

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

А.В. Воронков, Е.П. Сычугова

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ
МНОГОГРУППОВОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА
НЕЙТРОНОВ И ГАММА - КВАНТОВ НА СЕТКАХ,
СОГЛАСОВАННЫХ СО СТРУКТУРОЙ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
(код проекта № 98–01–00089)

Москва - 2000

A.V. Voronkov, E.P. Sychugova

Keldysh Institute of Applied Mathematics
Russian Academy of Sciences

The algorithm for solving the multigroup steady-state transport equation
for neutrons and gamma - quanta
on grids, agreed with the structure of calculation domain

ABSTRACT

The numerical algorithm is developed for solving the multigroup steady-state transport equation for neutrons and gamma - quanta in two-dimensional R-Z geometry by the method of Discrete ordinates on regular grids agreed with the structure of calculation domain and formed by arbitrary convex quadrangles. The conservative scheme is derived with the help of integral-interpolation method. The additional relations are used for closing the system of finite-difference equations. The type and the number of these relations over spatial variables are determined by the “illumination” of quadrangular cell. The results of testing of the suggested scheme are given in the final part of the work.

Аннотация

Разработан алгоритм численного решения многогруппового стационарного уравнения переноса нейтронов и гамма - квантов методом дискретных ординат в двумерной R-Z геометрии на регулярных сетках, согласованных со структурой расчетной области и состоящих из произвольных выпуклых четырехугольников. Консервативная схема строится с помощью интегро-интерполяционного метода. Для замыкания системы конечно-разностных уравнений используются дополнительные соотношения, вид и количество которых по пространственным переменным определяются освещенностью четырехугольной ячейки. В заключительной части работы приводятся результаты тестирования предложенной схемы.

Ключевые слова: уравнение переноса, метод дискретных ординат.

Оглавление.

1. Введение	4
2. Постановка задачи и основные формулы	4
3. Конечно-разностная формулировка задачи и метод решения	10
4. Численные результаты	17
5. Заключение	19
6. Литература	20

1. Введение.

В настоящее время в связи с бурным развитием вычислительной техники численное решение кинетических уравнений находит все большее применение при решении реальных задач. Как правило, классические прямоугольные сетки, которые в основном используются в настоящее время, плохо аппроксимируют реальные геометрии, что существенно ограничивает эффективность применения кинетических уравнений. Поэтому при численном решении кинетических уравнений одним из наиболее важных направлений является переход на сетки, максимально согласованные с конфигурацией расчетной области.

В настоящей работе описывается методика численного решения стационарного многогруппового уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов в двумерной R-Z геометрии на сетках, состоящих из произвольных выпуклых четырехугольников, и приводятся результаты тестирования разработанного алгоритма.

2. Постановка задачи и основные формулы.

Уравнение переноса нейтронов и гамма-квантов в многогрупповом приближении в пространственной области D может быть записано в следующем виде ($g = 1, 2, \dots, NG$):

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi_{n/\gamma}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \cdot \Psi_{n/\gamma}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_{n/\gamma}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (1)$$

Правая часть уравнения (1) для нейтронов группы g ($g = 1, 2, \dots, N_n$) имеет следующий вид:

$$S_n^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{h=H_n^{\min(g)} \Omega}^{H_n^{\max(g)}} \int P_{n \rightarrow g}^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi_n^h(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \frac{1}{4\pi} \chi_p^g \sum_{h=1}^{N_n} \nu \Sigma_f^h \Phi_n^h(\vec{r}) + \frac{1}{4\pi} Q^g(\vec{r}) \quad (2a)$$

Правая часть уравнения (1) для гамма-квантов группы g имеет следующий вид ($g = N_n + 1, N_n + 2, \dots, N_n + N_\gamma$):

$$S_\gamma^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{h=H_{n,\gamma}^{\min(g)} \Omega}^{H_{n,\gamma}^{\max(g)}} \int P_{n,\gamma}^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi_n^h(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \sum_{h=H_\gamma^{\min(g)} \Omega}^{H_\gamma^{\max(g)}} \int P_\gamma^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi_\gamma^h(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (2б)$$

где

$$\Phi_n^g(\vec{r}) = \int_{\Omega} \Psi_n^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3)$$

В (1) - (3) использованы следующие обозначения:

- $\vec{\Omega}$ - единичный вектор в направлении полета частиц,
- N_n - число энергетических групп нейтронов,
- N_γ - число энергетических групп гамма - квантов,
- NG - полное число энергетических групп нейтронов и гамма - квантов,
- $\Psi_n^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ - плотность потока нейтронов в точке \vec{r} в направлении $\vec{\Omega}$ в группе g ,
- $\Psi_\gamma^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ - плотность потока гамма - квантов в точке \vec{r} в направлении $\vec{\Omega}$ в группе g ,
- $\Phi_n^g(\vec{r})$ - скалярный поток нейтронов в точке \vec{r} ,
- $P_n^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение рассеяния нейтронов из группы h в группу g , из направления $\vec{\Omega}$ в направление $\vec{\Omega}'$ в точке \vec{r} ,
- $P_{n,\gamma}^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение образования гамма - квантов в группе g после неупругого рассеяния нейтронов из группы h из направления $\vec{\Omega}$ в направление $\vec{\Omega}'$ в точке \vec{r} ,
- $P_\gamma^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ - макроскопическое сечение рассеяния гамма - квантов из группы h в группу g из направления $\vec{\Omega}$ в направление $\vec{\Omega}'$ в точке \vec{r} ,
- $H_n \min(g)$ - минимальный номер группы, из которой нейтроны рассеиваются в группу g ,
- $H_n \max(g)$ - максимальный номер группы, из которой нейтроны рассеиваются в группу g ,
- $H_{n,\gamma} \min(g)$ - минимальный номер группы, в которой нейтроны после неупругого рассеяния образуют гамма - кванты в группе g ,
- $H_{n,\gamma} \max(g)$ - максимальный номер группы, в которой нейтроны после неупругого рассеяния образуют гамма - кванты в группе g ,
- $H_\gamma \min(g)$ - минимальный номер группы, из которой гамма - кванты рассеиваются в группу g ,
- $H_\gamma \max(g)$ - максимальный номер группы, из которой гамма - кванты рассеиваются в группу g ,
- $\Sigma_t^g(\vec{r})$ - полное макроскопическое сечение взаимодействия,
- $\Sigma_f^h(\vec{r})$ - макроскопическое сечение деления,
- ν - число вторичных нейтронов, возникающих при одном акте

