

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 519.63

ЗАМЕЧАНИЕ ОБ УЛУЧШЕНИИ СХОДИМОСТИ МЕТОДА ПРОСТОЙ
ИТЕРАЦИИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

© 2022 г. В. В. Завьялов*

ФГУП “РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина”, Снежинск, 456770 Россия

*E-mail: v.v.zavialov@vniitf.ru

Поступила в редакцию 18.02.2021 г.

После доработки 19.07.2021 г.

Принята к публикации 26.07.2021 г.

В работе рассматривается модификация метода простой итерации применительно к нестационарной спектральной системе уравнений переноса теплового излучения в кинетической постановке. Модификация основывается на дополнительном этапе для уточнения величины интегральной интенсивности. При этом используется информация, накопленная ранее на этапе расчета кинетического уравнения, что позволяет более точно учесть изменение поведения решения и за счет этого повысить скорость сходимости итерационного процесса. Для иллюстрации приводятся результаты расчетов двух тестовых задач в плоской геометрии.

Ключевые слова: перенос излучения, итерационный метод

DOI: 10.56304/S2079562922010420

1. ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование процессов лучистого теплообмена в спектральной кинетической модели является сложной проблемой, обусловленной, прежде всего, большой размерностью задачи и ее сильной нелинейностью. Для численного решения этой проблемы общепризнанными подходами являются метод Монте-Карло и детерминистические методы. В последнем случае необходимость решать систему нелинейных дискретных уравнений делает актуальным выбор итерационного процесса [1–5]. Несмотря на значительные усилия, прилагаемые в этом направлении, например, можно отметить классическую работу [5] не потерявшую значимость и в настоящее время, вопрос, по мнению автора, остается открытым, например [6–15]. Вообще говоря, для решаемой системы применим широкий набор методов из арсенала линейной алгебры. Можно отметить серьезное внимание уделяемое близким по своей идее многосеточным методам и методам ребаланса. В этом случае делается попытка получить решение системы путем использования последовательностей уменьшающихся сеток и операторов перехода между ними, что подразумевает экономию вычислительного времени. Также существует большое количество подходов, связанное с возможностью упрощения исходной кинетической модели уравнения переноса. В этом случае поправочная система решает-

ся для уравнений меньшей размерности, например диффузионного типа или осредненная по энергии частиц. Однако, несмотря на возможную экономичность, подходы основанные на понижении размерности исходной системы, часто оказываются сложны в реализации, поскольку необходимо согласовывать исходную систему с упрощенной на дискретном уровне. Это может оказаться проблематичным для многомерных задач со сложной геометрией [15]. Из решаемой системы естественным образом вытекает метод простой итерации (simple iteration), который часто называют методом итераций по интегралу столкновений или итераций по правой части. Однако он сильно деградирует с увеличением оптической толщины. Тем не менее он стал базовым для многих методов ускорения сходимости итерационного процесса, например для используемого автором метода выделения диагонального элемента [16–18]. Здесь подразумевается ускорение именно относительно метода простой итерации. В общем случае, существуют классы задач, где скорость сходимости исходного метода простой итерации является приемлемой. Рассмотрим способ повышения эффективности этого метода. Не умаляя общности, будем использовать многогрупповое приближение для учета спектра фотонов и метод дискретных ординат для решения кинетического уравнения в одномерных геометриях.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Система уравнений, описывающая распространение теплового излучения, состоит из спектрального кинетического уравнения переноса, описывающего перенос, поглощение и рассеяние теплового излучения, и уравнения энергии среды, характеризующего изменение температуры вещества за счет поглощения и испускания фотонов веществом. В многогрупповом приближении без учета движения среды для изотропного рассеяния она выглядит следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_g}{c \partial t} + \nabla \cdot (\Omega I_g) + \alpha_g I_g &= \frac{\alpha_{cg}}{4\pi} B_g + \frac{\alpha_{sg}}{4\pi} \int_{\Omega} I_g d\Omega, \\ \rho \frac{\partial E}{\partial t} &= \sum_g \alpha_{cg} \left(\int_{\Omega} I_g d\Omega - B_g \right) \Delta \varepsilon_g. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь g – индекс энергетической группы ($g = 0, \dots, \hat{g}$), ε_g – энергия фотонов группы g , $\Delta \varepsilon_g = \varepsilon_{g+1} - \varepsilon_g$, $I_g(\mathbf{r}, \Omega, t)$ – интенсивность излучения группы g , $T(\mathbf{r}, t)$ – температура среды, $\alpha_g(T, \rho) = \alpha_{cg} + \alpha_{sg}$ – коэффициент ослабления, $\alpha_{cg}(T, \rho)$ – коэффициент поглощения, $\alpha_{sg}(\rho)$ – коэффициент рассеяния, $E(T, \rho)$ – удельная внутренняя энергия вещества, $B_g(T)$ – плотность равновесного излучения (функция Планка), \mathbf{r} – радиус-вектор, Ω – единичный вектор в направлении полета фотона, t – время, $\rho(\mathbf{r}, t)$ – плотность вещества, c – скорость света.

