На правах рукописи

УДК 621.039.51.12

Волощенко Андрей Михайлович

АДАПТИВНЫЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ И СОГЛАСОВАННАЯ KP1 СХЕМА УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ЗАДАЧАХ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2015 год

Работа выполнена в Институте прикладной математики имени М.В. Келдыша Российской академии наук

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, начальник отделения НИЦ «Курчатовский институт»
Ковалишин Алексей Анатольевич
доктор технических наук,
главный научный сотрудник ОАО «НИКИЭТ»
Никитин Анатолий Васильевич
доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник ВНИИТФ
Гаджиев Ахмед Далгатович

Ведущая организация: ФГУП ГНЦ РФ «Физико-энергетический институт»

Защита состоится "8" октября 2015 г. в 11 часов
на заседании диссертационного совета Д 002.024.03 при Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва,
Миусская пл., 4.
С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке института и на сайте: http://keldysh.ru/council/3/D00202403/defence.htm

Автореферат разослан "___" __________ 2015 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук Корнилина М. А.

Общая характеристика работы

Актуальность работы

В связи ускоренным развитием ядерной энергетики возрастают требования к ее безопасности, и, следовательно, к точности, надежности и оперативности предсказания поведения ядерных энергетических объектов в различных ситуациях.

Методы решения уравнения переноса излучения можно разделить на следующие группы:

- Метод Монте-Карло.
- Прямые детерминистические методы: метод характеристик, S_n метод, метод поверхностных гармоник и др.
- Инженерные методы: как правило, в той или иной форме использующие диффузионный или нодальный диффузионный метод.

Данная диссертация делает крупный шаг в развитии S_n метода.
Основные цели диссертационной работы кратко формулируются в следующем виде.

Повышение точности и надежности предсказания характеристик ядерных реакторов путем разработки эффективных разностных схем 2-4-ого порядка точности, согласованных схем ускорения внутренних и внешних итераций, эффективных методов аппроксимации геометрии и источника на сетке задачи.

Для достижения поставленной цели автор решил следующие задачи:

1. Разработал положительную адаптивную схему 2-ого порядка точности: AWDD схему (Adaptive Weighted Diamond Differencing) для 1D криволинейных, 2D и 3D геометрий, основанную на использовании семейства взвешенных WDD (Weighted Diamond Differencing) схем; положительную адаптивную схему 2-4-ого порядка точности, основанную на использовании семейства взвешенных WLD-WLB/QC (Weighted Linear Discontinuous - Weighted Linear Best/Quadratic Continuous) схем.
2. Разработал согласованную с WDD и WLD-WLB/QC схемами KP_1 схему ускорения внутренних и внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.
3. Разработал алгоритм расчета электронно-фотонного и адронного каскадов в различных приближениях.
4. Разработал оригинальную методику распараллеливания вычислений, основанную на использовании OpenMP интерфейса и KBA (K. Koch, R. Baker, R. Alcouff) алгоритма.
5. Разработал методику аппроксимации геометрии и источника задачи, основанную на использовании интерфейса между программой, реализующей метод Монте-Карло, и S_n кодами, а также volume fraction

(VF) метода, поддерживающего локальный баланс масс/источников излучения в системе.

6. Реализовал (совместно с соавторами) разработанные алгоритмы в комплексе из 1D, 2D и 3D S_n кодов РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН для решения уравнения переноса нейтрального и заряженного излучения в задачах радиационной защиты.

Научная новизна результатов, представленных в диссертации, состоит в следующем.

- Разработаны положительные AWDD схема для 1D криволинейных, 2D и 3D геометрий и адаптивная схема 3-4-ого порядка точности, основанная на использовании семейства взвешенных WLD-WLB/QC схем.
- Разработана согласованная с WDD и WLD-WLB/QC схемами KP_1 схема ускорения внутренних и внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.
- Разработан алгоритм расчета электронно-фотонного и адронного каскадов в различных приближениях.
- Разработана оригинальная методика распараллеливания вычислений, основанная на использовании OpenMP интерфейса и KBA алгоритма.
- Разработана методика аппроксимации геометрии и источника задачи, основанная на использовании интерфейса между программой, реализующей метод Монте-Карло, и S_n кодами, а также VF метода, поддерживающего локальный баланс масс/источников излучения в системе.
- Реализованы (совместно с соавторами) разработанные алгоритмы в комплексе из 1D, 2D и 3D S_n кодов РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН для решения уравнения переноса нейтрального и заряженного излучения в задачах радиационной защиты.

Достоверность полученных результатов, а именно, разностных схем, алгоритмов ускорения итерационного процесса подтверждена большим количеством сопоставлений с опубликованными экспериментальными данными, а также расчетными данными других авторов. Разработанный 3D S_n код КАТРИН аттестован Ростехнадзором для расчета реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000.

Практическая ценность полученных результатов состоит в том, что разработанные S_n коды снабжены пре- и пост- процессорами и достаточно полной документацией, позволяющих их использование без участия авторов. Они внедрены в ряде основных научных центров и опытно-конструкторских бюро Росатома: НИЦ «Курчатовский институт», ГНЦ РФ «ФЭИ», ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС», ГНЦ РФ «ИФВЭ», ОАО ОКБ «НИКИЭТ», а также переданы в отечественные и зарубежные библиотеки программ: ОФАП ЯР (Акт №734, от

20.12.2011 г.), RSICC (RSICC code package CCC-726) и NEA Data Bank. 3D S_n код КАТРИН аттестован Ростехнадзором для расчета реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000 (Аттестационные паспорта №356 и № 357).

Личный вклад автора. Все основные результаты, за исключением методика аппроксимации геометрии и источника задачи, основанной на использовании интерфейса между программой, реализующей метод Монте-Карло, и S_n кодами, получены лично автором.
Автору диссертации принадлежат:

- Разработка положительной AWDD схемы для 1D криволинейных, 2D и 3D геометрий и положительной адаптивной WLD-WLB/QC схемы 3-4-ого порядка точности.
- Разработка согласованных с WDD и WLD-WLB/QC схемами KP_1 схемы ускорения внутренних и внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.
- Разработка алгоритма расчета электронно-фотонного и адронного каскадов в различных приближениях.
- Разработка оригинальной методики распараллеливания вычислений, основанной на использовании OpenMP интерфейса и KBA алгоритма.
- Разработка (совместно с соавторами) методики аппроксимации геометрии и источника задачи, основанная на использовании интерфейса между программой, реализующей метод Монте-Карло, и S_n кодами, а также VF метода, поддерживающего локальный баланс масс/источников излучения в системе.
- Реализация (совместно с соавторами) разработанных алгоритмов в комплексе из 1D, 2D и 3D S_n кодов РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН для решения уравнения переноса нейтрального и заряженного излучения в задачах радиационной защиты.

Апробация работы. Основные положения диссертации докладывались на следующих конференциях и семинарах:

- Семинары по нейтронно-физическим проблемам атомной энергетики «НЕЙТРОНИКА» (г. Обнинск, 1998-2014 гг.).
- Конференции по Радиационной защите (г. Обнинск, 2002, 2006).
- Конференции Росэнергоатома (г. Москва, 2004, 2006).
- Конференция ОКБ «ГИДРОПРЕСС» (г. Подольск, 2009).
- Международные конференции по математическим методам и расчетам ядерных реакторов M&C (1991, Pittsburgh, USA; 1995, Portland, USA; 1997, Saratoga Springs, USA; 1999, Madrid, Spain; Avignon, France, 2005; Saratoga Springs, USA, 2009; Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- Международные конференции по физике реакторов PHYSOR (Marseille, France, 1990; Seoul, Korea, 2002; Vancouver, Canada, 2006.

- Международная конференция по радиационной защите ICRS (Arlington, USA, 1994).
- Международный симпозиум IRDS (Brussels, Belgium, 2002; Avignon, France, 2014.

Публикации. По теме работы опубликовано более 120 научных работ в виде научных статей в отечественных и зарубежных журналах, в сборниках докладов российских и международных конференций, препринтов и научно-технических отчетов ИПМ РАН, в том числе 17 [1-17] в журналах из списка ВАК и ведущих зарубежных рецензируемых научных журналах.

Автор выносит на защиту:

- Разработку положительной AWDD схемы для 1D криволинейных, 2D и 3D геометрий; положительной адаптивной WLD-WLB/QC схемы 3-4-ого порядка точности.
- Разработку согласованной с WDD и WLD-WLB/QC схемами KP_1 схемы ускорения внутренних и внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.
- Разработку алгоритма расчета электронно-фотонного и адронного каскадов в различных приближениях.
- Разработку оригинальной методики распараллеливания вычислений, основанной на использовании OpenMP интерфейса и KBA алгоритма.
- Разработку (совместно с соавторами) методики аппроксимации геометрии и источника задачи, основанной на использовании интерфейса между программой, реализующей метод Монте-Карло, и S_n кодами, а также VF метода, поддерживающего локальный баланс масс/источников излучения в системе.
- Реализацию (совместно с соавторами) разработанных алгоритмов в комплексе из 1D, 2D и 3D S_n кодов РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН для решения уравнения переноса нейтрального и заряженного излучения в задачах радиационной защиты.

