**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2011 Т. 3 № 3 С. 279–286**

Ки&М

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

УДК: 519.63

Экономичный метод решения уравнения переноса в 2D цилиндрической и 3D гексагональной геометриях для метода квазидиффузии

Е. Н. Аристова[1,2,a], Д. Ф. Байдин[1,b]

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет),
Россия, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9
[2] Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,
Россия, 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4а

E-mail: [a] aristovaen@mail.ru, [b] dbaydin@mail.ru

Получено 31 мая 2011 г.

В работе описан предложенный экономичный метод решения стационарного уравнения переноса
в *x*-*y*-*z*-геометрии. Решение уравнения проводится на гексагональной сетке, отражающей структуру поперечного сечения активной зоны реактора. Использованный метод коротких характеристик наследует методические наработки двумерного расчета. Применяются характеристический и консервативно-характеристический методы решения уравнения в ячейке сетки. В трехмерной геометрии подтверждено преимущество консервативного метода и хорошая точность полученного численного решения, особенно компонентов тензора квазидиффузии.

Ключевые слова: уравнение переноса, метод квазидиффузии, консервативные методы

Efficient method of the transport equation calculation in 2D cylindrical and 3D hexagonal geometries for quasi-diffusion method

E. N. Aristova[1], D. F. Baydin[2]

[1] *Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Institutskii per. 9, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia*
[2] *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Miusskaya sq. 4, Moscow, 125047, Russia*

Abstract. — Efficient method for numerical solving of the steady transport equation in *x*-*y*-*z*-geometry has been suggested. The equation is being solved on hexagonal mesh, reflecting real structure of the reactor active zone cross-section. Method of characteristics is used, that inherits all the outcomes from the two-dimensional *r*-*z*-geometry calculation. Two variants of the method of characteristics have been applied for solving the transport equation in a cell: method of short characteristics and its conservative modification. It has been confirmed that in three-dimensional geometry conservative method has advantage over pure characteristic and it produces highly accurate solution, especially for quasi-diffusion tensor components.

Keywords: transport equation, quasi-diffusion method, conservative methods

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2011, vol. 3, no. 3, pp. 279–286 (Russian).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-01-00389а).

Введение

Необходимость решения уравнения переноса возникает в задачах взаимодействия излучения с веществом и в нейтронной (реакторной) физике. Для решения задач, связанных с моделированием быстрых реакторов в саморегулируемом нейтронно-ядерном режиме, зависимостью уравнения переноса нейтронов от времени можно пренебречь, так как время изменения параметров на несколько порядков больше времени пролета нейтрона через реактор. Такой режим требует малого управления и позволяет строить активную зону с большой степенью симметрии. Применение метода квазидиффузии позволяет, во-первых, учесть временнýю зависимость в макроскопических квазидиффузионных уравнениях для плотности и потока нейтронов и, во-вторых, существенно сократить число итераций по рассеянию и делению. В статье в основном рассматривается переход от решения двумерной задачи к трехмерной, полностью отражающей геометрию быстрого реактора типа БН-800.

Постановка задачи

Применение метода квазидиффузии [Гольдин, 1964] позволяет решать уравнение переноса в стационарном или λ-приближении, оставляя корректный учет нестационарности на долю уравнений квазидиффузии. Последние уравнения являются точными следствиями групповых уравнений переноса при усреднении по углам, а потом и энергиям. Стационарное уравнение переноса в цилиндрических r-z и декартовых x-y-z координатах в стандартных обозначениях имеет вид

$$\Omega_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \Omega_r \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \Omega_\phi \frac{1}{r}\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} + \alpha\Phi = Q\,, \tag{1}$$

$$\Omega_z = \cos\theta,\ \ \Omega_r = \sin\theta\cos\varphi,\ \ \Omega_\varphi = -\sin\theta\sin\varphi,\ \ \theta\in[0,\pi],\ \ \varphi\in[0,2\pi];$$

$$\Omega_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \alpha\Phi = Q, \tag{2}$$

$$\Omega_z = \cos\theta,\ \ \Omega_x = \sin\theta\cos\varphi,\ \ \Omega_y = \sin\theta\sin\varphi,\ \ \theta\in[0,\pi],\ \ \varphi\in[0,2\pi].$$

Уравнение переноса при наличии рассеяния и деления является линейным интегро-дифференциальным уравнением с интегралами в правой части и решается обычно методом итераций источника деления. Метод квазидиффузии позволяет выразить главную часть оператора рассеяния через макроскопические величины типа плотности и потока, которые определяются из дополнительной системы уравнений квазидиффузии. Это ускоряет процесс итераций и автоматически делает схему консервативной. В любом случае при рассмотрении разностной аппроксимации правые части (1) и (2) можно полагать известными.

