



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 13 за 2024 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Е.Н. Аристова, Г.О. Астафуров

Высокоточная схема для
уравнения переноса в задаче
нейтронной защиты

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Аристова Е.Н., Астафуров Г.О. Высокоточная схема для уравнения переноса в задаче нейтронной защиты // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 13. 21 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-13>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-13>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук**

Е.Н. Аристова, Г.О. Астафуров

**Высокоточная схема для уравнения
переноса в задаче нейтронной защиты**

Москва — 2024

Аристова Е.Н., Астафуров Г.О.

Высокоточная схема для уравнения переноса в задаче нейтронной защиты

В работе рассмотрены задачи расчета стационарного переноса высокоэнергетичных нейтронов от внешнего источника в полой металлической конструкции. Пространственная сетка для расчета состоит из тетраэдров, которые позволяют моделировать сложные геометрические формы объектов. Расчетная область сильно гетерогенная, поскольку состоит из металлических частей с сильным поглощением и рассеянием и практически непоглощающими внутренними частями. Для расчета использована схема на минимальном шаблоне, включающем единственный тетраэдр. Схема обладает высоким порядком аппроксимации и строится на основе характеристических подходов. Для гладкого решения и постоянного в каждой ячейке коэффициента поглощения схема обладает третьим порядком сходимости. Обход ячеек осуществляется при помощи алгоритма топологической сортировки графа. Построен новый вариант распараллеливания расчета для стандарта OpenMP. Для дискретизации по угловой переменной используется кубатурная формула типа прямого произведения по двум углам с алгебраическим порядком точности девять. Угловая сетка строится таким образом, чтобы правильно вычислять кубатуры для узконаправленных пучков внешнего излучения. Для энергетической дискретизации используется стандартное 26-групповое приближение библиотеки БНАБ. Показано уменьшение потока нейтронов внутри конструкции для групп с энергией выше 1 МэВ. Приведены графики углового распределения внутри конструкции.

Ключевые слова: уравнение переноса, перенос нейтронов, характеристическая схема, схема на тетраэдрах, проекционно-характеристический метод, высокий порядок аппроксимации, компактный шаблон

Elena Nikolaevna Aristova, Gleb Olegovich Astafurov

High accuracy scheme for solving neutron defense transport problem

The paper considers the problems of calculating the stationary transport of high-energy neutrons from an external source in a hollow metal structure. The spatial grid for calculation consists of tetrahedra, which allows to model complicated geometric shapes of objects. The calculated area is highly heterogeneous, since it consists of metal parts with strong absorption and scattering and practically non-absorbing internal parts. A scheme based on a minimal stencil, within a single tetrahedron for the calculation. The scheme has a high approximation order and is based on characteristic approaches. For a smooth solution and a constant absorption coefficient in each cell, the scheme has a third order of convergence. The cells are traversed using the graph topological sorting algorithm. A new version of the parallelization of the calculation for the OpenMP standard has been proposed. For discretization by an angular variable, a cubature formula of the direct product type over two angles with an algebraic order of accuracy of nine is used. The angular grid is constructed in such a way as to correctly calculate the moments for narrowly directed beams of external radiation. The standard 26-group approximation of the BNAB library is used for energy sampling. A decrease in the neutron flux inside the structure is shown for groups with an energy above 1 MeV. Graphs of the angular distribution inside the structure are given.

Key words: transport equation, neutron transport, characteristic scheme, tetrahedral scheme, projection-characteristic method, high order of approximation, compact stencil

Оглавление

Введение и мотивация, требования для схемы	5
Бескоординатное описание метода СРР	6
Верификация метода СРР на аналитическом тесте	9
Задача нейтронной защиты	11
Заключение.....	20
Библиографический список.....	21

Введение и мотивация, требования для схемы

Задачи защиты от проникающих излучений подразумевают решение уравнения переноса для технических устройств со сложной геометрией при известном падающем излучении или потоке нейтронов. Сложная геометрия устройств может быть хорошо описана тетраэдральными сетками. Внешнее падающее излучение может иметь сложное угловое распределение, приближающееся к δ -функции. В работе [1] предложен численный метод СРР для решения уравнения переноса на тетраэдральных сетках, а в работе [2] проведена его верификация. При создании метода руководствовались следующими требованиями:

- Численный метод должен обладать минимальным шаблоном в рамках одного тетраэдра, чтобы правильно учитывать эффект от резкого изменения коэффициентов поглощения между соседними ячейками. Тетраэдральные сетки позволяют моделировать среды со сложным пространственным распределением оптических характеристик, таких как коэффициент поглощения/рассеяния.
- Численный метод должен одинаково хорошо справляться с расчетом оптически тонких и оптически толстых ячеек. Это связано с тем, что при дискретизации по энергетической переменной (в рамках, например, метода лебеговского осреднения спектра) в каждой пространственной ячейке может наблюдаться широкий диапазон изменения коэффициента поглощения на несколько порядков для разных точек энергетического спектра (лебеговых аналогов энергетических групп).
- Метод должен быть основан на характеристических свойствах уравнения переноса, так как в оптически толстых ячейках это позволяет явно учитывать экспоненциальное затухание решения. Кроме того, характеристические свойства позволяют реализовать эффективный алгоритм последовательного разрешения ячеек.
- Метод должен иметь высокий порядок аппроксимации. Высокий порядок аппроксимации позволяет получать хорошую точность вычислений для не слишком подробных сеток.
- Метод должен быть экономичным по расходу памяти и расчетного времени, поскольку стационарная функция распределения излучения/нейтронов зависит от многих переменных: трех пространственных, двух угловых и одной энергетической, чтократно увеличивает затрачиваемый вычислительный ресурс.

В попытках создать схему более высокого, чем первый, порядка на тетраэдрах были предложены схемы порядков 2 и 2,5 [3, 4] интерполяционно-характеристического типа. Метод СРР (CubicPolynomialProjection) [1, 2], применению которого посвящена данная работа, относится к классу методов

коротких характеристик. Во-первых, он позволил отказаться от ненужных условий непрерывности численного решения в общих элементах ячейки (что роднит его с разрывными методами Галеркина и позволяет ввести новое распараллеливание), во-вторых, позволил исключить из рассмотрения проблемы при компланарном направлении характеристики одной из граней ячейки, в-третьих, позволил корректно ввести единый проекционный многочлен на неосвещенных гранях ячейки на основе разрывного аналитического решения. В работе [5] описывается алгоритм обхода ячеек в методе коротких характеристик, основанный на теории графов. В работе [1] математически доказаны оценки точности для метода СРР. Идея использования ортопроектора в качестве замыкающего оператора, лежащая в основе метода СРР, была позаимствована из работы [6], где эта идея была реализована О.В. Николаевой для полиномов первой степени. В методе СРР используется ортопроектор на пространство полиномиальных функций степени не выше трех.