Основное содержание работы

Во **Введении** рассмотрены вопросы актуальности и практической ценности данной работы, сформулированы основные цели и результаты, научная новизна личный вклад автора, результаты, выносимые на защиту.

Представленные в диссертации материалы сгруппированы в восемь глав, каждой из которых предшествует краткий обзор литературы по теме главы.

В **главе 1** рассмотрены построение и свойства AWDD схемы, которая в значительной степени удовлетворяет требованиям, предъявляемым к разностным схемам для решения уравнения переноса: консервативности, 2-ого порядка аппроксимации, возможности использования в многомерной криволинейной геометрии, арифметической простоты алгоритма, положительности, приемлемого уровня монотонности, хорошего сочетания с алгоритмами ускорения итераций по интегралу рассеяния. Рассмотрено также семейство взвешенных нодальных WLB/QC-WLD схем 2-4-ого порядка точности, как средства для построения адаптивной положительной нодальной схемы высокого порядка точности, обладающей требуемыми свойствами.

Используя стандартные обозначения, краевую задачу для уравнения переноса нейтрального излучения (нейтроны и фотоны) в 3D r,ϑ,z геометрии можно записать в виде:

$$(\vec{\Omega}\vec{\nabla})\psi^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})+\sigma^q(r,\vartheta,z)\psi^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})=S^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}),$$

$$0\le r_{\text{int}}\le r\le r_{ext},\ 0\le\vartheta_0\le\vartheta\le\vartheta_{end}\le 2\pi,\ 0\le z_{bot}=z_0\le z\le z_{top}=H,\ q=1,...,Q, \quad (1)$$

$$\psi^q(r=r_{\text{int}},\vartheta,z)\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r)>0}=f^q_{\text{int}}(\vartheta,z,\vec{\Omega})+\frac{R^q_{\text{int}}}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_r)<0}\chi^q_{\text{int}}(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r=r_{\text{int}},\vartheta,z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r=r_{ext},\vartheta,z)\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r)<0}=f^q_{ext}(\vartheta,z,\vec{\Omega})+\frac{R^q_{ext}}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_r)>0}\chi^q_{ext}(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r=r_{ext},\vartheta,z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r,\vartheta,z=z_{bot})\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z)>0}=f^q_{bot}(r,\vartheta,\vec{\Omega})+\frac{R^q_{bot}}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_z)<0}\chi^q_{bot}(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r,\vartheta,z=z_{bot},\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r,\vartheta,z=z_{top})\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z)<0}=f^q_{top}(r,\vartheta,\vec{\Omega})+\frac{R^q_{top}}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_z)>0}\chi^q_{top}(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r,\vartheta,z=z_{top},\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r,\vartheta=\vartheta_0,z)\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_\vartheta)>0}=f^q_0(r,z,\vec{\Omega})+\frac{R^q_0}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_\vartheta)<0}\chi^q_0(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r,\vartheta=\vartheta_0,z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r,\vartheta=\vartheta_{end},z)\big|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_\vartheta)<0}=f^q_{end}(r,z,\vec{\Omega})+\frac{R^q_{end}}{2\pi}\int\limits_{(\vec{\Omega}'\vec{n}_\vartheta)>0}\chi^q_{end}(\vec{\Omega},\vec{\Omega}')\psi^q(r,\vartheta=\vartheta_{end},z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}',$$

(2)

Здесь

$$\vec{r}=r\vec{n}_r+z\vec{n}_z,\qquad \vec{n}_\vartheta=\left[\vec{n}_z\vec{n}_r\right],\qquad \psi^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})=\int\limits_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}}\psi(r,\vartheta,z,\vec{\Omega},E)dE$$

- поток нейтронов (фотонов) в q-ой группе. Общее число групп Q, вообще говоря, состоит из расположенных в порядке убывания энергии Q_n групп нейтронов и Q_γ групп фотонов: $Q=Q_n+Q_\gamma$. В (1) $\sigma^q(r,\vartheta,z)$ - полное сечение в q-ой группе, $S^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})$ - правая часть уравнения переноса, состоящая из источника межгрупповых переходов, источника деления и заданного внутреннего источника $F^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})$:

$$S^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}) = \sum_{p=P_{\min}(q)}^{P_{\max}(q)} \sigma_s^{p\to q}(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}\vec{\Omega}')\psi^p(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}' +$$

$$\frac{\chi^q}{4\pi}\sum_p \nu\sigma_f^p(r,\vartheta,z)\Phi_0^p(r,\vartheta,z) + F^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}),$$

$$\Phi_0^p(r,\vartheta,z) = \int_{4\pi}\psi^p(r,\vartheta,z,\vec{\Omega})d\vec{\Omega},\ \ 1 \le P_{\min}(q) \le q,\ \ \ q \le P_{\max}(q) \le Q. \qquad (3)$$

Здесь $\sigma_s^{p\to q}(r,\vartheta,z,\mu_s)$ - сечение рассеяния для перехода из *p*-ой группы в *q*-ую; $\mu_s = \vec{\Omega}\vec{\Omega}'$ - угол рассеяния; χ^q - спектр деления; $\nu\sigma_f^p$ - произведение числа вторичных нейтронов, возникающих в одном акте деления, на сечение деления. Источник межгрупповых переходов включает в себя переходы с $P_{\min}(q) \le p < q$, соответствующее процессам замедления нейтронов (фотонов), внутригрупповое рассеяние *(p=q)*, а также, возможно, и переходы с *p>q* (при $P_{\max}(q) > q$), соответствующие процессам термализации, каскадным процессам и т. д.

В дальнейшем мы будем предполагать, что сечение рассеяния $\sigma_s^{p\to q}(r,\vartheta,z,\mu_s)$ задано в P_L приближении:

$$\sigma_s^{p\to q}(r,\vartheta,z,\mu_s) = \sum_{l=0}^{L}\frac{(2l+1)}{4\pi}\sigma_{s,l}^{p\to q}(r,\vartheta,z)P_l(\mu_s). \qquad (4)$$

Наряду с неоднородной краевой задачей (1)-(2), мы будем рассматривать также однородную задачу на собственное значение (k_{eff}). В этом случае граничные и внутренние заданные источники отсутствуют, а правая часть решаемой многогрупповой системы имеет вид:

$$S^q(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}) = \sum_{p=P_{\min}(q)}^{P_{\max}(q)} \sigma_s^{p\to q}(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}\vec{\Omega}')\psi^p(r,\vartheta,z,\vec{\Omega}')d\vec{\Omega}' +$$

$$+\frac{\chi^q}{4\pi k_{eff}}\sum_p \nu\sigma_f^p(r,\vartheta,z)\Phi_0^p(r,\vartheta,z). \qquad (5)$$

Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в плоской геометрии.

В *одномерной плоской геометрии (азимутально-независимая задача)* уравнение переноса имеет вид:

$$\mu\frac{\partial\psi}{\partial x} + \sigma\psi(x,\mu) = S(x,\mu), \qquad (6)$$

где $\mu = Cos\theta = (\vec{\Omega}\vec{n}_x)$, $\vec{\Omega}$ - направляющий вектор скорости частицы, $-1 \le \mu \le 1$; пространственная переменная x изменяются в пределах: $x_0 \le x \le x_h$. Правая часть $S(x,\mu)$ уравнения (6) имеет вид:

$$S(x,\mu) = \sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{4\pi}\sigma_{s,l}P_l(\mu)\Phi_l(x) + f(x,\mu). \qquad (7)$$

Здесь $f(x,\mu)$ - постоянная компонента источника, $\Phi_l(x)$ - l-ый угловой момент потока:

$$\Phi_l\left(x\right)=2\pi\int_{-1}^{1}P_l\left(\mu\right)\psi\left(x,\mu\right)d\mu . \tag{8}$$

Для аппроксимации уравнения переноса (6) в плоской геометрии введем квадратуру $\left\{w_m,\mu_m\right\}$ по углу μ на интервале $-1\le\mu\le1$, а также разностную сетку по переменной x, покрывающую расчетную область $x_0\le x\le x_h$, и устроенную таким образом, чтобы границы геометрических зон с различными сечениями совпадали с какими-либо границами пространственных интервалов $\left(x_{i-1/2},x_{i+1/2}\right)$, $i=1,2,\dots,I$; через x_i обозначим центры интервалов. В целях единообразия записи алгоритмов для углов $\mu_m>0$ и $\mu_m<0$, введем следующие величины:

$$\psi_m^{\pm}=\begin{cases}\psi_{i\pm1/2,m},\mu_m>0\\ \psi_{i\mp1/2,m},\mu_m<0\end{cases},\quad x^{\pm}=\begin{cases}x_{i\pm1/2},\mu_m>0\\ x_{i\mp1/2},\mu_m<0\end{cases},\quad s=sign\left(\mu_m\right),\quad h=\frac{\sigma\Delta x_i}{\left|\mu_m\right|},$$

$$\Delta x_i=x_{i+1/2}-x_{i-1/2}. \tag{9}$$

Интегрируя уравнение (6) вдоль характеристики в пределах разностной ячейки, получим:

$$\psi_m^{+}=\psi_m^{-}e^{-h}+\frac{1}{\mu_m}\int_{x^-}^{x^+}S_m\left(x\right)\exp\left[-\frac{\left(x^{+}-x\right)\sigma}{\mu_m}\right]dx . \tag{10}$$