- деления,
 χ_p^g - спектр деления мгновенных нейтронов,
 $Q^g(\vec{r})$ - функция распределения внутренних источников в точке \vec{r} в группе g .

На границе пространственной области D задаются значения углового потока частиц, который входит внутрь этой области (здесь и ниже индекс типа частиц опущен, если речь идет об обоих типах частиц):

$$\Psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} = \Psi_{\Gamma}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (4)$$

где \vec{n} - внешняя нормаль к границе.

Система уравнений (1) - (4) описывает стационарное распределение нейтронов и гамма - квантов с учетом процесса деления, а также заданных внутренних и граничных источников.

Если в правой части (2б) член с делением отсутствует ($\nu \Sigma_f^h \equiv 0$), система уравнений (1) - (4) описывает стационарное распределение нейтронов и гамма - квантов в зависимости от заданных внутренних и граничных источников.

Задача на K_{ef} (однородная задача) описывается системой уравнений переноса нейтронов с нулевыми внутренними и граничными источниками и множителем $1/K_{ef}$ перед членом с делением.

Предполагается, что макроскопическое сечение рассеяния $P_M^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$, $M = n / \gamma / n, \gamma$ задается в виде ряда по полиномам Лежандра $P_\nu(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$ степени $\nu = 0, 1, \dots, N_{hg}$ (в P_N приближении, $N_{hg} \leq N$):

$$P_M^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = P_M^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \chi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu=0}^{N_{hg}} \frac{2\nu+1}{2} w_{M,\nu}^{h \rightarrow g}(\vec{r}) P_\nu(\chi), \quad (5)$$

с условиями нормировки

$$\int_{-1}^1 P_M^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \chi) P_\nu(\chi) d\chi = w_{M,\nu}^{h \rightarrow g}(\vec{r}) \quad (6)$$

$$\int_{-1}^1 P_\nu(\chi) P_n(\chi) d\chi = \frac{2\delta_{\nu n}}{2\nu+1}, \delta_{\nu n} = \begin{cases} 0, \nu \neq n \\ 1, \nu = n \end{cases} \quad (7)$$

Для упрощения выражения (5) используется теорема сложения полиномов Лежандра: Пусть $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$ - два единичных вектора со сферическими

координатами $(1, \theta, \varphi)$ и $(1, \theta', \varphi')$ соответственно, и пусть $\theta + \theta' < \pi$, $\xi = \cos \theta$, $\xi' = \cos \theta'$. Тогда справедлива следующая формула:

$$P_\nu(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = P_\nu(\xi) \cdot P_\nu(\xi') + 2 \sum_{u=1}^{\nu} \frac{(\nu-u)!}{(\nu+u)!} P_\nu^u(\xi) P_\nu^u(\xi') \cos[u(\varphi - \varphi')] \quad (8)$$

где $P_\nu^u(\xi)$ - присоединенные функции Лежандра первого рода с нормировкой:

$$\int_{-1}^1 P_\nu^u(\xi) P_n^u(\xi) d\xi = \frac{2\delta_{\nu n}}{2\nu+1} \cdot \frac{(\nu+u)!}{(\nu-u)!} \quad (9)$$

На практике обычно используются нормированные функции $\bar{P}_\nu^u(\xi)$, которые определяются через функции $P_\nu^u(\xi)$ следующим образом:

$$\bar{P}_\nu^u(\xi) = \sqrt{2 - \delta_{u0}} \left(\frac{(\nu-u)!}{(\nu+u)!} \right)^{1/2} P_\nu^u(\xi) \quad (10)$$

Для них имеем:

$$\bar{P}_\nu^0(\xi) = P_\nu^0(\xi), \quad \int_{-1}^1 \bar{P}_\nu^u(\xi) \bar{P}_n^u(\xi) d\xi = (2 - \delta_{u0}) \frac{2\delta_{\nu n}}{2\nu+1} \quad (11)$$

В случае аксиально-симметричной двумерной R-Z геометрии (Рис.1) решение уравнения переноса (1) обладает свойством симметрии ($g = 1, 2, \dots, NG$):

$$\Psi^g(r, z, \xi, \varphi) = \Psi^g(r, z, \xi, 2\pi - \varphi) \quad (12)$$

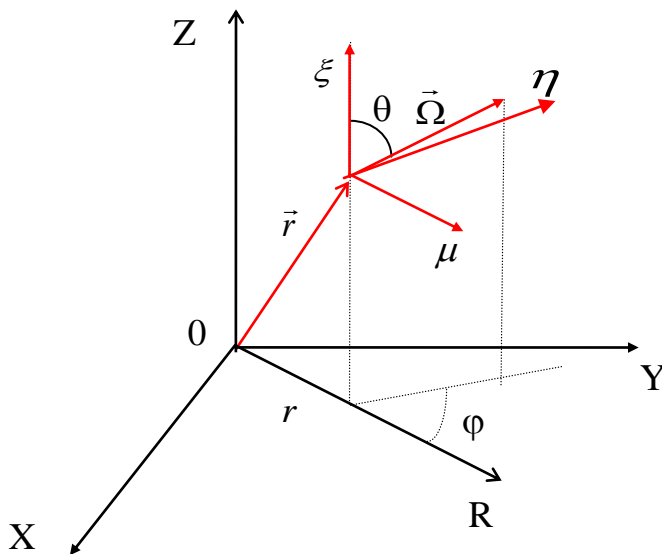


Рис. 1. Система координат для уравнения переноса в R-Z геометрии.

