задача 3. Профили плотности энергии излучения на момент времени $ct = 2$: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1

До момента времени $ct = 1$ во всех точках по пространству не появлялось отрицательных кинетических пробегов. Поэтому до этого момента решение, полученное по предлагаемой методике, достаточно хорошо описывает аналитическое решение. После этого момента времени начинают появляться отрицательные кинетические пробеги и полученное решение даже качественно не описывает точного решения. Для обеспечения термодинамической устойчивости отрицательные коэффициенты авторами зануляются.

Задача 4. В качестве следующей задачи рассмотрим вторую задачу Флека из работы [4]. Наиболее подробно данная задача рассмотрена в работе [5]. На поверхность плоского слоя толщиной 4 см падает излучение от изотропного планковского источника с температурой 1 кэВ. Слой состоит из трех физических областей: $X \in \{0; 2\}$ — первая область; $X \in \{2; 2,4\}$ — вторая область; $X \in \{2,4; 4\}$ — третья область.

Коэффициент поглощения вычисляется по формуле

$$\kappa_\varepsilon = \frac{\kappa_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right)\right)}{\varepsilon^3};$$

$\kappa_0 = 27$ в первой и третьей областях, $\kappa_0 = 10\,000$ во второй области. Уравнение состояния вещества взято в виде $E = 0,81T$.

Пространственная сетка — неравномерная в каждой области и имеет вид $x_0 = 0; 0,004; 0,04; x_3 = 0,1; \dots; x_{21} = 1,9$ (18 интервалов, $h = 0,1$); $x_{22} = 1,987; 1,999; 2; 2,001; 2,004; 2,013; x_{28} = 2,04; \dots; x_{36} = 2,36$ (8 интервалов $h = 0,04$); $x_{37} = 2,396; 2,4; 2,404; 2,44; x_{41} = 2,5; \dots; x_{56} = 4$ (15 интервалов, $h = 0,1$). Число интервалов в первой, второй и третьей областях — 24, 14 и 18 соответственно, итого 56 интервалов по пространству. Сетка по μ задавалась равномерной с 16 интервалами.

Результаты расчета данной задачи представлены на рис. 6. За точное решение принято решение из [5].

При расчете данной задачи не появлялось отрицательных эффективных коэффициентов поглощения излучения, т. е. всегда выполнялось условие $\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k} \geq 0$. В этом случае, как видно из рис. 6, рассматриваемая методика дает решение не хуже классической квазидиффузии.

Для корректного расчета данной задачи с использованием метода 2 сначала подберем значение ограничителя m_{\min} .

На рис. 7 приведено отклонение полученного решения от точного в норме L_1 при различных значениях m_{\min} . Из рисунка видно, что наилучшее приближение получается тогда, когда $0,05 < m_{\min} < 0,2$.

В авторских расчетах значение m_{\min} равно 0,1. При таком значении m_{\min} решения, полученные по методу 1 и 2, практически совпадают, что хорошо видно из рис. 8. Отклонение от точного решения на момент времени $ct = 9$ в норме L_1 по методу 1 составляет 0,02558, по методу 2 при $m_{\min} = 0,1$ отклонение составляет 0,2618, т. е. значения очень близки. При квазидиффузионном расчете отклонение от точного решения составляет 0,01334.

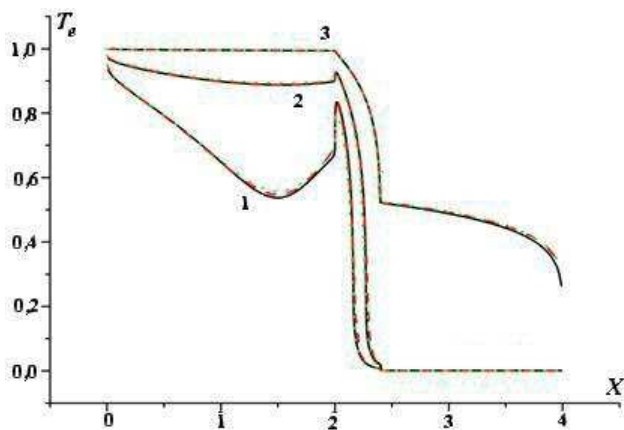


Рис. 6. Задача 4. Профили температуры вещества: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1; 1 — $ct = 9$; 2 — $ct = 18$; 3 — $ct = 360$