При построении консервативных схем для уравнения переноса фундаментальную роль играет выполнение балансных соотношений для разностной ячейки, которые получаются путем интегрирования уравнение (6) по x на интервале $\left(x_{i-1/2},x_{i+1/2}\right)$ с весом полиномов Лежандра $p_{i,k}\left(x\right)$, ортогональных на этом интервале:

$$p_{i,k}\left(x\right)\equiv P_k\left[\frac{2}{\Delta x}\left(x-x_i\right)\right],\ \ k=0,1,\dots,\quad \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}p_{i,k}\left(x\right)p_{i,j}\left(x\right)dx=\delta_{k,j}\frac{\Delta x}{2k+1}, \tag{11}$$

$$p_{i,0}(x)=1,\ \ p_{i,1}\left(x\right)=\frac{2}{\Delta x}\left(x-x_i\right),\ \ p_{i,2}\left(x\right)=\frac{6}{\left(\Delta x\right)^2}\left(x-x_i\right)^2-\frac{1}{2},\ \dots$$

что приводит к следующей цепочке балансных уравнений (ниже целые индексы опускаются в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$\frac{1}{h}\left(\psi^{+}-\psi^{-}\right)+\psi^{(0)}=\frac{S^{(0)}}{\sigma}, \tag{12}$$

$$\frac{3}{hs}\left[\psi^{+}+\psi^{-}-2\psi^{(0)}\right]+\psi^{(1)}=\frac{S^{(1)}}{\sigma}, \tag{13}$$

$$\frac{(2k+1)}{hs}\left\{s^{(k+1)}\left[\psi^{+}-\left(-1\right)^k\psi^{-}\right]-2\sum_{j=0}^{k-2j-1\ge0}\psi^{(k-2j-1)}\right\}+\psi^{(k)}=\frac{S^{(k)}}{\sigma}, \tag{14}$$

$$\psi^{(k)} = \frac{(2k+1)}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x)\, p_{i,k}(x) dx , \qquad S^{(k)} = \frac{(2k+1)}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S(x)\, p_{i,k}(x) dx . \qquad (15)$$

Для получения разностной схемы производится обрыв этой цепочки уравнений с использованием дополнительных предположений о поведении решения/источника в ячейке. В частности, можно предположить, что источник в уравнениях (14) и (15) в пределах разностной ячейки аппроксимируется своим разложением по полиномам Лежандра (11):

$$S(x) \cong L(x) = \sum_{k=0}^{n-1} C_k\, p_{i,k}(x), \qquad C_k = L^{(k)} = S^{(k)} . \qquad (16)$$

Данное приближение, сохраняющее n пространственных моментов источника в ячейке, соответствует M_n схеме Вадьянатана, имеющей $2n$-ый порядок точности. При $n=1$ уравнение (10) приобретает вид:

$$\psi^{+} = \psi^{-} e^{-h} + \frac{S^{(0)}}{\sigma}\left(1-e^{-h}\right). \qquad (17)$$

Совместно с уравнением баланса нулевого порядка (12) данное дополнительное уравнение образует step continuous (SC) или M_1 схему 2-ого порядка точности. При $n=2$ уравнение (10) приобретает вид:

$$\psi^{+} = \psi^{-} e^{-h} + \frac{S^{(0)}}{\sigma}\left(1-e^{-h}\right) + \frac{2sS^{(1)}}{\sigma}\left[1-\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{h}\right)\left(1-e^{-h}\right)\right]. \qquad (18)$$

Совместно с уравнениями баланса нулевого и первого порядка (12) и (13) данное дополнительное уравнение образует M_2 схему четвертого порядка точности.

Семейство WDD схем в плоской геометрии

Взвешенная алмазная (weighted diamond differencing (WDD)) схема получается путем добавления к уравнению баланса нулевого порядка (12) следующего дополнительного уравнения:

$$\psi^{+} = (1+P)\psi - P\psi^{-} , \quad 0 \le P \le 1, \qquad (19)$$

Значение веса $P=1$ отвечает алмазной схеме 2-ого порядка точности, значения $0 \le P < 1$ и $P=0$ - взвешенной и шаговой схеме 1-ого порядка точности. WDD схема эквивалентна M_1 схеме с дополнительной дробно-рациональной аппроксимацией экспоненты:

$$e^{-h} \cong \frac{1+P-hP}{1+P+h} \equiv a_{WDD} . \qquad (20)$$

Теорема (А. Волощенко, 1981). Необходимым и достаточным условием монотонности разностной схемы, удовлетворяющей условиям 1)-3) является выполнение в каждой ячейке неравенства:

$$\left(\psi^{-} - S/\sigma\right)\left(\psi^{+} - S/\sigma\right) \ge 0 . \qquad (21)$$

Семейство WLB/QC-WLD схем в плоской геометрии.

Аналогом WDD схемы среди разностных схем для уравнения переноса (6), удовлетворяющим балансным уравнениям нулевого и первого порядка (12) и (13) является weighted linear best/quadratic continuous - weighted linear discontinuous (WLB/QC-WLD) схема, которая получается добавлением к указанным балансным уравнениям следующего дополнительного уравнения (А. Волощенко, 1984):

$$\psi^{+} = (1-P)\psi + (Q+P)s\psi^{x} + P\psi^{-},\ 0 \le P \le 1,\ Q = 1 \text{ или } P = 0,\ 1/3 \le Q < \infty,$$
$$s = \operatorname{sign}(\mu). \qquad (22)$$

Здесь P и Q - весовые коэффициенты схемы. Для LB/QC схемы 4-ого порядка точности $P = Q = 1$. Эта схема для случая плоской геометрии была независимо предложена Ларсеном (неопубликовано) и А. Волощенко, 1984.

Для LD схемы $P = 0,\ Q = 1$; для WLB схемы 3-ого порядка точности $0 \le P < 1,\ Q = 1$; для WLD схемы 2-ого порядка точности $P = 0,\ 1/3 \le Q < \infty$.

Соотношение (22) – соответствует рациональной аппроксимацией $\exp(-h)$ 2-4-ого порядка точности:

$$a(h) = \frac{6(Q+P) - (3Q+4P-1)h + Ph^2}{6(Q+P) + (3Q+2P+1)h + h^2} \approx e^{-h}, \qquad (23)$$

Как показывает теоретический анализ и геометрическая интерпретация WLB/QC-WLD схемы, путем соответствующего выбора весовых коэффициентов в дополнительном уравнении (22) можно обеспечить положительность схемы, когда при неотрицательных входящем угловом потоке и источнике:

$$\psi^{-} \ge 0,\ S \ge 0,\ \left|S^{x}\right| \le 3S, \qquad (24)$$

полученное решение в ячейке также неотрицательно:

$$\psi^{+} \ge 0,\ \psi \ge 0,\ \left|\psi^{x}\right| \le 3\psi. \qquad (25)$$

LB/QC, WLB и LD схемы могут быть получены путем аппроксимации потока в ячейке $\psi(x)$ линейным элементом с разрывами на границах ячейки (см. Рис. 1), который для случая $\mu > 0$ имеет вид:

$$\psi(x) = \psi^{(0)} + \frac{2(x-x_i)}{\Delta x}\psi^{(1)} = \left(\psi_{i-1/2} - \Delta_i^{-}\right)\frac{\left(x_{i+1/2}-x\right)}{\Delta x} + \left(\psi_{i+1/2} - \Delta_i^{+}\right)\frac{\left(x - x_{i-1/2}\right)}{\Delta x}. \qquad (26)$$

где

$$\psi_{i-1/2} = \psi_{i-1/2}^{+} + \Delta_i^{-},\quad \psi_{i+1/2} = \psi_{i+1/2}^{-} + \Delta_i^{+},\quad \psi_{i-1/2}^{+} \equiv \psi\left(x_{i-1/2}+0\right),\quad \psi_{i+1/2}^{-} \equiv \psi\left(x_{i+1/2}-0\right),$$
$$\Delta_i^{+} = \frac{2P}{(1+P)}\Delta,\quad \Delta_i^{-} = \frac{2}{(1+P)}\Delta,\quad \Delta = \frac{1}{2}\left(\psi_{i+1/2} + \psi_{i-1/2}\right) - \psi^{(0)}. \qquad (27)$$

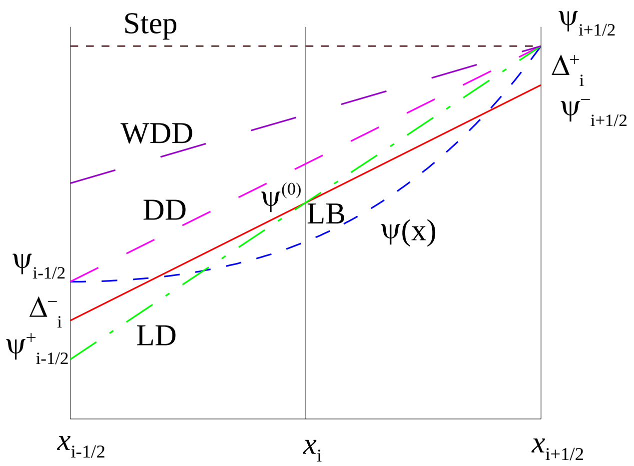


Рис. 1. Геометрическая интерпретация Step, DD, LD и LB схем.