Бескоординатное описание метода СРР

Метод СРР относится к классу сеточно-характеристических. Расчетная пространственная область Ω заполняется ячейками-тетраэдрами \mathcal{T} . Внутри ячеек коэффициенты поглощения и рассеяния полагаются постоянными. Фиксируется направление излучения (нейтронов) ω . Граница каждой ячейки \mathcal{T} разбивается на освещенную $\partial\mathcal{T}_-$ и неосвещенную $\partial\mathcal{T}_+$ части относительно ω . К освещенной части границы относятся те граничные точки, в которых вектор внешней нормали образует тупой угол с ω , а к неосвещенной – точки с острым углом. В каждой ячейке-тетраэдре \mathcal{T} рассматривается задача переноса

$$\begin{cases} \langle \mathbf{grad} \varphi, \omega \rangle + \sigma_{\mathcal{T}} \varphi = F, \\ \varphi|_{\partial\mathcal{T}_-} = f. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь F – известная функция источников, f – граничное условие, заданное на освещенной границе $\partial\mathcal{T}_-$ ячейки, $\sigma_{\mathcal{T}}$ – коэффициент поглощения в ячейке \mathcal{T} . Уравнение переноса (1) обладает характеристиками – прямыми, параллельными ω . Интегрирование вдоль характеристик позволяет записать решение задачи (1) в аналитической форме:

$$\begin{aligned} \varphi(x + s\omega) &= \\ &= \exp(-s\sigma_{\mathcal{T}}) f(x) + \int_0^s F(x + t\omega) \exp(-(s-t)\sigma_{\mathcal{T}}) dt. \end{aligned} \quad (2)$$

Формула (2) задает два линейных разрешающих оператора $\mathbb{S}_{\sigma_{\mathcal{T}}}, \mathbb{T}_{\sigma_{\mathcal{T}}}$: первый сопоставляет граничному условию и источнику (f, F) решение φ внутри ячейки \mathcal{T} , а второй сопоставляет (f, F) ограничение решения $\varphi|_{\partial\mathcal{T}_+}$ на неосвещенную границу $\partial\mathcal{T}_+$ ячейки \mathcal{T} .

Оба оператора аналитического решения используются для построения метода СРР. Метод заключается в том, что на каждой грани сетки \mathcal{F} и в каждой ячейке \mathcal{T} точное решение задачи приближается полиномиальной функцией. В ячейках \mathcal{T} многочленом не выше второй степени размерность соответствующего

линейного пространства $\mathcal{P}_2(\mathcal{T})$ равна 10. На гранях \mathcal{F} многочленом не выше третьей степени размерность соответствующего линейного пространства $\mathcal{P}_3(\mathcal{F})$ также равна 10. Изначально считаются известными в каждой ячейке \mathcal{T} приближения источника $F_{\mathcal{T}} \in \mathcal{P}_2(\mathcal{T})$ и в каждой освещенной граничной грани \mathcal{F} расчетной области Ω приближения граничного условия $f_{\mathcal{F}} \in \mathcal{P}_3(\mathcal{F})$. Сеточно-характеристические методы являются маршевыми в том смысле, что разрешение ячеек сетки \mathcal{T} происходит в определенном порядке: сначала разрешаются ячейки, примыкающие к освещенной границе Ω , затем при помощи разрешающего оператора $\mathbb{T}_{\sigma_{\mathcal{T}}}$ решение передается на освещенные грани других ячеек и т.д. Чтобы в процессе разрешения ячеек получать на очередных элементах (гранях, ячейках) приближенное решение в виде многочлена, нужно вводить помимо $\mathbb{S}_{\sigma_{\mathcal{T}}}, \mathbb{T}_{\sigma_{\mathcal{T}}}$ те или иные интерполяционные (замыкающие) операторы. В методе в качестве замыкающих операторов используются ортопроекторы $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_2(\mathcal{T})}, \mathbb{P}_{\mathcal{P}_3(\mathcal{F})}$. Оператор $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_2(\mathcal{T})}$ сопоставляет функции ψ , заданной в ячейке \mathcal{T} , многочлен $p \in \mathcal{P}_2(\mathcal{T})$, для которого разность $\psi - p$ ортогональна всем элементам $\mathcal{P}_2(\mathcal{T})$ в смысле скалярного произведения $L_2(\mathcal{T})$, а именно: $\int_{\mathcal{T}} (\psi - p)q dx = 0$ для всех $q \in \mathcal{P}_2(\mathcal{T})$. Аналогично $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_3(\mathcal{F})}$ сопоставляет функции ψ , заданной на грани \mathcal{F} , многочлен $p \in \mathcal{P}_3(\mathcal{F})$ с $\psi - p \perp \mathcal{P}_3(\mathcal{F})$ в смысле $L_2(\mathcal{F})$. Ортопроекторы $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_2(\mathcal{T})}, \mathbb{P}_{\mathcal{P}_3(\mathcal{F})}$ выдают ближайший многочлен из $\mathcal{P}_2(\mathcal{T}), \mathcal{P}_3(\mathcal{F})$ в смысле норм соответствующих пространств $L_2(\mathcal{T}), L_2(\mathcal{F})$.

Опишем работу метода СРР при разрешении очередной ячейки \mathcal{T} с известным на освещенной границе приближенным решением $\varphi_{\partial\mathcal{T}_-}$, являющимся многочленом из $\mathcal{P}_3(\mathcal{F})$ для каждой грани $\mathcal{F} \subset \partial\mathcal{T}_-$. Приближенное решение $\varphi_{\mathcal{T}}$ внутри ячейки находится по правилу

$$\varphi_{\mathcal{T}} = \mathbb{P}_{\mathcal{P}_2(\mathcal{T})} \mathbb{S}_{\sigma_{\mathcal{T}}}(\varphi_{\partial\mathcal{T}_-}, F_{\mathcal{T}}). \quad (3)$$

То есть сначала к известным для \mathcal{T} приближенным данным применяется оператор аналитического решения (2), а затем полученная функция в \mathcal{T} приближается многочленом второй степени при помощи ортопроектора $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_2(\mathcal{T})}$. Приближенное решение на неосвещенных гранях $\mathcal{F} \subset \partial\mathcal{T}_+$ находится по правилу

$$\varphi_{\mathcal{F}} = \mathbb{P}_{\mathcal{P}_3(\mathcal{F})} \mathbb{T}_{\sigma_{\mathcal{T}}}(\varphi_{\partial\mathcal{T}_-}, F_{\mathcal{T}}). \quad (4)$$

То есть сначала аналитическое решение записывается при помощи (2) во всех неосвещенных гранях, а затем в каждой из них приближается многочленом при помощи ортопроектора $\mathbb{P}_{\mathcal{P}_3(\mathcal{F})}$. Заметим, что никакого согласования между получаемыми приближениями $\varphi_{\mathcal{F}}$ на общих ребрах неосвещенных граней не предполагается. Именно приближения (4) затем передаются в последующие ячейки для их разрешения. Приближения (3) в текущем обходе не используются. Они нужны для последующей реализации итерационного процесса по интегралу рассеяния, то есть для получения источников $F_{\mathcal{T}}$ на следующей итерации.

Возникает три типа освещенности ячеек (рис. 1) в зависимости от количества освещенных граней. В каждом из трех случаев реализация (3), (4) при

разрешении ячейки идет по-своему. Опишем алгоритм упорядочения ячеек сетки для их последующего разрешения.