Уравнение переноса (1) в этом случае имеет следующий вид ($g=1,2,\dots,NG$):

$$\frac{\mu}{r} \frac{\partial(r\Psi^g)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\eta\Psi^g)}{\partial \varphi} + \xi \frac{\partial\Psi^g}{\partial z} + \Sigma_t^g(r, z) \cdot \Psi^g(r, z, \xi, \varphi) = S^g(r, z, \xi, \varphi), \quad (13)$$

где

$$\xi = (\vec{\Omega}\vec{n}_z) = \cos\theta, \quad \mu = (1 - \xi^2)^{1/2} \cos\varphi, \quad \eta = (1 - \xi^2)^{1/2} \sin\varphi, \quad \varphi \in [0, \pi], \quad \theta \in [0, \pi]$$

Система уравнений (13) решается в пространственной области $(r, z) \in D$, которая заключена между внешней образующей тела вращения и осью симметрии Z и представляет собой сечение тела вращения плоскостью, проходящей через ось Z (Рис. 2).

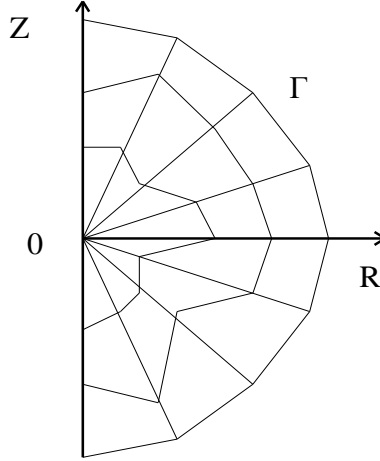


Рис. 2. Область D и четырехугольная пространственная сетка.

Подставляя (5) с использованием (8) в интеграл рассеяния, входящий в правую часть уравнения (1) для частиц группы g , получим выражение для источника рассеяния:

$$\sum_h \int_{\Omega} P_M^{h \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi^h(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' = \frac{1}{2\pi} \sum_h \sum_{v=0}^{N_{hg}} \frac{2v+1}{2} \omega_{M,v}^{h \rightarrow g}(\vec{r}) \sum_{u=0}^v \bar{P}_v^u(\xi) \Phi_v^u(\vec{r}) \cos u \varphi \quad (14)$$

В (14) используются нормированные функции Лежандра (10) и угловые моменты Φ_v^u решения уравнения переноса (13) в группе h , определяемые по формуле:

$$\Phi_v^u(\vec{r}) = 2 \int_{-1}^1 \bar{P}_v^u(\xi) \int_0^\pi \Psi^h(\vec{r}, \xi, \varphi) \cos u\varphi d\varphi d\xi \quad (15)$$

Выражение (14) получено с использованием формулы:

$$\cos[u(\varphi - \varphi')] = \cos u\varphi \cos u\varphi' + \sin u\varphi \sin u\varphi'$$

и свойства четности функции $\Psi^h(\vec{r}, \vec{\Omega})$ по углу φ , а именно:

$$\int_{-1}^1 \bar{P}_v^u(\xi) \int_0^{2\pi} \Psi^h(\vec{r}, \xi, \varphi) \sin u\varphi d\varphi d\xi = 0$$

Запишем правую часть уравнения (13) для нейтронов группы g в аксиально-симметричной двумерной R-Z геометрии с учетом (14) и (15):

$$S_n^g(r, z, \xi, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{h=H_n^{\min(g)}}^{H_n^{\max(g)}} \sum_{v=0}^{N_{hg}} \frac{2v+1}{2} \omega_{n,v}^{h \rightarrow g}(r, z) \left[\sum_{u=0}^v \bar{P}_v^u(\xi) \Phi_{nv}^u(r, z) \cos u\varphi \right] + \frac{1}{4\pi} \chi_p^g \sum_{h=1}^{N_n} \nu \Sigma_f^h \Phi_{n0}^0(r, z) + \frac{1}{4\pi} Q^g(r, z) \quad (16)$$

Правая часть (1) для гамма - квантов группы g имеет вид:

$$S_\gamma^g(r, z, \xi, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{h=H_{n,\gamma}^{\min(g)}}^{H_{n,\gamma}^{\max(g)}} \sum_{v=0}^{N_{hg}} \frac{2v+1}{2} \omega_{n,\gamma,v}^{h \rightarrow g}(r, z) \left[\sum_{u=0}^v \bar{P}_v^u(\xi) \Phi_{n\gamma v}^u(r, z) \cos u\varphi \right] + \frac{1}{2\pi} \sum_{h=H_\gamma^{\min(g)}}^{H_\gamma^{\max(g)}} \sum_{v=0}^{N_{hg}} \frac{2v+1}{2} \omega_{\gamma,v}^{h \rightarrow g}(r, z) \left[\sum_{u=0}^v \bar{P}_v^u(\xi) \Phi_{\gamma v}^u(r, z) \cos u\varphi \right] \quad (17)$$