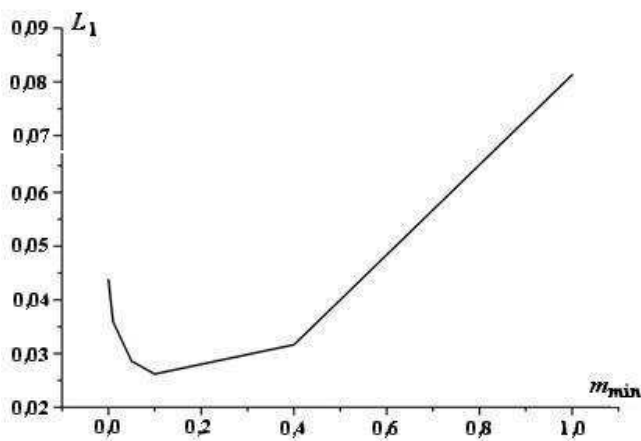


Рис. 7. Задача 4. Отклонение решения, полученного по методу 2, от точного значения в норме L_1 на момент времени $ct = 9$

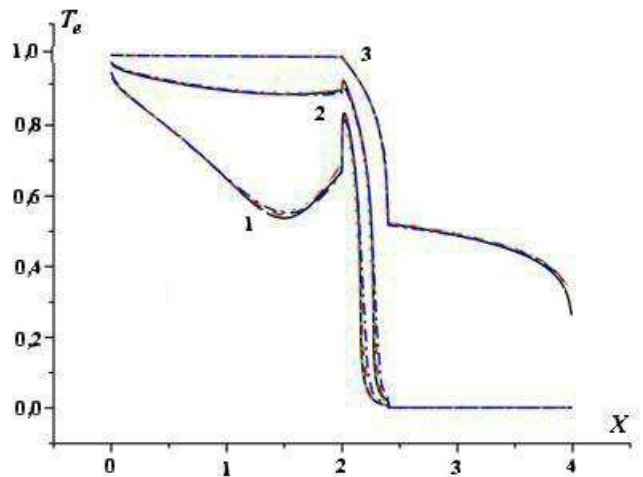


Рис. 8. Задача 4. Профили температуры вещества: — — точное решение; - - - — решение по классической квазидиффузии; ··· — решение по методу 1; - · - · — решение по методу 2 при $m_{\min} = 10^{-1}$; 1 — $ct = 9$; 2 — $ct = 18$; 3 — $ct = 360$

Выводы

На примере расчета ряда методических задач показано, что введение кинетического пробега или множителя m_ε дает результат не хуже, чем введение коэффициента квазидиффузии, но при условии положительности коэффициента $\kappa_{\varepsilon a} + \kappa_{\varepsilon s} + \kappa_{\varepsilon k}$ в методе 1 и при условии $m_\varepsilon > 0,1$ в методе 2. Использование метода 2 при наличии вакуумных областей не представляется возможным.

Хотя результат, полученный по описанным методикам, получается менее точным, чем при классическом квазидиффузионном расчете, тем не менее такая модификация без больших затрат позволяет расширить класс решаемых задач с использованием диффузионного приближения.

Кроме того, расчет переноса излучения в диффузионной постановке обладает рядом преимуществ. Основные из них — это выполнение принципа максимума, простота построения монотонных разностных схем второго порядка точности для уравнений параболического типа, особенно в многомерном случае.

Введение кинетического пробега или множителя m_ε в имеющиеся комплексы программ, реализующие диффузионное приближение, не представляет труда. В этих методиках можно применить рассматриваемые подходы без существенных изменений в программах. Время расчета задач на ЭВМ с использованием предлагаемых

подходов практически совпадает со временем расчета задач в классической квазидиффузионной постановке.

Список литературы

1. Андреев Е. С., Козманов М. Ю., Рачилов Е. Б. Принцип максимума для системы уравнений энергии и нестационарного переноса излучения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1983. Т. 23, № 1. С. 152—159.
2. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Там же. 1964. Т. 4, № 6. С. 1078—1087.
3. Карлыханов Н. Г. Применение метода квазидиффузии для решения задач переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 1. С. 32—38.
4. Fleck J. A., Cummings Jr. J. D. An implicit Monte Carlo scheme for calculating time and frequency depend nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8. P. 313—342.
5. Завьялов В. В., Козманов М. Ю., Селезнёв В. Н., Черняков В. Е., Шестаков А. А. Результаты численных расчетов одномерных тестовых задач переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 26—36.

Статья поступила в редакцию 25.06.10.