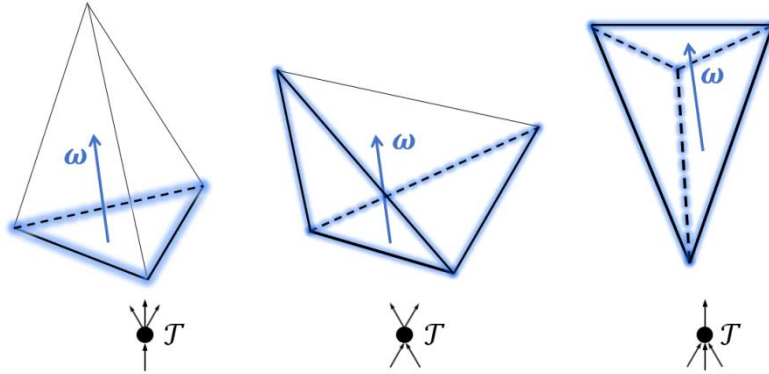


Рис. 1. Три типа освещенности ячеек. Первый тип – одна освещенная грань, второй тип – две освещенные грани, третий тип – три освещенные грани

Пусть ячейки сетки $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2 \in \mathfrak{T}$ граничат друг с другом по грани $\mathcal{F} \in \mathfrak{F}$. Допустим, что \mathcal{F} является освещенной в тетраэдре \mathcal{T}_2 и неосвещенной в тетраэдре \mathcal{T}_1 . Это означает, что разрешение ячейки \mathcal{T}_2 в ходе метода СРР должно предшествовать разрешению ячейки \mathcal{T}_1 . Рассмотрим ориентированный граф, вершинами которого являются все ячейки сетки \mathcal{T} . Скажем, что вершины графа $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2$ связаны ребром $\mathcal{T}_1 \rightarrow \mathcal{T}_2$, если, во-первых, $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2$ имеют общую грань, и во-вторых, эта грань освещена в \mathcal{T}_2 и не освещена в \mathcal{T}_1 . На рис. 1 снизу изображены конфигурации ребер, окружающих вершины различных типов сеточного графа. Алгоритм расположения вершин такого графа в порядке, соответствующем ориентации ребер, известен под названием топологической сортировки. Возможность топологической сортировки ориентированного графа эквивалентна отсутствию ориентированных циклов, что мы всегда предполагаем.

Опишем алгоритм топологической сортировки. Сначала каждой вершине графа \mathcal{T} присваивается целое неотрицательное число $\deg \mathcal{T}$ – входная степень \mathcal{T} (количество освещенных граней $\mathcal{F} \subset \partial \mathcal{T}_-$ с неизвестным сеточным решением $\varphi_{\mathcal{F}}$). Ввиду отсутствия циклов найдется ячейка сетки с нулевой входной степенью. Создадим очередь Q и добавим в нее все те $\mathcal{T} \in \mathfrak{T}$, у которых $\deg \mathcal{T} = 0$. Это в точности те ячейки сетки, у которых все освещенные грани принадлежат освещенной границе расчетной области Ω . Эти ячейки разрешимы, поскольку на освещенной границе Ω известно граничное условие f . Далее, пока очередь Q не пуста, будем доставать очередную ячейку \mathcal{T} из ее начала, разрешая ее и понижая входную степень $\deg \mathcal{T}'$ на тех ячейках $\mathcal{T}' \in \mathfrak{T}$, для которых имеется ребро $\mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}'$. Если после этой процедуры окажется $\deg \mathcal{T}' = 0$, то ячейка \mathcal{T}' становится разрешимой (на всех освещенных гранях известны сеточные данные) и добавляется в конец очереди Q . В момент, когда очередь окажется пустой, будут

разрешены все ячейки, так как в противном случае среди оставшихся неразрешенных ячеек не было бы нулевых входящих степеней, что противоречило бы ацикличности.

Алгоритм разрешения ячеек можно распараллелить послойно, а именно: разобьем расчетную область Ω на слои $\Omega^1, \dots, \Omega^N$ по следующему принципу: в Ω^1 отнесем все ячейки разрешимые на начальной стадии расчета, то есть те, у которых все освещенные грани лежат на освещенной границе Ω (где задано граничное условие f). Тогда к Ω^2 отнесем все разрешимые ячейки, которые возникнут после разрешения слоя Ω^1 , и т.д. Ячейки из одного слоя Ω^k могут быть разрешены независимо друг от друга, так как между ними не происходит обмена данными. Это наблюдение открывает возможность для параллельных реализаций метода СРР в рамках стандарта OpenMP параллельного программирования с общей памятью, что и было реализовано в работе.

Верификация метода СРР на аналитическом тесте

Верификация метода СРР на многочленах четвертой степени была приведена в работе [2]. При обсуждении с коллегами возник вопрос, нет ли существенных членов ошибки при производных решения более высокой степени, чем четвертая. Поэтому в данной работе приводится верификация на аналитическом тесте с ненулевыми производными любого порядка.

В качестве расчетной области Ω рассмотрим куб $[0,1]^3 \subset \mathbb{R}^3$. Для направления ω рассмотрим задачу переноса с постоянным положительным коэффициентом поглощения $\sigma = \text{const} > 0$ и аналитической правой частью:

$$F(x) = \sigma \sin(x_1 + x_2 + x_3).$$

Тогда функция

$$\varphi(x) = \int_0^{+\infty} F(x - s\omega) \exp(-\sigma s) ds$$

является решением задачи переноса в Ω с постоянным коэффициентом поглощения σ при подходящих граничных условиях. Проинтегрировав несколько раз по частям выражение для φ , получим его явный вид

$$\varphi(x) = \frac{\sigma^2 \sin(x_1+x_2+x_3) - \sigma(\omega_1+\omega_2+\omega_3) \cos(x_1+x_2+x_3)}{\sigma^2 + (\omega_1+\omega_2+\omega_3)^2}.$$

Таким образом, точное решение φ является аналитической функцией по угловым и пространственным переменным. Будем рассматривать широкий диапазон изменения коэффициента поглощения: А) $\sigma = 10^{-1}$, Б) $\sigma = 10^0$, В) $\sigma = 10^1$, Г) $\sigma = 10^2$, Д) $\sigma = 10^3$, Е) $\sigma = 10^4$,

чтобы проанализировать качество метода СРР при различных условиях, в том числе в ситуации больших оптических толщин.