Граничное условие на внешней поверхности задается для потока частиц, входящих внутрь области D :

$$\Psi^g(r, z, \xi, \varphi) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} = \Psi_\Gamma^g(r, z, \xi, \varphi) \quad g = 1, 2, \dots, NG \quad (18)$$

Кроме того, используются дополнительные граничные условия, которые вытекают из уравнения (13). В точке $r=0$ имеем $\frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi^g(0, z, \xi, \varphi) = 0$. В расчетах это условие используется в следующем виде:

$$\Psi^g(0, z, \xi, \varphi) = \Psi^g(0, z, \xi, \pi - \varphi) \quad (19)$$

Для $\varphi = \pi$ имеем граничное условие:

$$\frac{\mu}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r \Psi^g) - \Psi^g \right] + \xi \frac{\partial \Psi^g}{\partial z} + \Sigma_t^g(r, z) \Psi^g(r, z, \xi, \varphi) = S^g(r, z, \xi, \varphi) \quad (20)$$

3. Конечно-разностная формулировка задачи и метод решения.

Для получения консервативной конечно-разностной схемы в двумерной аксиальной геометрии на сетке, состоящей из произвольных выпуклых четырехугольников, используется интегро-интерполяционный метод.

Угловая сетка задается S_n квадратурой, которая разбивает полусферу направлений на сектора следующим образом. На интервале $0 \leq \xi \leq 1$ задаются узлы $\xi_m = \cos \theta_m$, $m = 1, \dots, n/2$. Для каждого ξ_m интервал изменения угла φ , $\varphi \in [\pi, 0]$ делится на подинтервалы $\varphi_{m,l-1/2} \geq \varphi \geq \varphi_{m,l+1/2}$, $l = 1, \dots, L_m$, где $L_m = n - 2m + 2$, $\varphi_{m,1/2} = \pi, \varphi_{m,L_m+1/2} = 0$. Диаграмма расположения точек для угловой квадратуры S_8 на октанте $\varphi \in [\pi/2, \pi]$ представлена на Рис. 3.

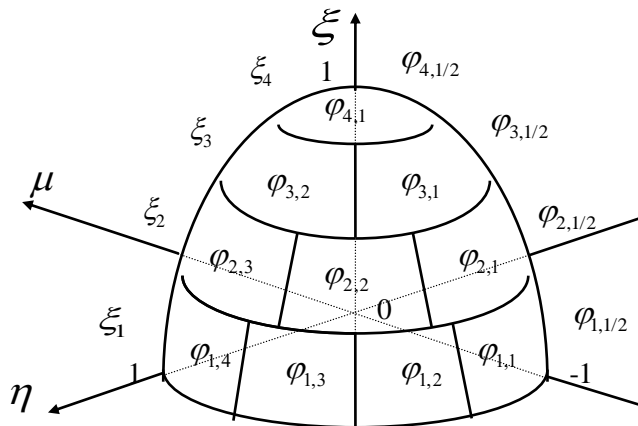


Рис. 3. Диаграмма расположения точек угловой квадратуры S_8 на октанте.

Полученное разбиение верхней части полусферы ($\xi > 0$) единичного радиуса симметрично отображается на нижнюю часть полусферы ($\xi < 0$). В результате, площадь поверхности полусферы разбивается на сектора с весами $\omega_{m,l} = \Delta \xi_m \cdot \Delta \varphi_{m,l}$, $\sum_{m,l} \omega_{m,l} = 2\pi$.

Рассмотрим пространственную область D , покрытую регулярной сеткой, состоящей из выпуклых четырехугольников. Для фиксированного направления $\vec{\Omega}_{m,l} = (\xi_m, \varphi_{m,l})$ значения функции Ψ на сторонах четырехугольника обозначим через $\Psi_{P(i,i+1),m,l}^g$ ($i = 1 \div 4$), в центре четырехугольника - $\Psi_{P0,m,l}^g$ (Рис. 4).

Интегрируя уравнение (13) с весом r по четырехугольнику с координатами вершин (r_i, z_i) , $i = 1 \div 4$ в пределах разностной угловой ячейки $[\xi_{m-1/2}, \xi_{m+1/2}] \times [\varphi^-, \varphi^+]$ площадью $\omega_{m,l}$, применяя формулу Гаусса - Остроградского и сокращая на $\omega_{m,l}$, получим следующее балансное уравнение (индекс группы g опущен):

$$\sum_{i=1}^4 R_{P(i,i+1),m,l} \Psi_{P(i,i+1),m,l} + \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} (\alpha^+ \Psi_{\varphi^+} - \alpha^- \Psi_{\varphi^-}) + \sum_t \Psi_{P0,m,l} \Delta v = S_{P0,m,l} \Delta v \quad (21)$$

где

$$R_{P(i,i+1),m,l} = \frac{1}{2} (r_i + r_{i+1}) [\mu_{m,l} (z_{i+1} - z_i) - \xi_m (r_{i+1} - r_i)]. \quad (22)$$

$$\Psi_{P(4,5),m,l} = \Psi_{P(4,1),m,l}, \quad R_{P(4,5),m,l} = R_{P(4,1),m,l},$$

$$\mu_{m,l} = \sqrt{1 - \xi_m^2} \cos \varphi_{m,l}, \quad \varphi^\pm = \varphi_{m,l \mp 1/2}, \quad \Psi_{\varphi^\pm} = \Psi_{P0,m,l \mp 1/2}, \quad \alpha^\pm = \alpha_{m,l \mp 1/2}$$