Для LB схемы $\Delta_i^+ = \Delta_i^- = \Delta$, для LD схемы $\Delta_i^+ = 0$, $\Delta_i^- = 2\Delta$. LB схема соответствует наилучшей (в L_2 норме) аппроксимации потока $\psi(x)$ в ячейке посредством линейного полинома. Исходя из этой интерпретации, подходящим названием для этой схемы является linear best (LB) схема.

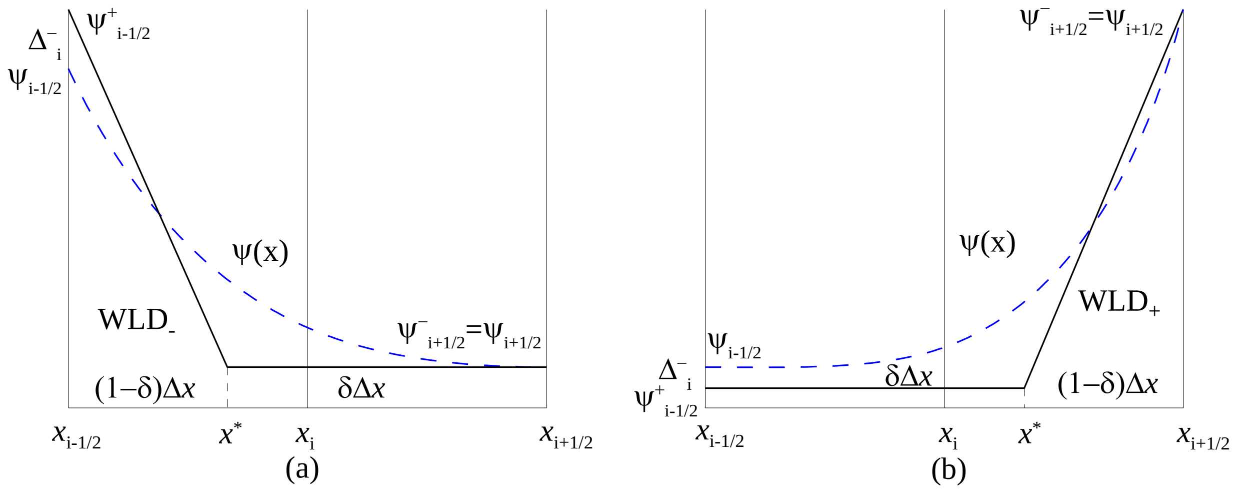


Рис. 2. Геометрическая интерпретация: (a) WLD- $(1/3 \le Q < 1)$ и (b) WLD+ $(Q > 1)$ схем.

Адаптивная WDD и MDS$_N$ схемы для уравнения переноса в плоской геометрии

Уравнение баланса (12) может быть переписано в виде:

$$\psi^+ - \psi^- + h'\psi^{(0)} = 0, \tag{28}$$

где

$$h' = h\left(1 - \frac{S^{(0)}}{\sigma\psi^{(0)}}\right) \cong h'_{P_0} = \left(1 + P_0\right)\left(\frac{\psi^- - \psi_{P_0}^{(0)}}{\psi_{P_0}^{(0)}}\right) \equiv \left(1 + P_0\right)u \tag{29}$$

это величина, которой можно придать смысл эффективной оптической толщины ячейки (B. Carlson, 1976).

Следующее дробно-рациональное выражение является приемлемым выбором для $P(u)$:

$$P(u)=\frac{u/(1+P_0)+\beta}{u^2+\gamma u+\alpha},\ \gamma=\frac{1}{P_0(1+P_0)}-2u_0,\ \beta=\frac{\gamma}{1+P_0},\ \alpha=\frac{\beta}{P_0}+u_0^2,$$

$$0<u_0\le\frac{1}{P_0(1+P_0)}. \qquad (30)$$

Два частных случая этой формулы имеют практический интерес:

$$u_0=\frac{1}{P_0(1+P_0)},\ \alpha=0,\ \ \beta=-P_0u_0^2,\ \ \gamma=\beta(1+P_0),\ \ P(u)=\frac{1}{u(1+P_0)}=P_0\frac{u_0}{u} \qquad (31)$$

$$u_0=\frac{1}{2P_0(1+P_0)},\quad \alpha=u_0^2,\quad \beta=\gamma=0,\quad P(u)=\frac{1}{(1+P_0)\left[u+u_0^2/u\right]}. \qquad (32)$$

Адаптивная WLB/QC-WLD (AWLB/QC-WLD) схема для уравнения переноса в плоской геометрии

Перепишем дополнительное уравнение WLB/QC-WLD схемы (22) в виде, аналогичном (28) (А. Волощенко, 1994):

$$\psi^{+}=\psi^{(0)}\left(1-Qu_1-Pu_2\right), \qquad (33)$$

где

$$u_1=-\frac{s\psi^{(1)}}{\psi^{(0)}}\sim-\frac{\partial\psi/\partial x}{\psi},\ \ u_2=\frac{\psi^{(0)}-\psi^{-}-s\psi^{(1)}}{\psi^{(0)}}\sim\frac{\partial^2\psi/\partial x^2}{\psi}. \qquad (34)$$

В AWLB/QC-WLD схеме веса P и Q вычисляются в результате оценки параметров u_1 и u_2, пропорциональных первой и второй производным решения.

Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в плоской геометрии

В качестве тестовой задачи рассмотрим одногрупповую 4-х зонную задачу с изотропным рассеянием, изображенную на Рис. 3.

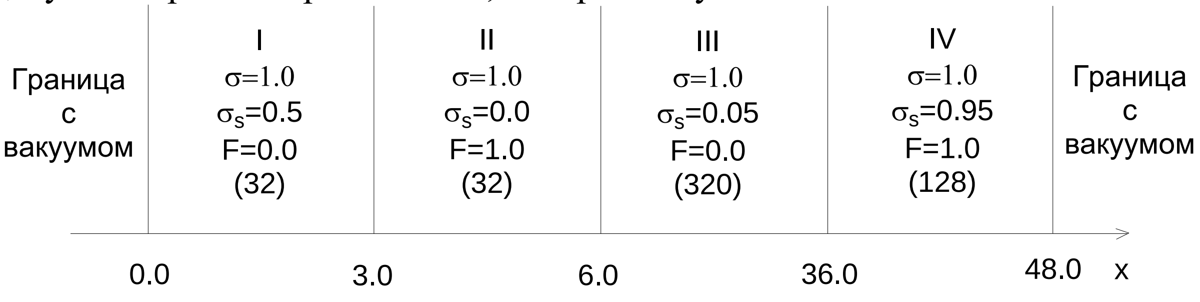


Рис. 3. Модельная задача в плоской геометрии (R. Alcouff, 1979). Указаны полное сечение σ, сечение рассеяния σ_s, внутренний изотропный источник F и число шагов мелкой пространственной сетки по зонам.