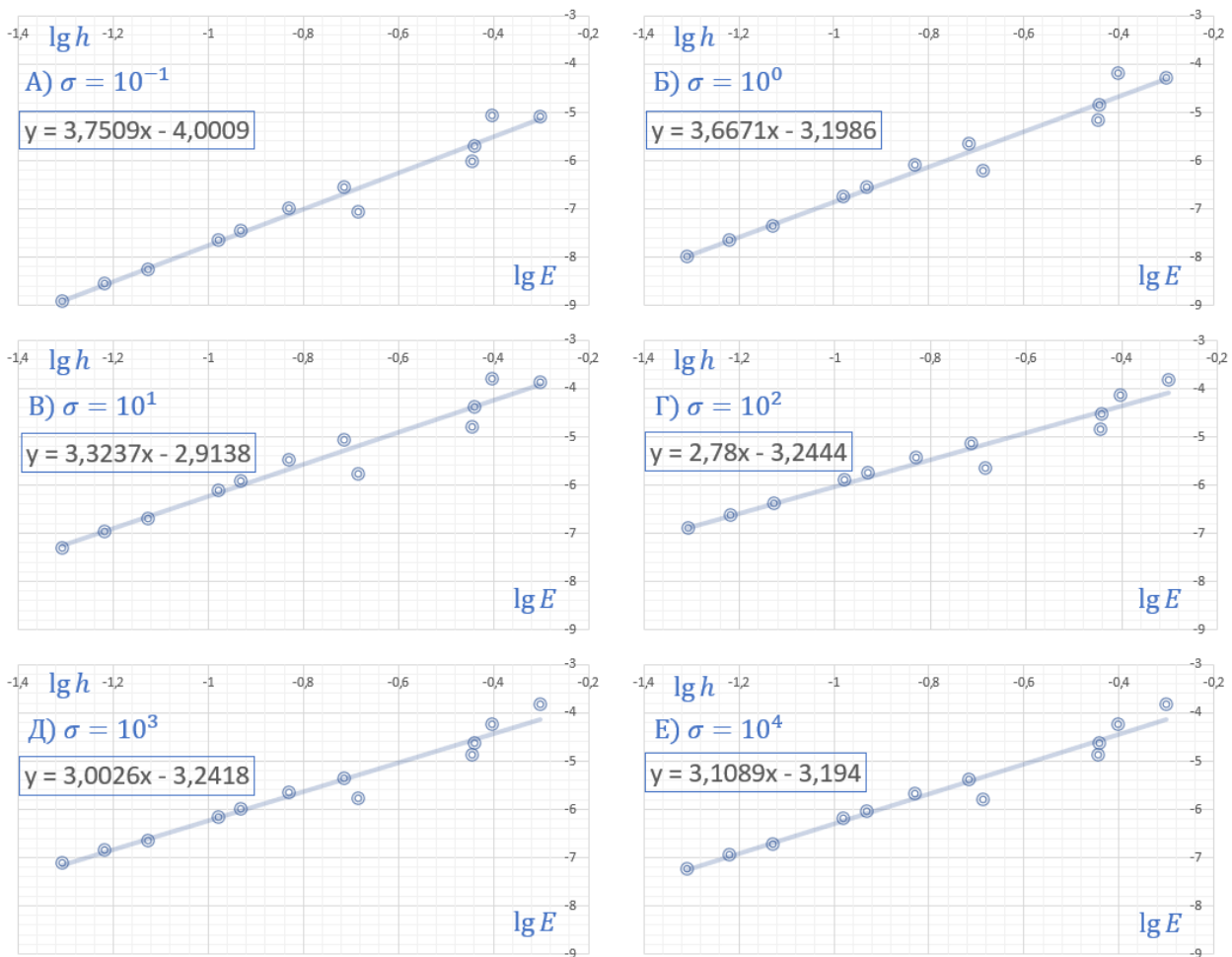


Рис. 2. Зависимость ошибок метода СРР от подробности сетки в логарифмическом масштабе

На рис. 2 приведены практические результаты зависимости ошибки метода E от подробности сетки h в двойном логарифмическом масштабе. Проведены прямые среднеквадратичного приближения, коэффициент наклона которых характеризует практический порядок сходимости метода. Тем самым экспериментально подтверждается доказанный в работе [1] третий порядок точности метода СРР на гладком решении. Причем метод СРР одинаково хорошо пригоден для работы с различными по оптической толщине ячейками, что особенно ценно в контексте лебеговского осреднения спектра, сохраняющего полный диапазон изменения коэффициента поглощения в каждой ячейке.

Задача нейтронной защиты

Следующий раздел посвящается применению метода СРР для расчета задачи нейтронной защиты одиночного металлического объекта. Рассматривается стальная конструкция (рис. 3), которая с фронтальной стороны облучается потоком нейтронов, имеющих спектр, характерный для взрыва ядерной бомбы. Данная конструкция является частью большей. Мы пренебрегаем остальной частью, считая, что она несущественна в вопросах защиты. Основание конструкции 150 см на 150 см параллельно земле. Со стороны земли предполагается отсутствие внешнего нейтронного потока, то есть на основании конструкции задается нулевое граничное условие.

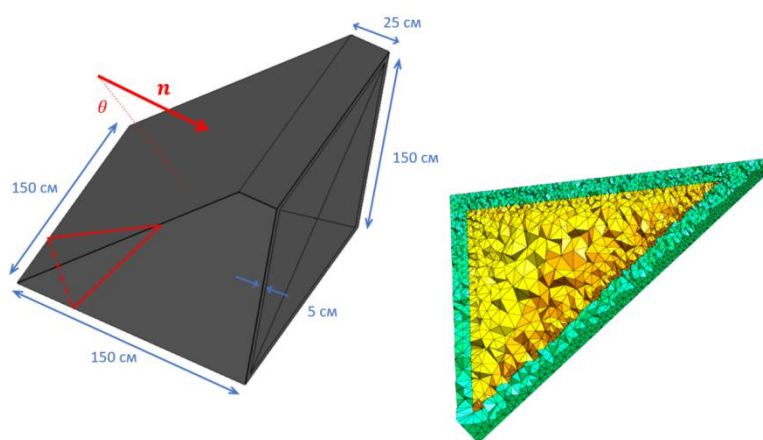


Рис. 3. Модель стального тела, облучаемого нейтронами

Слева на рис. 3 указаны пространственные размеры тела Ω и направление потока нейтронов n . Справа – вид пространственной сетки в разрезе. Зеленым покрашены тетраэдры стального слоя толщины 5 см, а желтым – тетраэдры внутри конструкции. Предполагается, что внутренняя зона расчетной области Ω заполнена вакуумом, что означает отсутствие поглощения и рассеяния. В стальных стенках конструкции наблюдается сгущение пространственной сетки, в них же осуществляются процессы поглощения и рассеяния нейтронов. Всего в пространственной сетке имеется 1'193'682 ячеек. Сетка построена при помощи генератора Gmsh. Состав стали указан в таблице (Табл. 1), данные о групповых сечениях поглощения и рассеяния нейтронов взяты из [7].

Элемент	Fe	Cr	Ni	Mo	C	B
Масс. доля	0.9088	0.04	0.04	0.008	0.003	0.0002
Конц. [10^{22}см^{-3}]	7.6447	0.3613	0.3201	0.0392	0.1173	0.0085

Таблица 1. Состав стали

Энергетическое распределение падающего на фронтальную и боковую части потока нейтронов имеет спектр (Таблица 2) взрыва атомной бомбы мощностью 20 *кт*, окруженной тротиловой оболочкой толщиной 25 *см*. Данные о спектре ядерного взрыва взяты из книги [8], находящейся в открытом доступе. Данные из табл. 2 заполняют первые 12 высокоэнергичных групп из стандартной 26-групповой энергетической дискретизации нейтронного поля. На рис. 4 в графическом виде приводится многогрупповое приближение спектра падающего потока нейтронов. При этом учитываются только первые 12 энергетических групп. Такой подход оправдан по двум причинам.