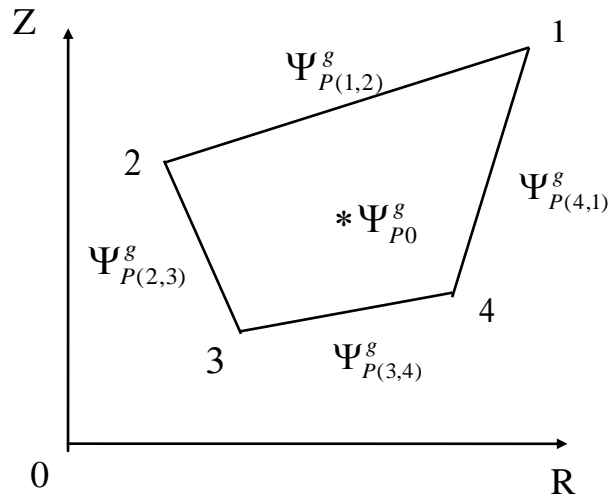


Рис. 4. Значения функции Ψ^g в четырехугольной пространственной ячейке.

Параметры $\alpha_{m,l+1/2}$ для заданного значения m и для всех $l = 1, \dots, L_m$ вычисляются из дополнительных соотношений:

$$\alpha_{m,l+1/2} = \alpha_{m,l-1/2} - \mu_{m,l} \cdot \omega_{m,l}, \quad \alpha_{m,1/2} = \alpha_{m,L_m+1/2} = 0 \quad (23)$$

Площадь $\Delta s = \iint_{cell} drdz$ четырехугольной пространственной ячейки в плоскости R-Z вычисляется через координаты вершин по формуле:

$$\Delta s = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 (r_i - r_{i+1})(z_i + z_{i+1}) \quad (24)$$

Объем $\Delta v = \iint_{cell} r drdz$ области, образованной вращением этой ячейки вокруг оси симметрии Z, вычисляется по формуле:

$$\Delta v = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^4 (z_{i+1} - z_i) [r_{i+1}^2 + r_{i+1}r_i + r_i^2] \quad (25)$$

Для замыкания системы (21) - (25) вводятся дополнительные “взвешенные” соотношения. По угловой переменной φ дополнительное соотношение имеет вид:

$$\Psi_{\varphi}^{+} = (1 + P_{\varphi})\Psi_{P0,m,l} - P_{\varphi}\Psi_{\varphi}^{-} \quad (26)$$

где P_{φ} весовой параметр $0 \leq P_{\varphi} \leq 1$. Дополнительные соотношения по пространственным переменным должны быть такими, чтобы для любых направлений полета частиц $(\xi_m, \varphi_{m,l})$ они приводили к невырожденной системе сеточных уравнений. Количество дополнительных соотношений и их вид определяются освещенностью сторон четырехугольной ячейки. Возможные варианты освещенности и соответствующие дополнительные соотношения рассматриваются ниже более подробно.

Граничные условия (18) задаются на внешней границе для тех сторон четырехугольной ячейки, для которых $R_{P(i,i+1),m,l} < 0$, что эквивалентно условию $(\vec{\Omega}_{m,l}, \vec{n}) < 0$. Чтобы аппроксимировать граничное условие (19) на примыкающих к оси Z сторонах четырехугольников и в центре координат, это условие заменяется соотношением:

$$\Psi_{P(i,i+1)}(\xi_m, \varphi_{m,l}) = \Psi_{P(i,i+1)}(\xi_m, \pi - \varphi_{m,l}) \quad (27)$$

Для аппроксимации граничного условия (20) для $\varphi = \pi$ используется следующее балансное уравнение:

$$\sum_{i=1}^4 R_{P(i,i+1),m,1/2} \Psi_{P(i,i+1),m,1/2} + \Delta s |\mu_{m,1/2}| \Psi_{P0,m,1/2}^0 + \sum_t \Psi_{P0,m,1/2} \Delta v = S_{P0,m,1/2} \Delta v, (28)$$

где $\Psi_{P0,m,1/2} = \Psi_{P0,m,1/2}^0$.

Дополнительные соотношения по пространственным переменным для направлений ($\xi_m, \varphi_{m,1/2} = \pi$) задаются также в зависимости от освещенности ячейки.

Алгоритм решения системы сеточных уравнений с заданной правой частью следующий:

Для фиксированного значения ξ_m сначала решается уравнение (28) для направления ($\xi_m, \varphi_{m,1/2} = \pi$) снаружи пространственной области D во внутрь ($\mu_{m,l} < 0$) с учетом граничных условий (18) и дополнительных соотношений по пространственным переменным. Полученное во всех пространственных ячейках решение $\Psi_{P0,m,1/2}$ используется затем в качестве граничного значения для направления ($\xi_m, \varphi_{m,l}$). Сеточные уравнения системы (21) - (26) решаются последовательно для каждого значения $\varphi_{m,l}$, $l = 1, \dots, L_m$, используя граничные условия (18), а также условия (19) для направлений изнутри области D наружу ($\mu_{m,l} > 0$).

Возможны три различных типа освещенности ячейки. Им соответствуют три различных способа задания дополнительных соотношений в зависимости от выбранного направления ($\xi_m, \varphi_{m,l}$). Дополнительные соотношения строятся, используя средние значения функции Ψ на сторонах и в центре пространственной ячейки с общим весовым параметром P , $0 \leq P \leq 1$. Заметим, что рассмотренный нами вид дополнительных соотношений отличается от вида, предложенного в работе [1]. Тем не менее, как и в работе [1], построенные нами дополнительные соотношения обеспечивают либо первый, либо второй порядок аппроксимации, в зависимости от числа освещенных сторон.