Переход к переменным Владимирова

Переход к переменным Владимирова [Владимиров, 1958] в r-z-геометрии или аналогичное преобразование в x-y-z-геометрии позволяют переписать уравнения (1, 2) в виде, содержащем только две пространственные производные:

$$\cos\theta \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \sin\theta \frac{\partial \Phi}{\partial s} + \alpha\Phi = Q\,, \tag{3}$$

где s — проекция характеристики на плоскость, перпендикулярную оси z. Эта замена соответствует выбору из всех плоскостей, проходящих через характеристику, именно той, которая параллельна оси z, и разложению движения на параллельное и перпендикулярное оси z.

Пространственная сетка

Ключевые вопросы построения сетки на основе концентрических цилиндров и решения (1) для r-z-геометрии рассмотрены в [Аристова и др., 2006b]. Для обоснования перехода от расчета двумерного переноса в реакторе к трехмерной модели следует пространственную (и угловую) сетку для метода коротких характеристик строить исходя из физической геометрии активной зоны (АЗ) реактора. АЗ современного быстрого реактора состоит из набора гексагональных стержней. Для предлагаемых режимов работы [Гольдин и др., 2009] быстрых реакторов типа БН-800 характерны также высокая симметрия сборки при минимальном количестве управляющих стержней. Симметрии сборки позволяют решать уравнение переноса на более компактной области. Например, благодаря переходу сборки самой в себя при повороте относительно центра на $\pi/3$, т. е. идентичности шести угловых сегментов (сборка, включая защиту, в горизонтальном сечении имеет форму шестиугольника), можно рассматривать только один сегмент, что используется в программе расчета. Ввиду того что рассматривается реактор на быстрых нейтронах, размер ячейки сетки может быть выбран соответствующим размеру поперечного сечения ТВЭЛа (шестиугольник). Даже на такой грубой сетке достигается решение высокой точности. Расположим ось z вдоль главной оси реакторной сборки, тогда пространственная сетка в плоскости x-y будет состоять из середин сторон и центров шестиугольников.

Угловая дискретизация

Азимутальный угол θ и угол места φ входят в уравнение (3) только как параметры, поэтому для различных θ и φ решение может находиться независимо (в том числе параллельно). В программе, реализующей указанные методики, предусмотрена возможность использования как равномерной, так и гауссовой сетки по углу θ. В отличие от r-z-геометрии [Аристова и др., 2006b], здесь сетку по углу φ удается выбрать одновременно практически равномерной и жестко связанной с пространственной (по сути, означает возможность использования свойств длинных характеристик), что избавляет от проблем, описанных в указанной работе. В методе квазидиффузии от решения уравнения переноса требуются только интегральные вклады в дробно-линейные функционалы от функции распределения [Аристова и др., 2006a]. Для их определения с хорошей точностью в нашем случае достаточно выбирать за основу для построения угловой сетки все короткие характеристики, соединяющие узлы пространственной сетки так, чтобы характеристика проходила не более чем через два соседних шестиугольника.

Уравнение, записанное в виде (3), позволяет интерпретировать переменную z как новую переменную времени с той оговоркой, что при $\cos\theta > 0$ характеристика направлена снизу вверх, т. е. z возрастает, а при $\cos\theta < 0$ направление характеристики сверху вниз, z убывает. В любом из этих случаев дискретизация по z позволяет хранить только два слоя функции распределения — предыдущий и текущий. Когда расчет на текущем слое выполнен, делаются интегральные вклады в дробно-линейные функционалы и происходит переход к новому слою.

Характеристический и консервативно-характеристический методы

Следующей задачей является нахождение решения в прямоугольной ячейке плоскости s-z. Были рассмотрены два варианта схемы.

Характеристический метод

Характеристический метод решения [Гольдин и др., 1965; Гольдин и др., 1966] заключается в том, что по значению функции в точках 1, 2, 3 (рис. 1) нужно определить значение в точке пересечения характеристики с границей расчетной ячейки Φ_4^*, после чего значение в точке 4 определяется интегрированием вдоль отрезка этой характеристики. Чтобы обеспечить второй порядок точности, нужно знать снесенное тем или иным способом по характеристике назад значение Φ_1^*, построить квадратичную интерполяцию по значениям Φ_1^*, Φ_2, Φ_3 и по ней определить промежуточное значение Φ_4^*. Окончательно решение в узле 4 находится по формулам

$$\Phi_4 = \Phi_4^* \exp(-\alpha dl) + Q / \alpha (1 - \exp(-\alpha dl)), \qquad (4)$$

где dl — длина отрезка характеристики внутри ячейки.