$E, \text{ МэВ}$	$S_{26}(E)$
10	
9	0,00009
8	0,00037
7	0,001
6	0,0025
5	0,00567
4	0,01268
3	0,0263
2	0,0534
1,5	0,0765
1,0	0,1003
0,5	0,1348
0,1	0,1878
0,05	0,1913
0,01	0,2093
0,005	0,2175

Таблица 2. Спектр нейтронов при взрыве атомной бомбы

Во-первых, при взрыве атомной бомбы спектр нейтронов высоких энергий (выше 4.65 *кэВ*) устанавливается практически мгновенно (за 10^{-7} *с* с момента взрыва) и удерживается на протяжении существования оболочки бомбы (примерно 10^{-5} *с*). Поэтому на интервале времени 10^{-7} – 10^{-5} *с* в энергетическом диапазоне 0.00465–10.5 *мэВ* допустимо рассматривать процессы переноса нейтронов в веществе стационарными, в то время как для получения спектра распределения нейтронов меньших энергий необходимо решать нестационарную задачу. Во-вторых, поскольку рассеяние нейтронов происходит из групп с большими энергиями в группы с меньшими энергиями (а не наоборот), то допустимо исключить из рассмотрения все последующие энергетические группы, начиная с некоторой (13-й в нашем случае). При этом исключенные группы не окажут никакого влияния на изучаемые первые 12 групп.

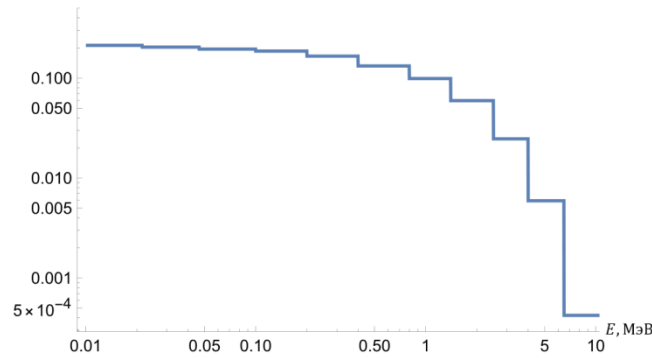


Рис. 4. Спектр нейтронов снаружи объекта

По угловым переменным распределение нейтронов снаружи конструкции имеет резкий пик в направлении \mathbf{n} (рис. 3) и зависит только от угла θ между \mathbf{n} и рассматриваемым направлением. В качестве функции плотности берется

$$p(\theta) = \begin{cases} \frac{12(e^{24 \cos \theta} - 1)}{\pi(e^{24} - 25)}, & 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \\ 0, & \frac{\pi}{2} < \theta \leq \pi. \end{cases} \quad (5)$$

Интеграл от функции p по единичной сфере угловых направлений равен 1. На рис. 5 приведен график функции p на интервале от 0 до $\frac{\pi}{2}$.

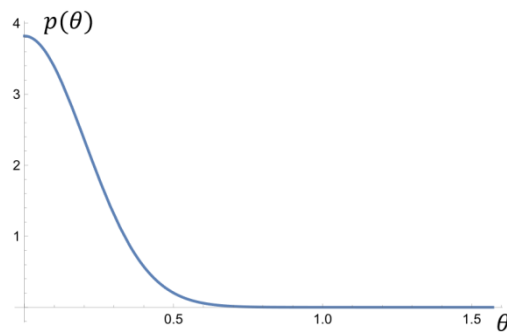


Рис. 5. Зависимость плотности углового распределения нейтронов от полярного угла

Дискретизация по угловой переменной осуществляется по узлам сферической кубатурной формулы типа прямого произведения по азимутальному и полярному углам. Причем узлы такой кубатуры должны сгущаться вблизи направления \mathbf{n} , чтобы правильно учесть резкий характер изменения функции $p(\theta)$ при малых углах θ . Кубатурная формула прямого произведения со 100 узлами (Рис. 6) обеспечивает нужное сгущение угловой

сетки вблизи направления \mathbf{n} и высокий алгебраический порядок точности кубатурной формулы.

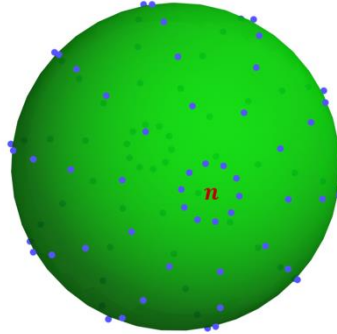


Рис. 6. Узлы сферической кубатурной формулы произведения

Полярные углы (от \mathbf{n}) этой кубатуры порождаются нулями многочлена Чебышева $T_{10}(x) = \cos(10 \arccos x)$ степени 10. Вспомним, что для нулей $-1 < x_1 < \dots < x_{10} < 1$ многочлена Чебышева выполнено

$$\pi > \theta_1 = \arccos x_1 > \dots > \theta_{10} = \arccos x_{10} > 0;$$

$$\theta_{10} = \frac{\pi}{20}, \quad \theta_9 = \frac{\pi}{20} + \frac{\pi}{10}, \quad \theta_8 = \frac{\pi}{20} + 2\frac{\pi}{10}, \quad \dots, \quad \theta_1 = \frac{\pi}{20} + 9\frac{\pi}{10}.$$

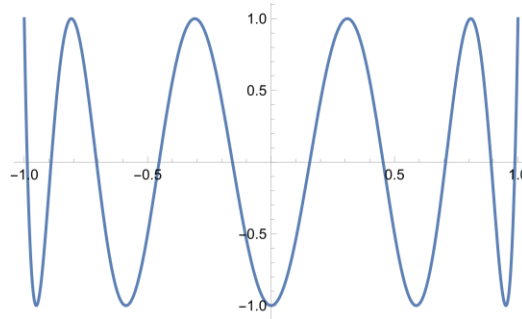


Рис. 7. График многочлена Чебышева 10 степени

Веса w_1, \dots, w_{10} квадратурной формулы на отрезке $[-1, 1]$ с узлами x_1, \dots, x_{10} находятся из системы линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_{10} \\ \vdots & & \vdots \\ x_1^9 & \dots & x_{10}^9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{-1}^1 dx \\ \int_{-1}^1 x dx \\ \vdots \\ \int_{-1}^1 x^9 dx \end{pmatrix},$$

с матрицей Вандермонда положительны и приблизительно равны

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_{10} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.042939 \\ 0.145874 \\ 0.220317 \\ 0.280879 \\ 0.309989 \\ 0.309989 \\ 0.280879 \\ 0.220317 \\ 0.145874 \\ 0.042939 \end{pmatrix}.$$

Кубатурная формула для сферы строится по ста узлам, имеющим сферические координаты $\omega_{k,m} = \left(\psi_k = \frac{2\pi}{10}k, \theta_m\right)$, $k, m = 1, \dots, 10$ с полярной осью \mathbf{n} . Узлу $\omega_{k,m}$ соответствует вес $W_{k,m} = 2\pi w_m/10$. Тем самым у данной кубатуры (рис. 6) соседние вращательные (с осью \mathbf{n}) орбиты узлов расположены на одинаковом сферическом расстоянии $\pi/10$. Такая кубатурная формула имеет алгебраический порядок точности 9. То есть для всех многочленов $f = f(x, y, z)$ степени не выше 9 верно

$$\sum_{k,m} W_{k,m} f(\omega_{k,m}) = \int_{|\omega|=1} f(\omega) dS, \quad (6)$$

в то время как для многочленов десятой степени равенство перестает быть верным. Если посчитать по этой кубатурной формуле интеграл от функции (5), получим 1.027540557038, что отличается от точного значения менее чем на три процента. Можно заметить, что для достижения точно такой же алгебраической точности 9 можно было бы взять нули многочлена Лежандра $P_5(x) = \frac{1}{8}(15x - 70x^3 + 63x^5)$, получив кубатуру с 50 узлами вместо 100.