Вторая и третья зоны модельной задачи являются поглощающими, а 4-ая зона - диффузионной. Число интервалов равномерной пространственной сетки (с шагом $\Delta x = 3/32$) по зонам, на которой получено "точное" решение с использованием LB/QC схемы 4-ого порядка точности, указано в скобках. Точностью сходимости итераций составляла 10^{-10}.

$$\delta_{average} = \max_{i \in K_j} \frac{\Phi_i^{(0)} - \Phi_i^{(0)ex}}{\Phi_i^{(0)ex}}, \qquad \delta_{sum} = \frac{\sum_i \Phi_i^{(0)} \Delta x_i - \int_0^X \Phi^{ex}(x)dx}{\int_0^X \Phi^{ex}(x)dx}. \tag{35}$$

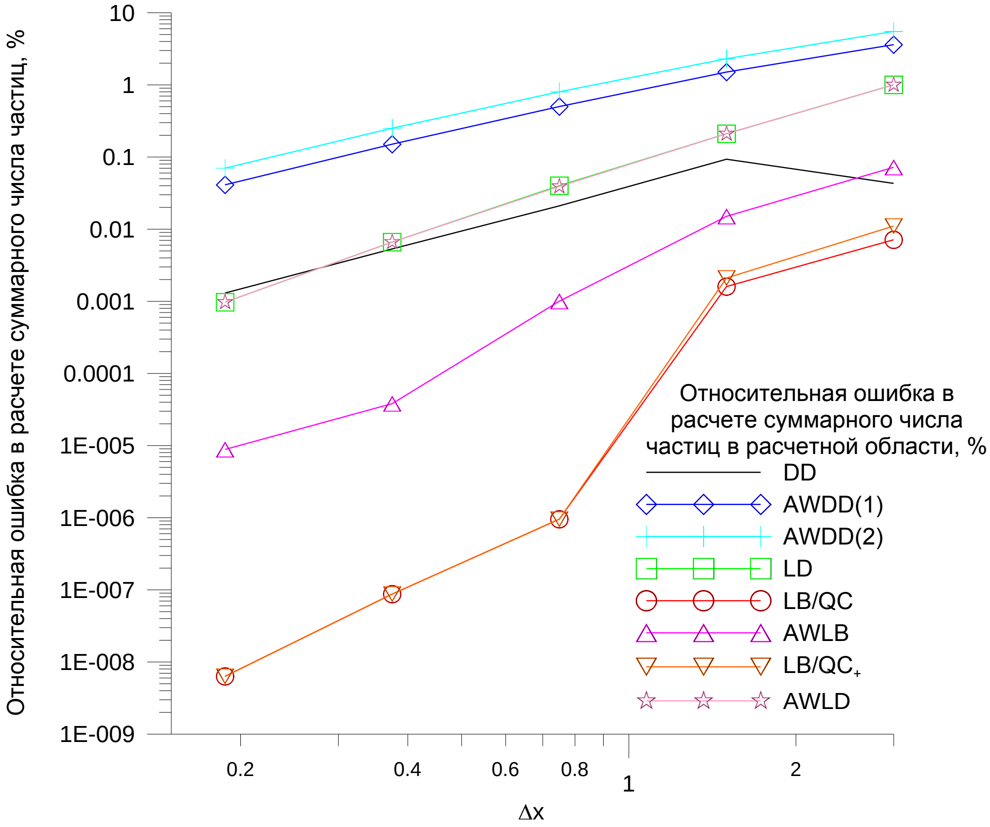


Рис. 4. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи (Рис. 3) в плоской геометрии, %.

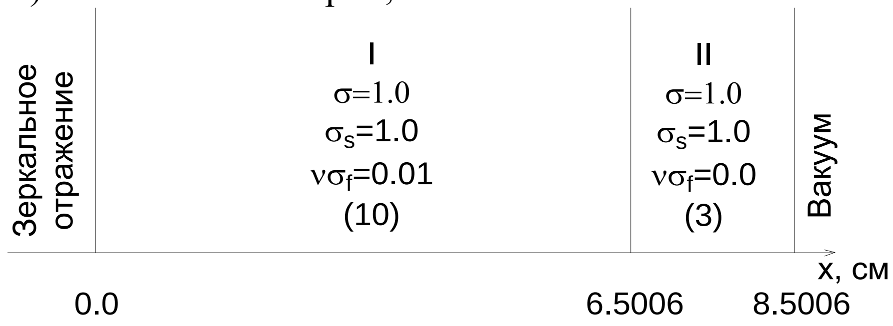


Рис. 5. Критическая пластина с отражателем (Aronson, 1984). Указаны полное сечение σ, сечение рассеяния σ_s, $\nu\sigma_f$ и число шагов пространственной сетки по зонам (в скобках).

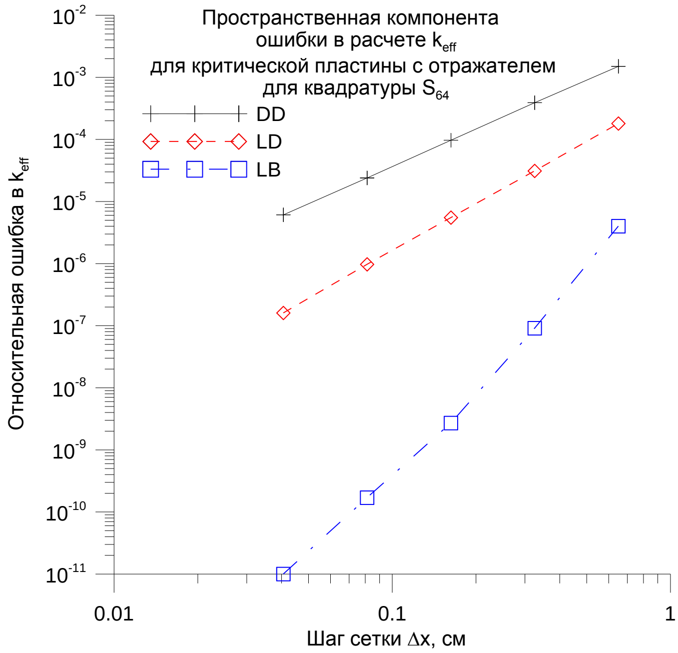


Рис. 6. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете критической пластины с отражателем (см. Рис. 5) с фиксированной квадратурой S_{64}. В качестве точного решения использовалось решение, полученное по LB схеме на сетке 320+96 с точностью сходимости 10^{-12}.

Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях

В *одномерной сферической геометрии* уравнение переноса имеет вид:

$$\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\psi\right)+r\frac{\partial}{\partial\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\psi\right]+\sigma r^2\psi(r,\mu)=r^2S(r,\mu), \quad (36)$$

где $\mu=Cos\theta=\left(\vec{\Omega}\vec{n}_r\right)$, $\vec{n}_r=\vec{r}/r$, $\vec{\Omega}$ - направляющий вектор скорости частицы, $-1\le\mu\le1$; пространственная переменная r изменяются в пределах: $0\le r_{\text{int}}\le r\le r_{out}$.

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (36) по разностной ячейке $(r_{i-1/2},r_{i+1/2})\times(\mu_{m-1/2},\mu_{m+1/2})$, $i=1,..,I$, $m=1,..,M$ ($r_{1/2}=r_{\text{int}}$, $r_{I+1/2}=r_{ext}$, $\mu_{1/2}=-1$, $\mu_{M+1/2}=1$; ниже мы опускаем целые индексы, в том числе, номер группы, в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$|\mu|\left(A^+\psi^+-A^-\psi^-\right)+\frac{C}{w}\left(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2}-\alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}\right)+\sigma V\psi=VS, \quad (37)$$

где коэффициенты $\alpha_{m\pm1/2}$ находятся из рекуррентного соотношения:

$$\alpha_{m+1/2}-\alpha_{m-1/2}=-w_m\mu_m, \qquad \alpha_{1/2}=\alpha_{M+1/2}=0, \qquad m=1,..,M, \quad (38)$$

а остальные величины равны:

$$A_{i\pm1/2}=r_{i\pm1/2}^2,\quad V_i=\frac{1}{3}(r_{i+1/2}^3-r_{i-1/2}^3),\quad C_i=r_{i+1/2}^2-r_{i-1/2}^2,\quad w_m=\mu_{m+1/2}-\mu_{m-1/2},$$

$$\psi^{\pm}=\begin{cases}\psi_{i\pm1/2,m},\mu_m>0\\ \psi_{i\mp1/2,m},\mu_m<0\end{cases},\qquad A^{\pm}=\begin{cases}A_{i\pm1/2},\mu_m>0\\ A_{i\mp1/2},\mu_m<0\end{cases},$$

$$\psi_{i,m\pm1/2}=\frac{1}{v_i^c}\int\limits_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}}\psi\left(r,\mu_{m\pm1/2}\right)rdr,\ \ v_i^c=\frac{1}{2}\left(r_{i+1/2}^2-r_{i-1/2}^2\right),$$

$$\psi\equiv\psi_{i,m}^{(0)}=\frac{1}{V_iw_m}\int\limits_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}}\int\limits_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}}\psi(r,\mu)r^2drd\mu,\ \ S\equiv S_{i,m}^{(0)}=\frac{1}{V_iw_m}\int\limits_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}}\int\limits_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}}S(r,\mu)r^2drd\mu.\quad(39)$$

$$\psi^+=(1+P_r)\psi-P_r\psi^-,\quad \psi_{m+1/2}=(1+P_\mu)\psi-P_\mu\psi_{m-1/2},\ 0\le P_r,P_\mu\le1.\qquad(40)$$