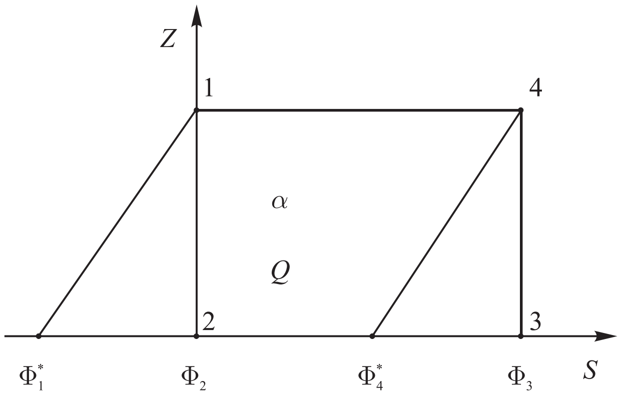

Рис. 1. Характеристический метод

Приближение функции параболой на нижней стороне ячейки рождает и главную проблему характеристического метода, связанную с выпуклостью функции [Аристова и др., 2006b]. Правильный учет выпуклости функции при ее интерполяции может быть осуществлен в рамках метода, предлагаемого ниже.

Консервативно-характеристический метод

Консервативно-характеристический метод решения заключается в восстановлении функции распределения на освещенных гранях (1–2, 2–3, рис. 2) по заданным значениям в узловых точках и интегралу от функции распределения по грани аналогично [Бакирова и др., 1986]. Этим формируется правильная выпуклость аппроксимирующей функции. Значение Φ_5 используется, как в чисто характеристическом методе (4), для нахождения Φ_4. Основной задачей консервативного метода является вычисление выходящих потоков, разбиение входящих потоков на составляющие, интегралы от которых вдоль характеристик образуют выходящие потоки. В предлагаемом методе эта задача решена точно в рамках приведенного метода аппроксимации функции распределения на каждой освещенной грани. Другой метод консерватизации любого характеристического метода предложен в [Трощиев и др., 2004]. Рассмотрим два случая: первый, который будет описан подробно, — когда характеристика из точки 4 назад пересекается с нижней гранью ячейки (рис. 2), и второй, когда эта характеристика пересекается с боковой гранью ячейки. Входящий поток на грани 1–2, соответствующим образом преобразуясь, целиком выходит через грань 1–4 (составляющая W_{16}). Входящий поток на грани 2–3 разбивается на две части, одна из которых после учета поглощения и источника (W_{64}) в сумме с W_{16} дает полный поток через грань 1–4, а вторая часть формирует полный поток W_{34}. На отрезке 2–3 строится квадратичная или псевдоквадратичная интерполяция функции распределения, чтобы удовлетворить условиям

$$F_{23}(0)=\Phi_2, F_{23}(ds)=\Phi_3, \int_0^{ds} F_{23}(\xi)d\xi = W_{23}. \tag{5}$$

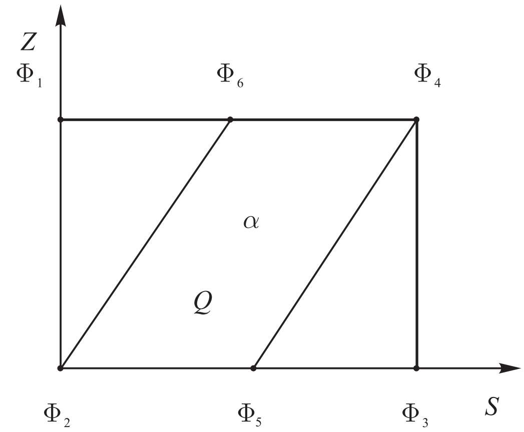

Рис. 2. Консервативно-характеристический метод

Аналогично строится интерполяция $F_{21}(\xi)$ на ребре 1–2. В случае попадания характеристики на боковое ребро ячейки все формулы для выходящих потоков записываются аналогично.