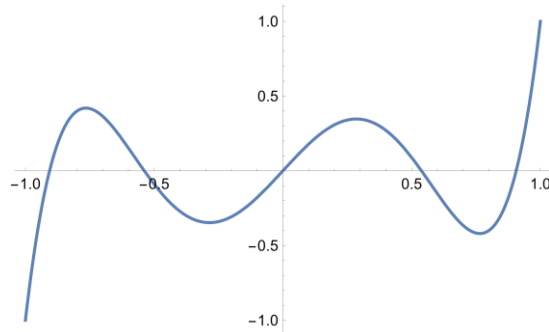


Рис. 8. График многочлена Лежандра пятой степени

Однако такая кубатура не имеет нужного сгущения узлов вблизи полюсов. Если посчитать по ней интеграл от (5), получим 0.598495287032, что уже дает ошибку более чем в сорок процентов.

Теперь поставим задачу переноса в пространственной области Ω . Требуется найти скалярный поток нейтронов $\varphi = \varphi(x, \omega, E)$, $x \in \Omega$, $|\omega| = 1$, $E > 0$, удовлетворяющий интегро-дифференциальному уравнению переноса

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{grad} \varphi(x, \omega, E), \omega \rangle + \sigma_t(x, E)\varphi(x, \omega, E) = \\ & = \int_E^{+\infty} \frac{\sigma_s(x, E' \rightarrow E)}{4\pi} \int_{|\omega'|=1} \varphi(x, \omega', E') d\omega' dE'. \end{aligned} \quad (7)$$

Интегрирование в (7) по энергетической переменной $\int_E^{+\infty} \sigma_s(x, E' \rightarrow E) dE'$ в интервале $(E, +\infty)$ говорит о том, что рассеяние нейтронов происходит без повышения энергии. Уравнение (7) дополняется граничным условием падающего потока нейтронов на освещенной границе. Из соотношения $\sigma_t(x, E) \gg \int_0^E \sigma_s(x, E \rightarrow E') dE'$ между полным коэффициентом σ_t и коэффициентом рассеяния σ_s следует, что данную задачу можно эффективно решать методом итераций источника [9]:

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{grad} \varphi^{(q+1)}(x, \omega, E), \omega \rangle + \sigma_t(x, E)\varphi^{(q+1)}(x, \omega, E) = \\ & = \int_E^{+\infty} \frac{\sigma_s(x, E' \rightarrow E)}{4\pi} \int_{|\omega'|=1} \varphi^{(q)}(x, \omega', E') d\omega' dE'. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь q – номер итерации, полагается $\varphi^{(0)} \equiv 0$. Интеграл по сфере из правой части (8) приближенно рассчитывается по кубатурной формуле (6). В многогрупповом приближении для (8) имеем

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{grad} \varphi_p^{(q+1)}(x, \omega), \omega \rangle + \sigma_{t;p}(x)\varphi_p^{(q+1)}(x, \omega) = \\ & = \sum_{p'=1}^p \frac{\sigma_{s;p' \rightarrow p}(x)}{4\pi} \sum_{k,m} W_{k,m} \varphi_{p'}^{(q)}(x, \omega_{k,m}). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь p – номер энергетической группы, нумерация идет с убыванием энергии. Данные о групповых сечениях поглощения $\sigma_{t;p}$ и рассеяния $\sigma_{s;p' \rightarrow p}$ для сплава стали (Табл. 1), а также границы групп взяты из [7]. Во внутренней части конструкции $\sigma_{t;p}$ и $\sigma_{s;p' \rightarrow p}$ равны нулю (вакуум). В многогрупповом приближении полагается, что $\varphi_p(x, \omega)$ приближает $\int_{\mathcal{E}_p} \varphi(x, \omega, E) dE$. В силу устройства оператора рассеяния можно ускорить сходимость итерационного процесса, введя вместо (9)

$$\langle \mathbf{grad} \varphi_p^{(q+1)}(x, \omega), \omega \rangle + \sigma_{t;p}(x)\varphi_p^{(q+1)}(x, \omega) = \quad (10)$$

$$= \frac{\sigma_{s; p \rightarrow p}(x)}{4\pi} \sum_{k,m} W_{k,m} \varphi_p^{(q)}(x, \omega_{k,m}) + \\ + \sum_{p'=1}^{p-1} \frac{\sigma_{s; p' \rightarrow p}(x)}{4\pi} \sum_{k,m} W_{k,m} \varphi_{p'}^{(q+1)}(x, \omega_{k,m}).$$

По (10) сначала рассчитывается первая группа $p = 1$, затем из текущей итерации происходит рассеяние вклада первой группы в последующие $p = 2, \dots, 12$. Далее рассчитывается вторая группа и т.д.

Задача (10) на каждой итерации решается для первых двенадцати групп $p \in \{1, \dots, 12\}$, для каждого угла из набора $\{\omega_{k,m} : k, m = 1, \dots, 10\}$ кубатурных узлов (в рамках S_N метода дискретных ординат), на пространственной сетке из 1'193'682 тетраэдров методом СРР. Для использования на следующей итерации внутри ячеек пространственной сетки сохраняется величина

$$U_p^{(q)}(x) = \sum_{k,m} W_{k,m} \varphi_p^{(q)}(x, \omega_{k,m}).$$

А именно: в текстовый файл записывается $12 \times 10 \times 1'193'682$ чисел типа double, где 12 – количество групп, 10 – размерность пространства $\mathcal{P}_2(\mathcal{T})$ полиномов в ячейке и 1'193'682 – количество ячеек \mathcal{T} . Размер такого файла составляет примерно 2.2 ГБ. Примерное время расчета одной итерации при распараллеливании на 12 логических процессорах – 1.8 ч. Для построения критерия останова итераций рассмотрим погрешность

$$Er^{(q)} = \sum_{p=1}^{12} \left\| U_p^{(q)} - U_p^{(q-1)} \right\|_{L_2(\Omega)}.$$

Дабы избежать ложной сходимости, в качестве критерия останова используется относительная ошибка

$$\varepsilon^{(q)} = \frac{Er^{(q)}}{\left(1 - \frac{Er^{(q-1)}}{Er^{(q-2)}}\right) \sum_{p=1}^{12} \left\| U_p^{(q)} \right\|_{L_2(\Omega)}}.$$

Когда $\varepsilon^{(q)} < 0.03$, итерации останавливаются и правая часть уравнения переноса готова к использованию для моделирования нужных физических величин. Величина желаемой ошибки в 3% соответствует относительной погрешности приближенного интегрирования функции p (рис. 5) по кубатурной формуле (6). Для достижения точности $\varepsilon^{(q)} < 0.03$ потребовалось $q_0 = 30$ итераций.