Уравнение баланса в 1D сферической геометрии может быть записано в "квазиодномерном" виде (А. Волощенко, 1984) по каждой из переменных:

$$|\mu|[(A^+\psi_r^+-A^-\psi_r^-)+(A^--A^+)\psi]+\sigma_rV\psi=VS_r,\quad \sigma_rV=\sigma V+\frac{C}{w}\left(\alpha_{m-1/2}+P_\mu\alpha_{m+1/2}\right),$$

$$VS_r=VS+\frac{C}{w}\left(\alpha_{m-1/2}+P_\mu\alpha_{m+1/2}\right)\psi_{m-1/2},$$

$$\psi_r^+=(1+P_r)\psi-P_r\psi_r^-.\qquad(41)$$

Аналогично, величины σ_μ и S_μ могут быть интерпретированы как "сечение и источник" для экстраполяции по переменной μ, так как уравнение баланса (37) с помощью этих величин может быть переписано в "квазиодномерном" виде:

$$\frac{C}{w}\left[\left(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2}-\alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}\right)+\left(\alpha_{m-1/2}-\alpha_{m+1/2}\right)\psi\right]+\sigma_\mu V\psi=VS_\mu,$$

$$\sigma_\mu V=\sigma V+|\mu|\left(A^-+P_rA^+\right),\quad VS_\mu=VS+|\mu|\left(A^-+P_rA^+\right)\psi^-,$$

$$\psi_{m+1/2}=(1+P_\mu)\psi-P_\mu\psi_{m-1/2}.\qquad(42)$$

Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в двумерной геометрии

Рассмотрение начнем со случая x,z геометрии. В этой геометрии отсутствует зависимость решения от переменной y и уравнение переноса (1) приобретает вид:

$$\mu\frac{\partial\psi}{\partial z}+\xi\frac{\partial\psi}{\partial x}+\sigma\psi(x,z,\xi,\mu)=S(x,z,\xi,\mu),\quad x_{\mathrm{int}}\le x\le x_{out},\ z_{bot}\le z\le z_{top}.\qquad(43)$$

Здесь ξ и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы, который с учетом имеющейся в данной геометрии симметрии: $\psi(x,z,\mu,\varphi)=\psi(x,z,\mu,2\pi-\varphi)$ изменяется в пределах полусферы: $-1 \le \xi, \mu \le 1,\ 0 \le \varphi \le \pi$. Правую часть уравнения (43), учитывая имеющуюся симметрию, можно представить в виде:

$$S(x,z,\mu,\varphi) = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} \sum_{m=0}^{l} Y_l^m(\mu,\varphi) \Phi_l^m(x,z) + f(x,z,\mu,\varphi). \qquad (44)$$

Уравнения баланса нулевого и первого порядка получаются путем интегрирования уравнения (43) по разностной ячейке $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [z_{k-1/2}, z_{k+1/2}]$ с весами 1, $2(x-x_i)/\Delta x$ и $2(z-z_k)/\Delta z$:

$$|\xi| \Delta z(\psi_R - \psi_L) + |\mu| \Delta x(\psi_T - \psi_B) + \sigma V \psi = VS, \qquad (45)$$

$$\xi \Delta x \Delta z \left[(\psi_R + \psi_L)/2 - \psi \right] + |\mu| v_x^1 (\psi_T^x - \psi_B^x) + \sigma V^x \psi^x = V^x S^x, \qquad (46)$$

$$|\xi| v_z^1 (\psi_R^z - \psi_L^z) + \mu \Delta x \Delta z \left[(\psi_T + \psi_B)/2 - \psi \right] + \sigma V^z \psi^z = V^z S^z. \qquad (47)$$

Здесь ψ , S - среднее значение потока и источника в ячейке; ψ^t и S^t, $t = x, z$ - первые пространственные моменты по переменным x и z:

$$\psi = \psi^{(0,0)} = \frac{1}{\Delta x \Delta z} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi(x,z) dx dz, \quad \psi^x = \psi^{(1,0)} = \frac{1}{v_x^1 \Delta z} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (x - x_i) \psi(x,z) dx dz,$$

$$\psi^z = \psi^{(0,1)} = \frac{1}{\Delta x v_z^1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (z - z_k) \psi(x,z) dx dz, \quad S = S^{(0,0)}, \quad S^x = S^{(1,0)}, \quad S^z = S^{(0,1)}, \qquad (48)$$

ψ_L, ψ_L^z, ψ_R, ψ_R^z, ψ_B, ψ_B^x, ψ_T и ψ_T^x, - нулевые и первые пространственные моменты по левой, правой, нижней и верхней граням пространственной ячейки:

$$\psi_{R(L)} = \begin{cases} \psi_{i\pm1/2,k}, & \xi > 0 \\ \psi_{i\mp1/2,k}, & \xi < 0 \end{cases}, \quad \psi_{T(B)} = \begin{cases} \psi_{i,k\pm1/2}, & \mu > 0 \\ \psi_{i,k\mp1/2}, & \mu < 0 \end{cases}, \quad \psi_{R(L)}^z = \begin{cases} \psi_{i\pm1/2,k}^z, & \xi > 0 \\ \psi_{i\mp1/2,k}^z, & \xi < 0 \end{cases},$$

$$\psi_{T(B)}^x = \begin{cases} \psi_{i,k\pm1/2}^x, & \mu > 0 \\ \psi_{i,k\mp1/2}^x, & \mu < 0 \end{cases},$$

$$\psi_{i\pm1/2,k} = \frac{1}{\Delta z} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi(x_{i\pm1/2}, z) dz, \qquad \psi_{i,k\pm1/2} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x, z_{k\pm1/2}) dx,$$

$$\psi_{i\pm1/2,k}^z = \frac{1}{v_z^1} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (z - z_k) \psi(x_{i\pm1/2}, z) dz, \qquad \psi_{i,k\pm1/2}^x = \frac{1}{v_x^1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (x - x_i) \psi(x, z_{k\pm1/2}) dx,$$

$$v_x = \Delta x, \quad v_z = \Delta z, \quad v_x^1 = \frac{(\Delta x)^2}{6}, \quad v_z^1 = \frac{(\Delta z)^2}{6}, \quad V = \Delta x \Delta z, \quad V^x = \Delta z v_x^1, \quad V^z = \Delta x v_z^1. \qquad (49)$$

WDD схема получается добавлением к уравнению баланса нулевого порядка (45) следующих дополнительных уравнений:

$$\psi_R = (1 + P_x)\psi - P_x \psi_L, \quad \psi_T = (1 + P_z)\psi - P_z \psi_B, \quad 0 \le P_x, P_z \le 1. \qquad (50)$$

WLB-WLD схема получается добавлением к уравнениям баланса нулевого и первого порядка (45), (46) и (47) следующих 4-х дополнительных уравнений (А. Волощенко):

$$\psi_R = (1 - P_x)\psi + (P_x + Q_x) s_x \psi^x + P_x \psi_L, \qquad \psi_T = (1 - P_z)\psi + (P_z + Q_z) s_z \psi^z + P_z \psi_B,$$

$$\psi_R^z = \psi^z + T_x s_x s_z \psi^x, \quad \psi_T^x = \psi^x + T_z s_x s_z \psi^z, \quad s_x = sign(\xi), \quad s_z = sign(\mu). \quad (51)$$

Таким образом, для величин ψ_R и ψ_T используются такие же дополнительные уравнения WLB-WLD схемы, как и в плоской геометрии с весовыми коэффициентами P_t и Q_t, $t = x, z$, меняющимися в пределах:

$$0 \le P_t \le 1, \ Q_t = 1 \text{ или } P_t = 0, \ 1/3 \le Q_t < \infty, \quad |T_t| \le 3Q_t, \ t = x, z. \quad (52)$$

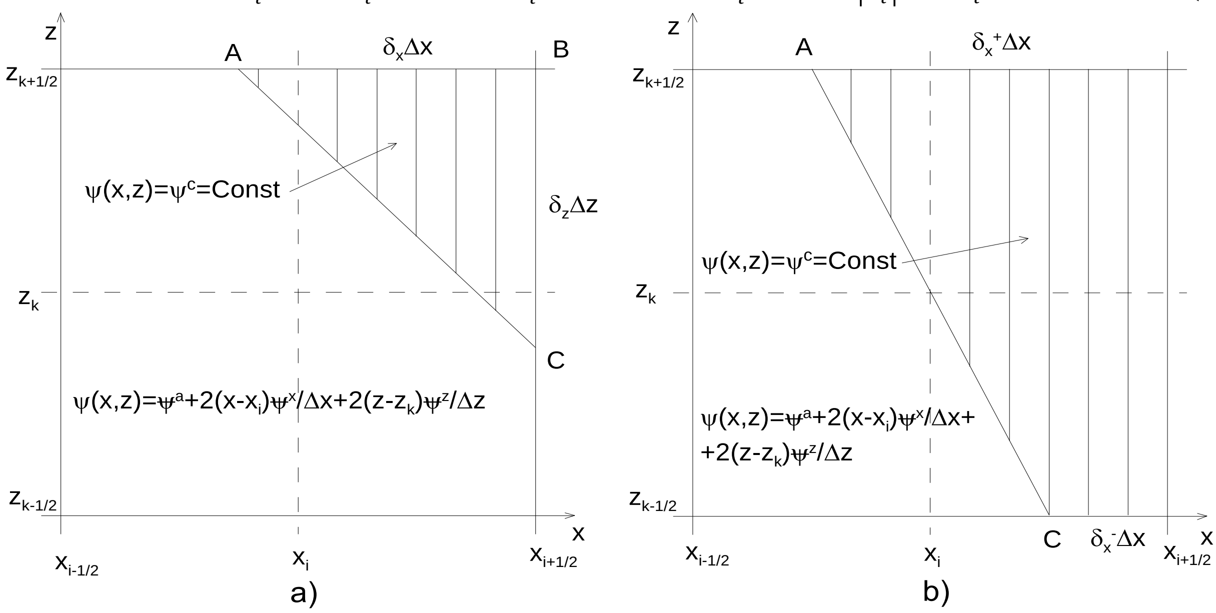


Рис. 8. Геометрическая интерпретация WLD схемы в x, z геометрии (всего должно быть рассмотрено 12 случаев (А. Волощенко, 2011).

Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в двумерных геометриях

Приведем результаты (см. Рис. 10), показывающие скорость сходимости k_{eff} в зависимости от выбора пространственной сетки и разностной схемы при фиксированной квадратуре ES_8 для 2-х зонной задачи (Alcouff,2003) в r, z геометрии, изображенной на Рис. 9. и ее аналога в x, z геометрии. В случае x, z геометрии на левой границе расчетной области использовалось условие зеркального отражения. Данная задача решалась с квадратурой ES_8 и использованием равномерной пространственной сетки из 10, 20, 40, 80 и 160 интервалов по каждой из переменных. В качестве точного использовалось значение k_{eff}, рассчитанное по LB схеме на сетке из 320×320 интервалов с точностью сходимости итераций 10^{-10}.

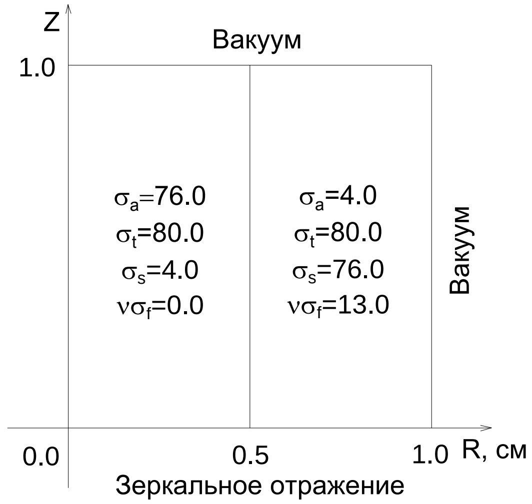


Рис. 9. Модельная задача в r,z геометрии (Alcouff, 2003). Указаны сечение поглощения σ_a, полное сечение σ_t, сечение рассеяния σ_s, $\nu\sigma_f$ по зонам.

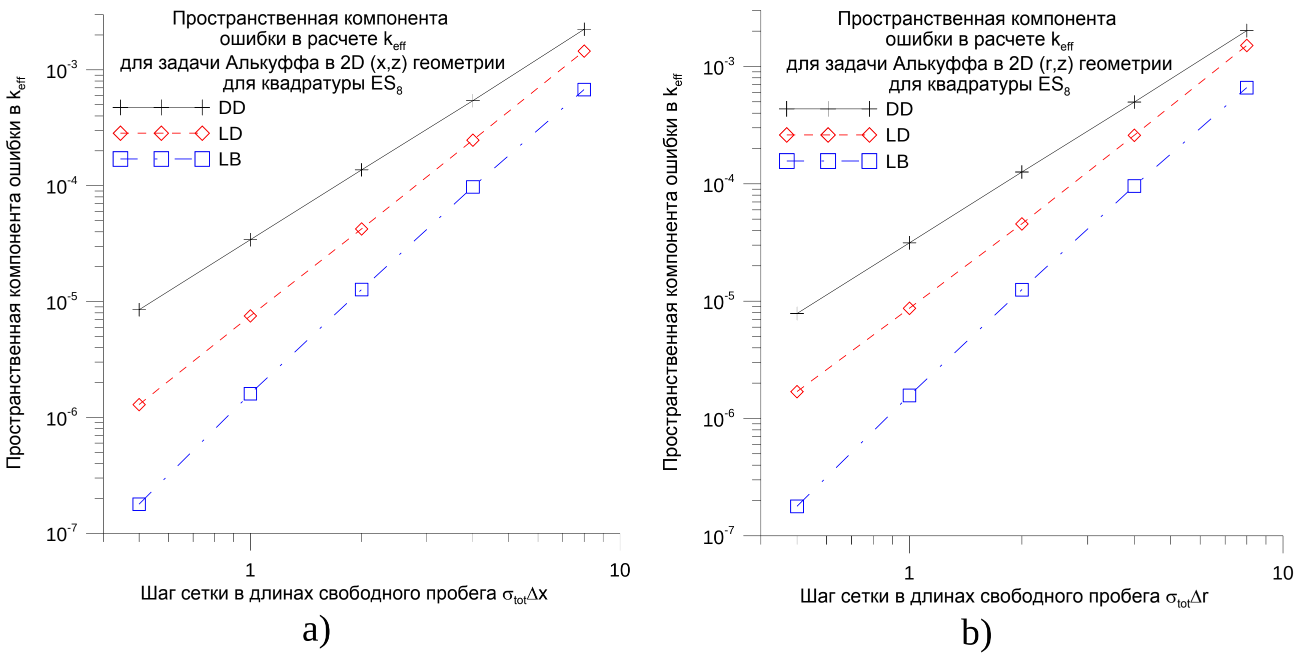


Рис. 10. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете модельной задачи (см. Рис. 9) в x,z и r,z геометриях с фиксированной квадратурой ES_8.

В **главах 2, 3 и 4** рассмотрены, соответственно согласованная KP1 схема ускорения внутренних итераций в 1D, 2D и 3D геометриях.

KP1 схема ускорения внутренних итерация, согласованная с WDD схемой, для уравнения переноса в 1D геометриях

Для ускорения сходимости внутренних итераций в KP_1 схеме используются линейные поправки к нулевому и первому угловым моментам решения:

$$\psi_{i,m}^{n+1} = \psi_{i,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi}\left(f_i^0 + 3\mu_m f_i^1 \right), \quad \psi_{i\pm1/2,m}^{n+1} = \psi_{i\pm1/2,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi}\left(f_{i\pm1/2}^0 + 3\mu_m f_{i\pm1/2}^1 \right). \quad (53)$$

Результаты использования согласованной KP1 схема ускорения внутренних итерация для уравнения переноса в 1D геометриях

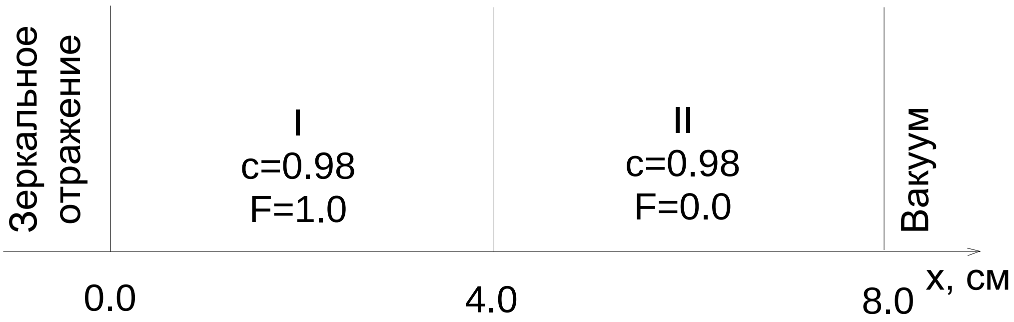


Рис. 11. Параметры тестовой задачи Мак-Коя и Ларсена, 1982

Таблица 1. Число итераций в тестовой задаче Мак-Коя и Ларсена в плоской геометрии в зависимости от значения σ для квадратуры Гаусса S_4 и $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$.

	Без ускоре-ния	DSA		KP_1						
σ	DD	DD	DD+St	$AWDD_1$	$AWDD_2$	LB	LD	AWLB	AWLD	LB/QC_+
1.0	198	4	4	5	5	4	4	4	4	4
2.0	273	4	4	6	6	5	4	5	5	5
4.0	366	5	5	9	14	4	4	7	6	4
6.0	567	7	10	16	19	6	4	16	18	6
8.0	541	-	40 (а)	18	18	6	6	15	30	б
9.0	501	-	а, б	18	18	7	7	12	13	б
10.0	430	5	а, б	18	18	7	8	9	10	б
20.0	297	4	а, б	17	15	8	6	10	11	б

[а]В отсутствие коррекции появляются отрицательные значения в интегральных потоках;

[б]Отсутствие сходимости итераций.