Для системы уравнений (1) в области Γ пространства \mathbb{R}^1 с замкнутой границей $\bar{\Gamma}$ решается смешанная задача со следующими начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} I_g(\mathbf{r}, \Omega, t = 0) &= I_g^0(\mathbf{r}, \Omega), \quad I_g(\mathbf{r} \in \bar{\Gamma}, \mathbf{n} \leq \Omega < 0, t) = \\ &= \bar{I}_g(\mathbf{r} \in \bar{\Gamma}, \Omega, t), \quad T(\mathbf{r}, t = 0) = T^0(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

где \mathbf{n} – внешняя нормаль к $\bar{\Gamma}$.

Обозначим через $U_g(\mathbf{r}, t) = \int_{\Omega} I_g d\Omega$ плотность энергии излучения группы g , умноженную на скорость света c (интегральная интенсивность). Для решения системы (1) на каждом временном шаге используем общепотребительный вариант метода простой итерации. На первом этапе ($v + 1/2$) производим бегущий счет решения уравнения переноса при известных граничных условиях и правой части для каждого направления полета частицы. Далее ($v + 1$ этап), линеаризуя функцию Планка и уравнение состояния, вычисляем температуру из второго уравнения (1), полагая $U_g^{v+1} = U_g^{v+1/2}$. По достижении заданного условия сходимости цикл прекращается, и мы переходим к следующему временному шагу (индекс $n + 1$). Данный процесс характеризуется медлен-

ной скоростью сходимости, особенно в оптически плотной среде ($h\alpha_g \gg 1$, где h – характерный размер рассматриваемой области). Поскольку применение явных схем для большинства практических задач затруднительно, запишем метод простой итерации следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_g^{v+1/2}}{c \partial t} + \nabla \cdot (\Omega I_g^{v+1/2}) + \alpha_g I_g^{v+1/2} &= \\ &= \frac{\alpha_{cg}^v}{4\pi} B_g^v + \frac{\alpha_{sg}^v}{4\pi} \int_{\Omega} I_g^v d\Omega, \\ \rho^{n+1} \frac{\partial E^{v+1}}{\partial t} &= \sum_g \alpha_{cg}^v (U_g^{v+1} - B_g^{v+1}) \Delta \varepsilon_g. \end{aligned} \quad (2)$$

Для решения данной системы дискретизируем счетное фазовое пространство $\Gamma \times \Omega \times t$. Применяя метод дискретных ординат, вычислим величину $I_g^{v+1/2}$ в центре некоторой счетной ячейки i . В общем случае возможно применение различных методов решения кинетического уравнения (конечных объемов, конечных элементов, характеристик или других). Представим используемую схему в виде

$$\begin{aligned} I_{g,i,m}^{v+1/2} &= \tilde{u}_{g,i}^{v+1/2} + \tilde{u}_{g,i}^v U_{g,i}^v + \bar{u}_{g,i}^{v+1/2} \bar{T}_{g,i,m}^{v+1/2} = \\ &= \tilde{u}_{g,i}^{v+1/2} + \tilde{u}_{g,i}^v U_{g,i}^v + \bar{u}_{g,i}^{v+1/2} d_{g,i,m}^{v+1/2} I_{g,i,m}^{v+1/2}, \\ d_{g,i,m}^{v+1/2} &= \bar{T}_{g,i,m}^{v+1/2} / I_{g,i,m}^{v+1/2}, \end{aligned} \quad (3)$$

здесь $\bar{T}_{g,i,m}$ – входящая интенсивность из соседних ячеек, $m = 0, \dots, \hat{m}$ – индекс дискретного направления полета частицы, $\tilde{u}_g, \check{u}_g, \bar{u}_g$ – коэффициенты используемой схемы, зависящие от \mathbf{r}, Ω, t .

Расширим шаблон схемы, рекуррентно выражая $\bar{T}_{g,i,m}^{v+1/2}$ через значения в предыдущих ячейках.