Тип освещенности ячейки определяется количеством сторон, у которых $R_{P(i,i+1),m,l} < 0$. Если на стороне $P(i,i+1)$ ячейки $ABCD$ (Рис. 5) величина $R_{P(i,i+1),m,l} < 0$, то частицы входят в ячейку. Если $R_{P(i,i+1),m,l} > 0$, то частицы выходят из ячейки. Если $R_{P(i,i+1),m,l} = 0$, частицы летят вдоль этой стороны, и соответствующее слагаемое в уравнении (21) отсутствует. Это означает, что значение функции $\Psi_{P(i,i+1),m,l}$ не влияет на значение решения в центре четырехугольника, и поэтому такой случай не требует дополнительного рассмотрения. Рассмотрим три типа освещенности ячейки.

Тип 1.

Освещена одна сторона, например, AB (Рис. 5).

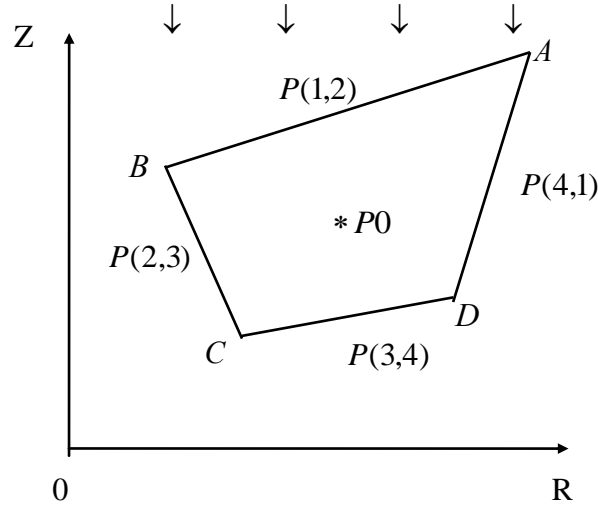


Рис. 5. Освещена одна сторона четырехугольной ячейки.

В этом случае значение $\Psi_{P(1,2),m,l}$ известно. Следующие значения не известны: $\Psi_{P(3,4),m,l}$, $\Psi_{P(2,3),m,l}$, $\Psi_{P(4,1),m,l}$ и $\Psi_{P0,m,l}$. Используется дополнительное соотношение:

$$\Psi_{P(3,4),m,l} = (1 + P)\Psi_{P0,m,l} - P\Psi_{P(1,2),m,l} \quad (29)$$

и два соотношения одного из двух вариантов:

$$1) \Psi_{P(2,3),m,l} = \Psi_{P(3,4),m,l}; \quad \Psi_{P(4,1),m,l} = \Psi_{P(3,4),m,l} \quad (30a)$$

$$2) \Psi_{P(2,3),m,l} = \Psi_{P0,m,l}; \quad \Psi_{P(4,1),m,l} = \Psi_{P0,m,l} \quad (30б)$$

Соотношения (30) понижают порядок аппроксимации схемы в целом. Подставляя (26), (29), (30a) в балансное уравнение (21), получим формулу для вычисления $\Psi_{P0,m,l}$:

$$\Psi_{P0,m,l} \left[(1 + P)(R_{P(2,3),m,l} + R_{P(3,4),m,l} + R_{P(4,1),m,l}) + \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} \alpha^+ (1 + P_\varphi) + \Sigma_t \Delta v \right] = S_{P0,m,l} \Delta v +$$

$$\Psi_{P(1,2),m,l} \left[P(R_{P(2,3),m,l} + R_{P(3,4),m,l} + R_{P(4,1),m,l}) - R_{P(1,2),m,l} \right] + \Psi_\varphi^- \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} (\alpha^+ P_\varphi + \alpha^-)$$

Для вычисления $\Psi_{P0,m,1/2}$ из граничного условия (28) при $\varphi_{m,1/2} = \pi$ используются соотношения (29) и (30а) при $l = 1/2$:

$$\Psi_{P0,m,1/2} [(1+P)(R_{P(2,3),m,1/2} + R_{P(3,4),m,1/2} + R_{P(4,1),m,1/2}) + \Delta s |\mu_{m,1/2}| + \Sigma_t \Delta v] = S_{P0,m,1/2} \Delta v + \Psi_{P(1,2),m,1/2} [P(R_{P(2,3),m,1/2} + R_{P(3,4),m,1/2} + R_{P(4,1),m,1/2}) - R_{P(1,2),m,1/2}]$$

Тип 2.

Освещены две стороны, например, AB и AD (Рис. 6).

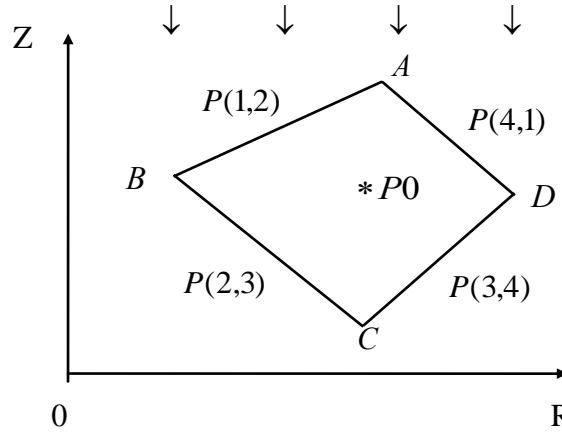


Рис. 6. Освещены две стороны четырехугольной ячейки.