Для визуализации результатов расчета сравним ток нейтронного поля снаружи конструкции (рис. 4) с током нейтронов $U_p(x)$, осредненным по небольшой окрестности центра расчетной области.

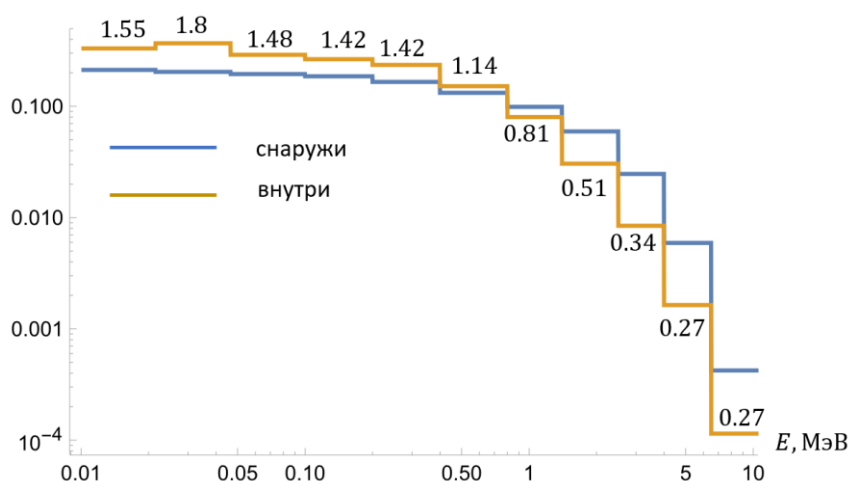
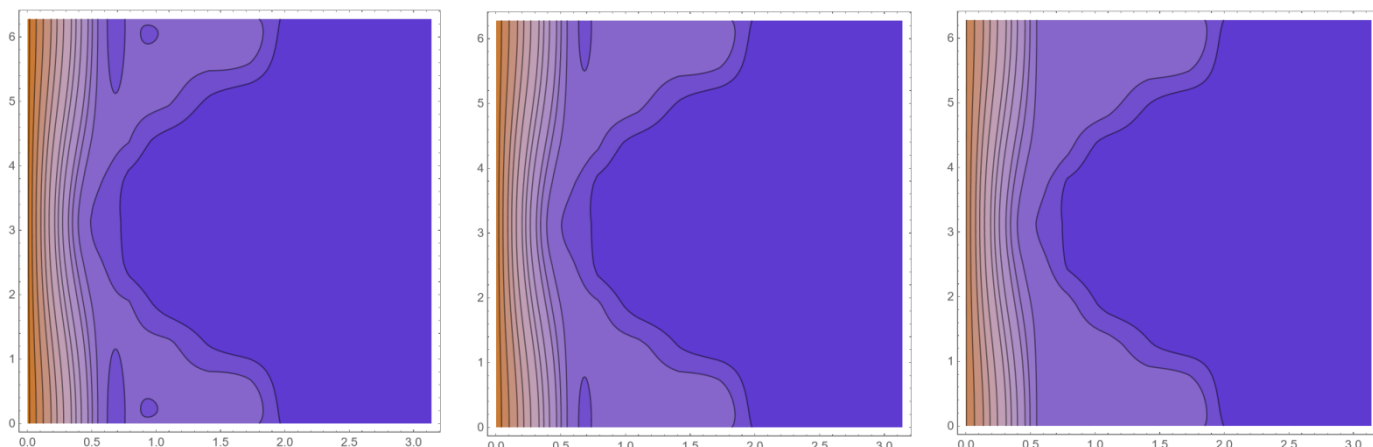


Рис. 9. Сравнение энергетического спектра нейтронного тока внутри и снаружи конструкции

На рис. 9 синим цветом указан спектр нейтронного тока $U_p(x)$ снаружи объекта, а желтым – внутри, приведены групповые коэффициенты ослабления. Площадь под графиком имеет смысл полного нейтронного тока (от данных энергетических групп). Видно, что на высоких энергиях (больше 1 МэВ) происходит ослабление нейтронного тока, а при меньших энергиях – его нарастание. Это происходит из-за рассеяния нейтронов в обшивке конструкции.

Также представляет интерес угловое распределение нейтронного поля внутри конструкции. Снаружи оно задавалось функцией p , зависящей только от полярного угла θ . На рис. 10 для каждой энергетической группы приведена цветовая диаграмма значений в сферических координатах (θ, ψ) функции распределения $\varphi(x, \omega, E)$ во внутренней части конструкции, осредненной по группе \mathcal{E}_p и нормированной на среднее значение по сфере $S = \{|\omega| = 1\}$. То есть среднее значение на сфере S от приводимого углового распределения равно 1. Здесь азимутальный угол ψ отмеряется от направленного строго вниз ортогонального \mathbf{n} вектора (рис. 3).