Для этого введем $k_{g,i,m}^{v+1/2}$ – параметр, характеризующий расширение шаблона для решения кинетического уравнения

$$0 \leq k_{g,i,m}^{v+1/2} \Big|_{\mathbf{n} \cdot \Omega_m > 0} \leq i, \quad 0 \leq k_{g,i,m}^{v+1/2} \Big|_{\mathbf{n} \cdot \Omega_m < 0} \leq \hat{i} - i.$$

Пусть

$$\begin{aligned} J_g^{v+1/2}(i, g, m, k, \hat{k}) &= \\ &= \begin{cases} J_g^{v+1/2}(i, g, m, k, \hat{k} = 0) = I_{g,*}^{v+1/2}, \\ J_g^{v+1/2}(i, g, m, k, \hat{k} \neq 0) = \tilde{u}_{g,*}^{v+1/2} + \check{u}_{g,*}^v U_{g,*}^v + \\ + \bar{u}_{g,*}^{v+1/2} d_{g,*}^{v+1/2} J_g^{v+1/2}(i, g, m, k, \hat{k} - 1), \end{cases} \end{aligned}$$

где обозначено $*$ = $i - (k - \hat{k})(\mathbf{n} \cdot \Omega_m)$ – пространственный индекс.

Тогда, согласно введенному определению интегральной интенсивности, можно записать ее дискретный аналог, используя (3)

Таблица 1. Количество итераций, тест 1А (псевдорассеяние)

	–	0	1	5	40
α_1	37	30	27:28:30	24:26:29	22:25:29
α_2	121	100	93:96:100	86:91:100	83:88:100
α_3	738	624	595:605:624	578:591:623	574:588:623

Таблица 2. Количество итераций, тест 1В (псевдорассеяние)

	–	0	1	5	40
α_1	106	86	80:83:86	72:78:85	68:74:65
α_2	216	174	161:166:173	150:157:173	146:154:173
α_3	1003	837	799:811:836	778:794:836	775:791:836

Таблица 3. Количество итераций, тест 1В

	–	0	1	5	40
α_1	106	91	88:90:91	82:86:91	79:83:91
α_2	216	198	195:196:198	189:193:198	187:191:198
α_3	1003	977	973:974:977	968:971:977	967:970:976

$$\begin{aligned}
 U_{g,i}^{v+1/2} &= \sum_m I_{g,i,m}^{v+1/2} \Delta\Omega_m = \\
 &= \sum_m (J_g^{v+1/2}(i, g, m, k, k)) \Delta\Omega_m.
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Соответственно, мы можем использовать выражение (4) на этапе решения уравнения энергии в каждой ячейке. Таким образом, производится некоторая реконструкция интегрального по угловой переменной шаблона схемы и, в отличие от простой итерации, уточняется значение U_g^{v+1} . Расширяя реконструируемый шаблон и используя при этом полученные после этапа счета кинетического уравнения величины $U_g^{v+1/2}$, можно рассчитывать на повышение точности вычисления искомых величин U_g^{v+1}, T^{v+1} .

Отметим, что существует способ записи уравнения с псевдорассеянием (pseudoscattering), впервые, видимо, предложенный в [19] для решения системы (1) методом Монте-Карло. Идея заключается в использовании записи уравнения

энергии для линеаризации функции Планка в кинетическом уравнении. Будем использовать общеизвестную линеаризацию по Ньютону второго порядка и разностную аппроксимацию первого порядка по времени, хотя возможно применение и других способов [14]. Тогда

$$\begin{aligned}
 B_g^{v+1} &= B_g^v + \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^v (T^{v+1} - T^v) = B_g^v + \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^v \times \\
 &\Delta t^n \sum_g \Delta \epsilon_g \alpha_{cg}^v (U_g^v - B_g^v) + \rho^{n+1} (E^n - E^v) \\
 &\times \frac{\Delta t^n \sum_g \Delta \epsilon_g \alpha_{cg}^v \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^v + \rho^{n+1} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)^v}{\Delta t^n \sum_g \Delta \epsilon_g \alpha_{cg}^v \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^v + \rho^{n+1} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)^v}.
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

Таким образом, линеаризуя B_g^v в уравнении переноса (2) и подставляя (5) в правую часть, мы получим запись в форме псевдорассеяния. В этом случае принципиально важно появление нового члена, содержащего U_g^v с некоторым множителем, который можно считать сечением рассеяния. Соответствующим образом изменятся коэффициенты \tilde{u}_g, \tilde{y}_g в формуле (4).

Для исследования эффективности изложенного подхода далее приводятся тестовые расчеты.

3. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Рассмотрим два теста в плоской геометрии для стационарного расчета. В задачах полагалось $T^0 = 1$ кэВ, $\rho = 1$ г/см³, $x \in [0, 4]$ см, $\Delta x = 0.1$ см, $E = 0.81T$, $\tilde{\alpha} = \{1, 10, 100\}$. По угловой переменной $\mu \in [-1, 1]$ использовалась гауссова квадратура с 20 узлами. На правой границе области задано излучение планковского источника температуры $T = 1$, на левой – условие свободной поверхности. Итерации по U_g сводились с точностью до величины 10^{-5} . Расчеты проводились с использованием противопоточной, положительной, монотонной схемы первого порядка точности (St-схемы) метода дискретных ординат. В обоих тестах варьировалась оптическая толщина и величина расширения шаблона. Параметр k_m принимался не зависящим от итераций, энергетической группы и номера ячейки. В табл. 1–4 приводится количество итераций. В каждом столбце свое значение k_m , которое зануляется в зависимости от μ_m .

Таблица 4. Количество итераций, тест 2

	–	0	1	5	40
α_1	93	77	72:75:77	65:70:77	60:66:76
α_2	2020	1290	1230:1248:1289	1199:1221:1288	1198:1220:1288
α_3	20719	12776	12669:12691:12772	12662:12685:12685	12662:12685:12685

В ячейках, где $k_m \geq 1$, три расчета в формате “ $k_m \neq 0$; $k_m \neq 0, |\mu_m| \in [0.5, 1]$; $k_m \neq 0, |\mu_m| \in [0.98, 1]$ ”, что означает включение в увеличенный шаблон 20,14,2 направлений μ_m . Выбор значений $k_m = 0, 1, 5, 40$ обусловлен тем фактом, что примерно при $k_m \geq 9$ для данных тестов эффект от расширения шаблона нивелируется. Проверка означает исходный вариант простой итерации.

Задача 1. Модифицированная первая задача Флека [19] в двух вариантах. В варианте А, как и в оригинале, рассеяние отсутствует, в варианте В добавлено рассеяние $\alpha_{sg} = 1 \text{ см}^{-1}$. Коэффициенты поглощения

$$\alpha_{cg} = \tilde{\alpha} \epsilon_g^{-3} (1 - e^{-\epsilon_g/T}).$$

По энергии фотонов бралось 15 групп со следующими значениями $\epsilon_g = 0, 0.3, 0.6, 0.8, 1.2, 1.5, 1.8, 2.4, 2.7, 3, 4, 5, 7, 9, 11, 15 \text{ кэВ}$. Расчеты выполнялись с применением модели псевдорассеяния (5) и без нее.

Задача 2. Чисто рассеивающая (консервативная) среда в приближении “серой материи” с коэффициентами $\alpha_{sg} = \tilde{\alpha}$. Моделируется задача аналогичная переносу нейтронов в односкоростном приближении в наиболее «проблемном» для метода простой итерации случае, когда $\alpha_{sg}/\alpha_g = 1$ [3–5].

По результатам численных экспериментов можно сделать следующие выводы. При увеличении оптической толщины на порядок количество итераций значительно увеличивается. Например, для теста 2 эти изменения практически сопоставимы. Соответственно, аналогично снижается эффективность исследуемого подхода и расширение шаблона слабо улучшает сходимость. Существует прямая зависимость от количества включаемых в расширяемый шаблон направлений μ_m . Использование модели псевдорассеяния в исходном методе простой итерации не меняет скорость его сходимости.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе численно исследовалась модификация метода простой итерации для моделирования системы уравнений переноса теплового излучения. На первом этапе решается кинетическое уравнение и накапливаются коэффициенты, используемые для получения решения в рамках применяемого численного метода. Коэффициенты схемы суммируются с учетом направления характеристик, входящих в ячейку, что приводит к системе уравнений значительно меньшей размерности. На втором этапе производится реконструкция интегрального шаблона схемы с возможным расширением и решается уравнение энергии. При этом временные затраты на итера-

цию увеличиваются незначительно. Подобный подход поддерживает первоначальную логику решения, не требует существенных изменений программ и, по мнению автора, может быть использован во многих алгоритмах распараллеливания. Он был реализован для одномерных геометрий и протестирован для различных схем. Два показательных примера демонстрируют возможность его применения на практике. К недостаткам можно отнести дополнительные затраты по памяти, которые увеличиваются в зависимости от расширения шаблона. Тем не менее даже для наиболее простых в реализации на практике случаев $k_{g,i,m} = 0, 1$ выигрыш может достигать более 20%, как это следует из примеров. Использование модели псевдорассеяния не только заметно улучшает сходимость, но и позволяет использовать рассмотренную модификацию в случае пренебрежения коэффициентом рассеяния, что часто встречается в задачах теплового переноса излучения. Также положительным моментом является наблюдаемое, как правило, улучшение баланса расчета.