Интегрирование по углам

Для вычисления плотности и потока нейтронов, а также коэффициентов квазидиффузии возникает необходимость вычисления интегралов вида

$$\begin{aligned} p(t,x,y,z) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \rho(\theta,\varphi)\Phi(t,x,y,z,\gamma,\varphi)\sin\theta d\theta \\ &= 2\int_0^{\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} \rho(\gamma,\varphi)\Phi(t,x,y,z,\gamma,\varphi)d\gamma. \end{aligned} \tag{6}$$

Интегралы по γ и φ вычисляются в предположении кусочно-постоянной аппроксимации. Тогда двойной интеграл (6) сводится к двойной сумме вида

$$P = 2\sum_{k=0}^{N_k}\sum_{q=0}^{N_q} A_q B_k .$$

После вычисления Ф на новом слое для заданных углов θ и φ делаются вклады в интегральные суммы.

Результаты численных расчетов

Основной целью численных расчетов являлось выявление на тестовых задачах преимуществ консервативно-характеристического метода в трехмерной геометрии и определение скорости сходимости и точности получаемого решения.

Задача I. Численное решение строилось для области, подобной конечному цилиндру. На торцах и крышках сборки были заданы нулевые граничные условия для потока падающих нейтронов.

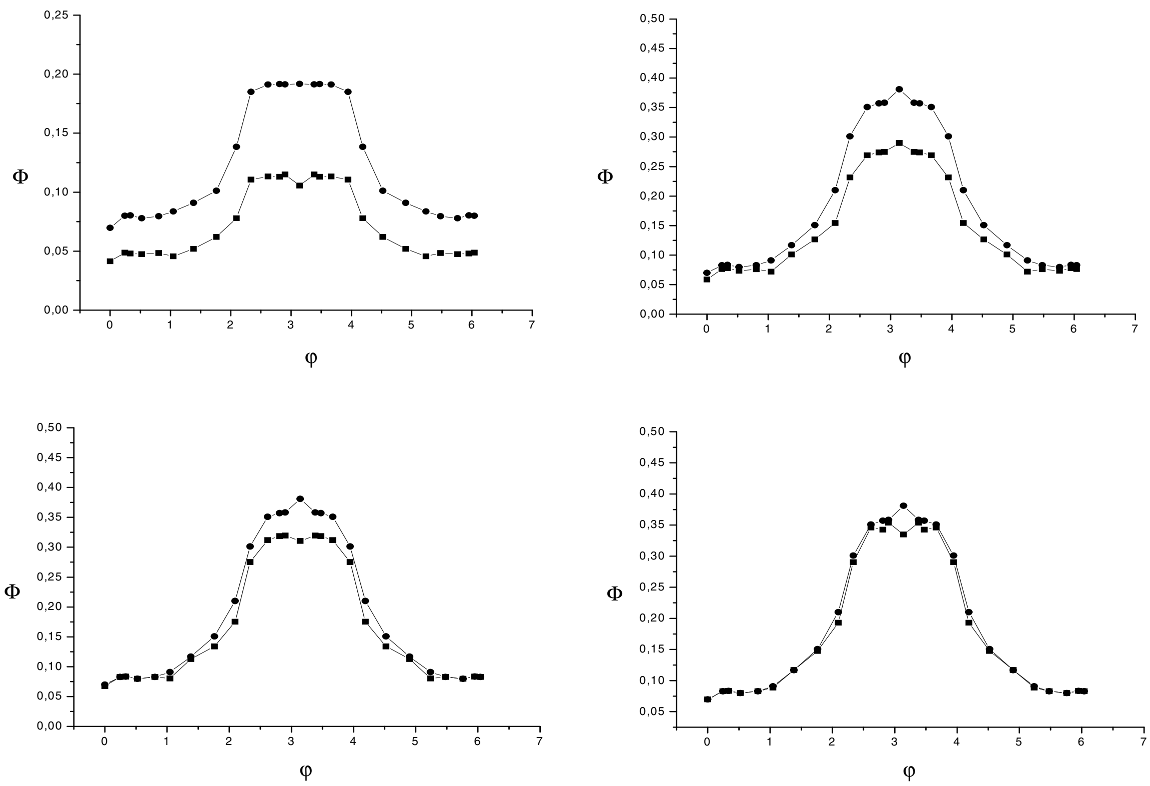

Рис. 3. Зависимость решения в узле сетки от высоты расположения ячейки по оси z от нижнего торца сборки. На графиках верхняя линия соответствует консервативно-характеристическому методу, нижняя — характеристическому

На графиках (рис. 3) показаны пространственные слои по z последовательно от нижнего торца реактора. Наблюдается отставание решения, полученного характеристическим методом, из-за неверного воспроизведения выпуклости решения.