В этом случае значения $\Psi_{P(1,2),m,l}$ и $\Psi_{P(4,1),m,l}$ известны, а значения $\Psi_{P(3,4),m,l}$, $\Psi_{P(2,3),m,l}$ и $\Psi_{P0,m,l}$ не известны. Используются следующие дополнительные соотношения:

$$\Psi_{P(3,4),m,l} = (1+P)\Psi_{P0,m,l} - P\Psi_{P(1,2),m,l} \quad (31)$$

$$\Psi_{P(2,3),m,l} = (1+P)\Psi_{P0,m,l} - P\Psi_{P(4,1),m,l} \quad (32)$$

Подставляя (26), (31) и (32) в (21), получим формулу для вычисления $\Psi_{P0,m,l}$:

$$\Psi_{P0,m,l} [(1+P)(R_{P(2,3),m,l} + R_{P(3,4),m,l}) + \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} \alpha^+ (1+P_\varphi) + \Sigma_t \Delta v] = S_{P0,m,l} \Delta v +$$

$$\Psi_{P(1,2),m,l} [P \cdot R_{P(3,4),m,l} - R_{P(1,2),m,l}] + \Psi_{P(4,1),m,l} [P \cdot R_{P(2,3),m,l} - R_{P(4,1),m,l}] + \Psi_\varphi^- \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} (\alpha^+ P_\varphi + \alpha^-)$$

Для вычисления $\Psi_{P_{0,m,1/2}}$ из граничного условия (28) при $\varphi_{m,1/2} = \pi$ используются соотношения (31) и (32) при $l = 1/2$:

$$\Psi_{P_{0,m,1/2}} [(1+P)(R_{P(2,3),m,1/2} + R_{P(3,4),m,1/2}) + \Delta s |\mu_{m,1/2}| + \Sigma_t \Delta v] = S_{P_{0,m,1/2}} \Delta v + \Psi_{P(1,2),m,1/2} [P \cdot R_{P(3,4),m,1/2} - R_{P(1,2),m,1/2}] + \Psi_{P(4,1),m,1/2} [P \cdot R_{P(2,3),m,1/2} - R_{P(4,1),m,1/2}]$$

Тип 3.

Освещены три стороны, например, АВ, ВС и AD (Рис. 7).

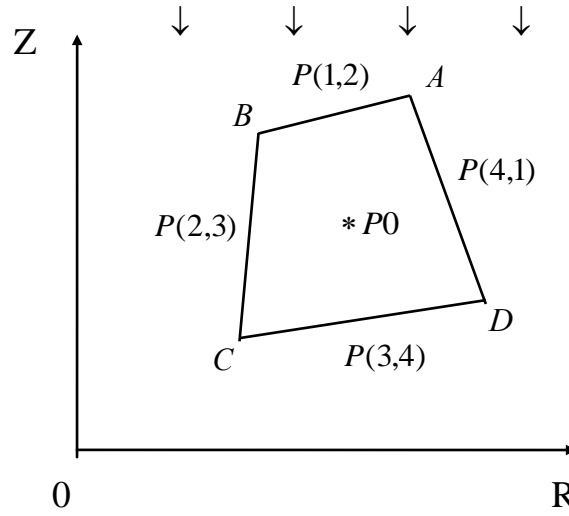


Рис. 7. Освещены три стороны четырехугольной ячейки.

В этом случае известны следующие значения: $\Psi_{P(1,2),m,l}$, $\Psi_{P(2,3),m,l}$, $\Psi_{P(4,1),m,l}$. Значения $\Psi_{P(3,4),m,l}$ и $\Psi_{P_{0,m,l}}$ не известны. Используется следующее дополнительное соотношение:

$$\Psi_{P(3,4),m,l} = (1+P)\Psi_{P_{0,m,l}} - P\Psi_{P(1,2),m,l} \quad (33)$$

Подставляя (26) и (33) в (21), получим формулу для вычисления $\Psi_{P_{0,m,l}}$:

$$\Psi_{P_{0,m,l}} [(1+P)R_{P(3,4),m,l} + \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} \alpha^+ (1+P_\varphi) + \Sigma_t \Delta v] = S_{P_{0,m,l}} \Delta v - \Psi_{P(4,1),m,l} R_{P(4,1),m,l} - \Psi_{P(2,3),m,l} R_{P(2,3),m,l} + \Psi_{P(1,2),m,l} [P \cdot R_{P(3,4),m,l} - R_{P(1,2),m,l}] + \Psi_\varphi^- \frac{\Delta s}{\omega_{m,l}} (\alpha^+ P_\varphi + \alpha^-)$$

Для вычисления $\Psi_{P0,m,1/2}$ из граничного условия (28) при $\varphi_{m,1/2} = \pi$ используется соотношение (33) при $l = 1/2$:

$$\Psi_{P0,m,1/2} [(1+P)R_{P(3,4),m,l} + \Delta s |\mu_{m,1/2}| + \Sigma_t \Delta v] = S_{P0,m,1/2} \Delta v - \Psi_{P(4,1),m,1/2} R_{P(4,1),m,1/2} - \Psi_{P(2,3),m,1/2} R_{P(2,3),m,1/2} + \Psi_{P(1,2),m,1/2} [P \cdot R_{P(3,4),m,1/2} - R_{P(1,2),m,1/2}]$$

Скалярный поток нейтронов вычисляется по формуле:

$$\Phi_{P0} = 2 \sum_{m,l} \Psi_{P0,m,l} \cdot \omega_{m,l} \quad (34)$$

4. Численные результаты.