Очевидно, что данная модификация не способна значимо улучшить метод простой итерации. Однако представляется, что изложенный подход может быть полезен в сочетании с другими итерационными методами. Автором планируется использовать его для метода выделения диагонального элемента [18] в двумерной геометрии [20]. Отметим, что идея расширения разностного шаблона была предложена М.Ю. Козмановым в [17]. Несмотря на то, что в работе рассматривается случай лучистого переноса, можно предположить, полагаясь на результаты теста 2, что рассматриваемая модификация даст выигрыш при моделировании других задач переноса нейтральных частиц.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность Путниковой С.Л. за помощь в написании программы и проведении тестовых расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Оцисик М.Н.* Сложный теплообмен. 1976. Москва: Мир.
2. *Четверушкин Б.Н.* Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. 1985. Москва: Наука.
3. *Марчук Г.И., Лебедев В.И.* Численные методы в теории переноса нейтронов. 1981. Москва: Атомиздат.
4. *Басс Л.П., Волощенко А.М., Гермогенова Т.А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. 1986. Москва: ИПМ им. Келдыша АН СССР.
5. *Adams M.L., Larsen E.W.* // Prog. Nucl. Energy. 2002. V. 40 (1). P. 3–159.

6. Rosa M., Warsa J.S., Chang J.H. // Nucl. Sci. Eng. 2010. V. 164 (3). P. 248–263.
7. Warsa J.S., Thompson K., Morel J.E. // Trans. Am. Nucl. Soc. 2003. V. 89. P. 449–451.
8. Knoll D.A., Park H., Smith K.S. // Nucl. Sci. Eng. 2011. V. 167. P. 122–132.
9. Yamamoto A. // Nucl. Sci. Eng. 2005. V. 151. P. 274–282.
10. Wolters E.R., Larsen E.W., Martin W.R. // Nucl. Sci. Eng. 2013. V. 174. P. 286–299.
11. Jung Y.S., Yang W.S. // Nucl. Sci. Eng. 2017. V. 185 (2). P. 307–324.
12. Turcksin B., Ragusa J., Morel J.E. // Transp. Theory Stat. Phys. 2012. V. 41. P. 1–22.
13. Hanophy J. et al. // Nucl. Sci. Eng. 2020. V. 194. P. 989–1008.
14. E.W. Larsen // J. Comput. Phys. 1988. V. 78 (2). P. 459–480.
15. Warsa J.S., Wareing T.A., Morel J.E. // Nucl. Sci. Eng. 2004. V. 147 (3). P. 218–248.
16. Гусев В.Ю., Козманов М.Ю., Рачилов Е.Б. // Журн. вычисл. мат. мат. физ. 1984. Т. 24. № 12. С. 1842–1849.
17. Гусев В.Ю., Завьялов В.В., Козманов М.Ю. // ВАНТ. Сер. “Математическое моделирование физических процессов”. 2003. № 2. С. 21–27.
18. Завьялов В.В., Шестаков А.А. // Математическое моделирование. 2010. Т. 22. № 2. С. 93–104.
19. Fleck J.A., Cummings J.D. // J. Comput. Phys. 1971. V. 8 (3). P. 313–342.
20. Гаджиев А.Д., Завьялов В.В., Шестаков А.А. // ВАНТ. Сер. “Математическое моделирование физических процессов”. 2010. № 2. С. 30–39.

A Remark on Improving Convergence of the Simple Iteration Method in Radiative Transfer Problems

V. V. Zaviyalov*

Russian Federal Nuclear Center—Zababakhin All-Russia Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, 456770 Russia

*e-mail: v.v.zaviyalov@vniitf.ru

Received February 18, 2021; revised July 19, 2021; accepted July 26, 2021

Abstract—The paper briefly describes a modification to the simple iteration method as applied to the system of nonstationary spectral radiative heat transfer equations in kinetic model. The modification involves an additional stage where the integral intensity is adjusted on the basis of information accumulated at earlier stage of kinetic equation calculation. This allows us to more accurately consider how the solution evolves and thus improve convergence of iterations. As an illustration, results of two test problems in slab geometry are provided.

Keywords: radiative heat transfer, iteration method