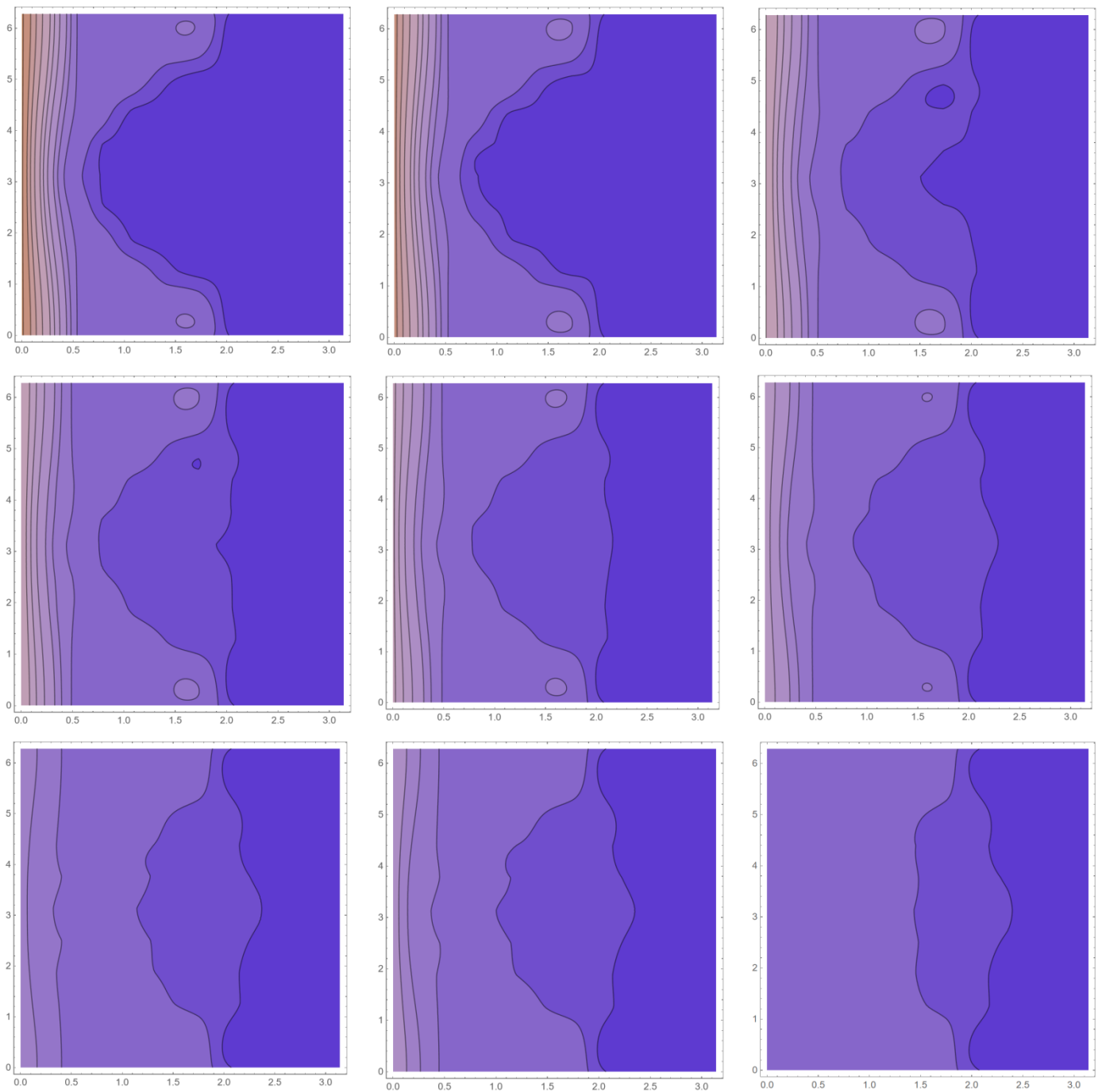
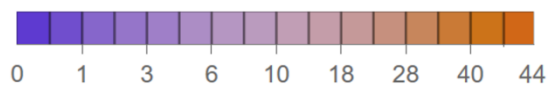


Рис. 10. Угловое распределение нейтронного поля внутри конструкции для первых двенадцати энергетических групп (по вертикальной оси – азимутальный угол ψ , по горизонтальной оси – полярный угол θ). Легенда:



С падением энергии нейтронов угловое распределение становится более изотропным. Напомним, что интеграл по сфере от функции на любой из двенадцати картинок один и тот же и равен 4π . Для углов $\theta > \pi/2$ практически отсутствует нейтронное поле, что связано с постановкой граничного условия для

геометрически урезанной постановки задачи. Падение нейтронного тока (выемки) по центру картинок связано с нулевым граничным условием для нейтронов, летящих со стороны земли. Для наглядности на рис. 11 приведен график углового распределения нейтронов снаружи конструкции, один и тот же для всех групп энергий.

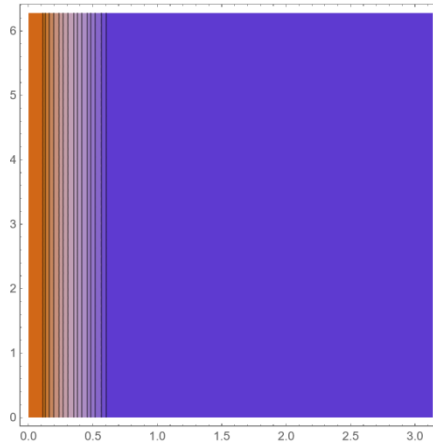


Рис. 11. Угловое распределение нейтронного поля снаружи конструкции

В качестве выводов к проведенному исследованию отметим следующее. Стальная конструкция обеспечивает защиту только от сверхжесткого излучения. Для защиты от высокоэнергетичных нейтронов энергии ниже 1 МэВ необходимо использовать дополнительные материалы. Попытки автора рассмотреть легирующие добавки типа бора непосредственно в сталь не привели к существенному падению нейтронного потока внутри конструкции при изменении массовой доли бора непосредственно в стали от 0.0002 до 0.04. Хорошие поглощающие свойства бора известны, но этих количеств недостаточно для улучшения защитных свойств стали.

Заключение

В данной работе новый метод решения уравнения переноса на неструктурированной сетке из тетраэдров третьего порядка аппроксимации применяется к расчету задачи защиты. Метод относится к классу сеточно-характеристических. В качестве замыкающего оператора используется ортогональный проектор, что позволило сделать точные оценки скорости сходимости метода [1].

Была проведена верификация метода на задачах с известным аналитическим точным решением. Была показана сходимость третьего порядка. Также был проведен расчет задачи защиты металлической конструкции во внешнем потоке нейтронов с малой угловой апертурой. Задача характеризуется сильной гетерогенностью расчетных ячеек как по размеру, так и по коэффициенту

поглощения. Получены графики для углового распределения потока нейтронов в энергетических группах. Вычислены групповые коэффициенты ослабления нейтронного поля внутри конструкции для высокоэнергетичных нейтронов.

Библиографический список

1. Г.О. Астафуров, Построение и исследование метода СРР (CubicPolynomialProjection) решения уравнения переноса // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 2022, 066, 56 с.
2. Е.Н. Аристова, Г.О. Астафуров, Проекционно-характеристический метод третьего порядка для решения уравнения переноса на неструктурированных сетках // *Матем. моделирование*, **35**:11 (2023), с. 79–93.
3. Е.Н. Аристова, Г.О. Астафуров, Метод коротких характеристик второго порядка для решения уравнения переноса на сетке из тетраэдров // *Матем. моделирование*, **28**:7 (2016), 20–30; *Math. Models Comput. Simul.*, **9**:1 (2017), с. 40–47.
4. Е.Н. Аристова, Г.О. Астафуров, Характеристическая схема для решения уравнения переноса на неструктурированной сетке с барицентрической интерполяцией // *Матем. моделирование*, **30**:9 (2018), 33–50; *Math. Models Comput. Simul.*, **11**:3 (2019), с. 349–359.
5. Г.О. Астафуров, Алгоритм обхода ячеек в характеристических методах решения уравнения переноса // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 2018, 193, 24 с.
6. О.В. Николаева, Нодальная сеточная схема для уравнения переноса излучения на неструктурированной тетраэдральной сетке // *Матем. моделирование*, **27**:5 (2015), 80–96; *Math. Models Comput. Simul.*, **7**:6 (2015), с. 581–592.
7. М.Н. Николаев, А.М. Цибуля, А.Г. Цикунов и др. Комплекс программ CONSYST/ABBN – подготовка констант БНАБ к расчетам реакторов и защиты. Отчет ГНЦ РФ ФЭИ №9865, 1998.
8. П.А. Ямпольский. Нейтроны атомного взрыва. – Москва: Госатомиздат, 1961, 132с.
9. M. Adams, E. Larsen. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. – *Progress in Nuclear Energy*, 40(1), 2002, 159 p.