Приведем результаты численного решения одногруппового стационарного уравнения переноса нейтронов. Рассматривается однородная сфера радиуса $\hat{R} = 1.5 \text{ см}$. Поток частиц извне отсутствует. Параметры задачи: макроскопическое полное сечение, макро-сечения рассеяния и размножения, а так же внутренний независимый источник нейтронов взяты из работы [1]:

$$\Sigma_t = 1.0 \text{ см}^{-1}, \quad \omega_{n,0} = \Sigma_s = 1.5 \text{ см}^{-1}, \quad \nu \Sigma_f = 0, \quad Q = 1 \text{ см}^{-3} \quad (35)$$

Требуется вычислить распределение частиц, решая уравнение переноса (13) в сферической области.

Четырехугольная пространственная сетка задачи строилась следующим образом: по углу ϑ полусфера разбивалась равномерно на 18 секторов радиусами, выходящими из центра сферы; по радиусу границы интервалов задавались точками:

$$R_k = 0.15k, \quad k = 0, \dots, 8, \quad R_9 = 1.332572, \quad R_{10} = 1.41069, \quad R_{11} = 1.456722, \quad R_{12} = 1.483846, \quad R_{13} = 1.5.$$

Для того, чтобы во всех расчетах объем шара и тела, порождаемого двумерной сеткой совпадали, указанные радиусы R_k умножались на соответствующий множитель. После этого сферические координаты (R, ϑ) узлов сетки пересчитывались в цилиндрические координаты (r, z) . Треугольники в центре сферы рассматривались как четырехугольники, у которых две вершины совпадают.

Для проверки точности схемы использовалась сферически-симметричная одномерная задача, так как она является существенно двумерной для

цилиндрической системы координат и позволяет провести сравнение результатов, полученных по двумерному и одномерному расчетам.

В одномерном варианте этой задачи решалось сферически-симметричное уравнение переноса:

$$\mu \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \Psi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} ((1 - \mu^2) \Psi) + \Sigma_t(r) \cdot \Psi(r, \mu) = S(r) \quad (36)$$

$$S(r) = \frac{1}{4\pi} \Sigma_s(r) \Phi(r) + \frac{1}{4\pi} \nu \Sigma_f \Phi(r) + \frac{1}{4\pi} Q(r)$$

$$\Phi(r) = 2\pi \int_{-1}^1 \Psi(r, \mu) d\mu, \quad 0 \leq r \leq \hat{R}, \quad -1 \leq \mu \leq +1$$

с теми же параметрами (35).

В Таблице 1 приведено распределение скалярной плотности потока частиц (34) по некоторым секторам в двумерном расчете по программе NPTQ и значения скалярной плотности потока для одномерных расчетов с совпадающими сетками по радиусу и по углу (S_6 квадратура Гаусса) по программам KIN1D и американской программе ANISN.

Таблица 1. Результаты расчетов по двумерной и по одномерным программам.

Номер точки по R	Двумерный расчет (NPTQ)					Одномерный расчет	
	0° – 10°	20° – 30°	40° – 50°	60° – 70°	80° – 90°	KIN1D	ANISN
1	18.71	18.85	18.92	19.07	19.20	19.121	19.120
4	17.15	17.25	17.08	17.17	17.22	17.443	17.442
7	12.63	12.68	12.57	12.64	12.68	12.893	12.892
10	7.03	7.05	7.05	7.04	7.04	7.220	7.220
13	4.87	4.84	4.88	4.84	4.89	4.993	4.993

Из Таблицы 1 видно, что результаты, полученные в двумерной геометрии на сетке, состоящей из выпуклых четырехугольников, и в одномерной геометрии близки друг к другу. Вблизи точки (0,0) имеется разброс значений потока в пределах величины 0.5. Это объясняется тем, что численное решение

предполагает разрыв в этой точке для сохранения баланса частиц в системе. Полное число нейтронов в системе равно 145.87 для двумерного расчета и 148.4 для одномерного.

Аналогичные результаты, полученные в работе [1], используя ту же сетку по пространственным переменным и квадратуру S_6 [2] по угловым переменным, представлены в Таблице 2. Результаты расчетов, полученные в двумерной геометрии на сетке, состоящей из выпуклых четырехугольников, и в одномерной геометрии менее близки друг к другу. Вблизи точки (0,0) разброс значений потока составляет 1.23, т.е. существенно больше. Для сравнения полное число нейтронов в системе из работы [1]: 151.2 и 148.2 соответственно.

Таблица 2. Результаты расчетов [1] по двумерной программе и по одномерным программам.

Номер точки по R	Двумерный расчет					Одномерный расчет
	$0^\circ - 10^\circ$	$20^\circ - 30^\circ$	$40^\circ - 50^\circ$	$60^\circ - 70^\circ$	$80^\circ - 90^\circ$	
1	21.54	20.96	20.67	20.51	20.31	19.177
4	18.63	18.19	17.92	17.99	17.88	17.495
7	13.64	13.24	13.03	13.07	13.01	12.846
10	7.57	7.33	7.26	7.23	7.21	7.149
13	5.29	5.04	5.03	4.96	5.00	4.923

5. Заключение

Опыт использования предложенной схемы для решения уравнения переноса на сетках, образованных произвольными выпуклыми четырехугольниками, показывает, что схема не уступает по точности аналогичной схеме, предложенной в работе [1]. Для получения решения с более высокой степенью точностью необходимо повысить порядок аппроксимации дополнительных соотношений по пространственным переменным.

В дальнейшем предполагается обобщить данную схему на нестационарный случай.

6. Литература

1. В.Е. Трощев, В.А. Шумилин. Разностная схема решения двумерного уравнения переноса на нерегулярных четырехугольных сетках. *ЖВМиМФ*, № 2, Т. 26, 1986.
2. Carlson B.G. The numerical theory of neutron transport. *Methods in Computational physics. Vol. 1*, N.Y.: Acad. Press, 1963.