Задача II. Область такая же, как и в первой задаче, но на торцах реактора задано точное решение для области, бесконечно протяженной вдоль оси z. Для этой задачи решение методом коротких характеристик сравнивалось с решением методом длинных характеристик, принимаемым за точное. Результаты численных расчетов по характеристическому и консервативно-характеристическому методам для функции распределения приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты численного сравнения методов в x-y-z-геометрии

Ошибка в норме С	Метод	5 x 5 x 5	9 x 9 x 9	17 x 17 x 17	33 x 33 x 33
$\lVert\delta\Phi\rVert$	характ.	7.02 x 10^{-2}	4.38 x 10^{-2}	2.47 x 10^{-2}	1.32 x 10^{-2}
	консерв.	3.06 x 10^{-4}	6.15 x 10^{-5}	1.01 x 10^{-5}	2.50 x 10^{-6}

Ниже приведено сравнение порядков сходимости методов в x-y-z-геометрии с результатами для r-z-геометрии [Baydin et al., 2008].

***r-z*:**

Владимировская (классическая) сетка

- Характеристический < 1;
- Консервативно-характеристический ~ 2;

Альтернативная (равномерная) сетка

- Характеристический < 0,5;
- Консервативно-характеристический ~ 1.

***x-y-z*:**

- Характеристический < 1;
- Консервативно-характеристический > 2.

Таким образом, на построенной в *x-y-z*-геометрии сетке вследствие жесткой связи угловой и пространственной дискретизации удается добиться хорошей сходимости обоих методов, что было присуще классической сетке в *r-z*-геометрии. Кроме того, построенная сетка близка к равномерной, чего не было в цилиндрическом случае. Это разумно, так как расчет проводится практически вдоль длинных характеристик, излом которых происходит только на границе слоев сетки по оси *z*.

Выводы

В заключение отметим, что консервативно-характеристический метод решения уравнения переноса позволяет значительно повысить точность полученного решения, как для функции распределения, так и для коэффициентов квазидиффузии. В *x-y-z*-геометрии оба метода расчета уравнения в ячейки показывают более высокую эффективность, чем в *r-z*. Ошибка консервативно-характеристического метода в *x-y-z* мала даже на грубых сетках, преимущество метода более ярко выражено. На практике точности, полученной для компонентов квазидиффузии в предложенном методе построения сеток, вполне достаточно. Полученная *x-y-z*-схема готовится для внедрения в промышленные расчеты, реализующие решение уравнения переноса для реальной трехмерной геометрии.

Список литературы

Аристова Е. Н., Гольдин В. Я., Дементьев А. С. Разностное решение двумерного стационарного уравнения переноса в переменных Владимирова. // *Математическое моделирование*. — 2006. — Т. 18, № 6. — С. 44–52.

Аристова Е. Н., Байдин Д. Ф., Гольдин В. Я. Два варианта экономичного метода решения уравнения переноса в r-z-геометрии на основе перехода к переменным Владимирова. // *Математическое моделирование*. — 2006. — Т. 18, № 7. — С. 43–52.

Бакирова М. И., Карпов В. Я., Мухина М. И. Характеристико-интерполяционный метод решения уравнения переноса. // *Дифференциальные уравнения*. — 1986. — Т. 22, № 7. — С. 1141–1148.

Владимиров В. С. Численное решение кинетического уравнения для сферы. // *Вычислительная математика*. — 1958. — № 3. — С. 3–33.

Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения. // *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*. — 1964. — Т. 4, № 6. — С. 1078–1087.

Гольдин В. Я., Данилова Г. В., Калиткин Н. Н. Численное интегрирование многомерного уравнения переноса. // Численные методы решения задач математической физики. — Москва, 1966. — С. 190–193.

Гольдин В. Я., Калиткин Н. Н., Шишова Т. В. Нелинейные разностные схемы для гиперболических уравнений. // *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*. — 1965. — Т. 5, № 5. — С. 938–944.

Гольдин В. Я., Аристова Е. Н., Пестрякова Г. А., Стойнов М. И. Проект активной зоны реактора типа БН-800, работающего без запаса реактивности с минимальным управлением в течение длительного времени. // *Математическое моделирование.* — 2009. — Т. 21, № 10. — С. 76–84.

Трощиев В. Е., Нифанова А. В., Трощиев Ю. В. Характеристический подход к аппроксимации законов сохранения в кинетических уравнениях переноса излучений. // *ДАН*. — 2004. — Т. 394, № 4. — С. 454–458.

Baydin D. F., Aristova E. N., Gol'din V. Ya. Comparison of the Efficiency of the Transport Equation Calculation Methods in Characteristics Variables. // *Transport Theory and Statistical Physics*. — 2008. — Vol. 37. No. 2. — Pp. 286–306.