KP1 схема ускорения внутренних итерация, согласованная с WDD схемой, для уравнения переноса в 2D геометриях

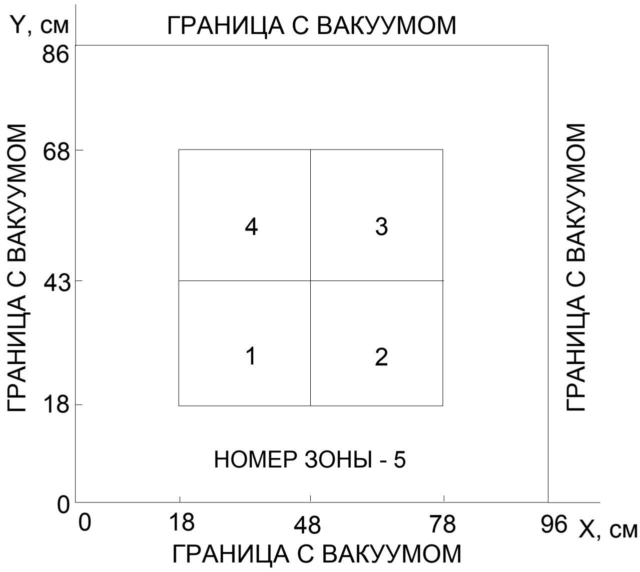
Для ускорения сходимости внутренних итераций в KP_1 схеме в r, z геометрии используются линейные поправки к нулевому и первым угловым моментам решения:

$$\psi^{n+1}_{i,k,l,m} = \psi^{n+1/2}_{i,k,l,m} + \frac{1}{4\pi}(f^0_{i,k} + 3\xi_{l,m} f^r_{i,k} + 3\mu_l f^z_{i,k}),$$
$$\psi^{n+1}_{i\pm1/2,k,l,m} = \psi^{n+1/2}_{i\pm1/2,k,l,m} + \frac{1}{4\pi}(f^0_{i\pm1/2,k} + 3\xi_{l,m} f^r_{i\pm1/2,k}),$$
$$\psi^{n+1}_{i,k\pm1/2,l,m} = \psi^{n+1/2}_{i,k\pm1/2,l,m} + \frac{1}{4\pi}(f^0_{i,k\pm1/2} + 3\mu_l f^z_{i,k\pm1/2}). \quad (54)$$

ADI метод для решения P_1 системы для ускоряющих поправок

P_1 система для KP_1 схемы в r, z геометрии решается нами итерационно (А. Волощенко, 2011), с использованием, ADI метода.

Представим результаты использования KP_1 схемы для расчета двух тестовых задач в r, z геометрии.



Номер зоны	σ (см$^{-1}$)	$\sigma_{s,0}$ (см$^{-1}$)	F (см$^{-3}$с$^{-1}$)
1	0.60	0.53	1.0
2	0.48	0.20	0.0
3	0.70	0.66	1.0
4	0.65	0.50	0.0
5	0.90	0.89	0.0

Рис. 12. Тестовая задача EIR-2 (Khalil, 1985) в x, y геометрии.

Номер Композиции	σ (см$^{-1}$)	$\sigma_{s,0}$ (см$^{-1}$)	$\sigma_{s,1}$ (см$^{-1}$)	F (см$^{-3}$с$^{-1}$)
1	3.3333	3.3136	0.9256	1.0
2	3.3333	3.3136	0.9256	0.0
3	1.3333	1.1077	0.0367	0.0

Рис. 13. Железо-водная композиция (Khalil, 1985) в x, y геометрии.

Таблица 3. Число внутренних итераций и расчетные времена при решении Задач 1-2 в r, z геометрии.

Задача	Метод							
	Без ускорения		J	ε_{ADI}	KP_1			
					ADI			SADI
	DD	AWDD			Step	DD	AWDD	AWDD
Задача 1, EIR-2 (Рис. 12), сетка 54×46, S_8P_0	154 (55.2) {173} 0.883[b]	139 (78) {160} 0.878[b]	1	0.2	5[4.8] (3.2)	10[16.8] (9.8)	10[10.1] (9.8)	10[10.9] (9.8)
			32	0.5	6[3.7] (3.6)	11[4.2] (6.5)	11[7.5] (9.8)	11[6.9] (9.5)
Задача 2, Fe-H_2O компози- ция, (Рис. 13), сетка 20×20, S_6P_1	1333 (50.9) {2015} 0.9927[b]	856 (50.4) {1489} 0.9924[b]	1	0.2	6[4.6] (0.44)	22[8.1] (1.7)	19[18.1] (2.7)	18[20.5] (2.8)
			32	0.5	6[3.5] (0.44){6}	17[4.1] (1.1){19}	18[4.8] (1.6){19}	19[4.4] (1.6){21}
			1	.02	5[14.6] (0.6)	9[37.4] (1.8)	18[36.1] (3.7)	18[38.5] (3.8)
			32	.05	5[12.6] (0.55)	9[19.4] (1.1)	17[14] (2.1)	17[14] (2.1)

DD	Разностная схема
10	Среднее по группам число итераций при выполнении критерия сходимости 10^{-4}
[16.8]	Среднее по группам число ADI итераций
(9.8)	Процессорное время в сек.
{}	Среднее по группам число итераций при выполнении критерия сходимости $(1-\rho)10^{-4}$
[b]	Значение спектрального радиуса сходимости итераций ρ

KP1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная со взвешенной алмазной схемой, для уравнения переноса в 3D геометриях.

P_1 система для ускоряющих поправок для KP_1 схемы в 3D геометриях решается методом расщепления (МР) (Марчук, 1988).

Таблица 4. Число внутренних итераций, требуемое для решения задач 1-2 без ускорения и при использовании KP_1 схемы в сочетании с циклическим MP для решения P_1 системы.

Задача	Без ускорения			KP_1 схема			
	Step	DD	AWDD$_1$	Step	DD	AWDD$_1$	AWDD$_2$
Задача 1. Композиция EIR-2 в x, y, z геометрии, сетка 56×50×56, S_8P_0	133 (1.58)	201 (2.63)	147 (4.93)	5 [8.2] (0.15) J=16	14 [12.7] (0.49) J=16	10 [20.1] (0.66) J=32	9 [21.8] (0.68) J=32
Задача 2. Железо-водная композиция в x, y, z геометрии, сетка 20×20×20, S_6P_1	782 (0.3)	2101 (0.91)	1094 (1.17)	5 [11.2] (0.005)	15 [10.5] (0.016)	20 [10.1] (0.033)	15 [9.7] (0.029)

В **главе 5** рассмотрена KP1 схема ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.

Ускорение внешних итераций, которые возникают, при наличии в матрице межгрупповых переходов переходов вверх по группам, является существенным элементом численной методики решения уравнения переноса. Существуют достаточно важные и представительные классы задач, при решении которых для уменьшения вычислительных затрат необходимо уменьшить число внешних итераций по области термализации нейтронов (thermal up-scattering) и (или) по источнику деления (fission up-scattering).

В KP_1 схеме ускорения внешних итераций ищутся поправки к нулевому и первому угловым моментам решения в виде:

$$\psi^{q,n+1}_{i,j,k,l,m} = \psi^{q,n+1/2}_{i,j,k,l,m} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi}\left(f^0_{i,j,k} + 3\xi_{l,m} f^r_{i,j,k} + 3\eta_{l,m} f^{\vartheta}_{i,j,k} + 3\mu_l f^z_{i,j,k} \right),$$

$$\psi^{q,n+1}_{i\pm1/2,j,k,l,m} = \psi^{q,n+1/2}_{i\pm1/2,j,k,l,m} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi}\left(f^0_{i\pm1/2,j,k} + 3\xi_{l,m} f^r_{i\pm1/2,j,k} \right),$$

$$\psi^{q,n+1}_{i,j\pm1/2,k,l,m} = \psi^{q,n+1/2}_{i,j\pm1/2,k,l,m} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi}\left(f^0_{i,j\pm1/2,k} + 3\eta_{l,m} f^{\vartheta}_{i,j\pm1/2,k} \right),$$

$$\psi^{q,n+1}_{i,j,k\pm1/2,l,m} = \psi^{q,n+1/2}_{i,j,k\pm1/2,l,m} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi}\left(f^0_{i,j,k\pm1/2} + 3\mu_l f^z_{i,j,k\pm1/2} \right). \qquad (55)$$

Такая форма ускоряющих поправок с факторизованной энергетической зависимостью позволяет построить арифметически простую схему ускорения внешних итераций, согласованную с используемой разностной аппроксимацией уравнения переноса (Аверин, Волощенко, 1994). Эффективность и устойчивость этой схемы существенно зависит от выбора спектральной функции ε^q. Общий алгоритм определения формы спектра для ускоряющих поправок ε^q основан на оценке энергетической зависимости собственной функции, отвечающей наиболее медленно убывающей Фурье-гармонике ошибки итерационного метода Гаусса-Зейделя (т. е., чистых, неускоренных внешних итераций) для рассматриваемой задачи.

Таблица 6. Число внешних итераций и расчетные времена (в круглых скобках) при расчете радиационной защиты РУ ВВЭР-440 и ВВЭР-1000 в 2D геометрии по программе КАСКАД-С в P_5S_8 приближении с точностью сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций $\varepsilon_{in} = 5\times10^{-4}$ и $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$. В таблице J - длина ADI цикла.

Тип реакторной установки	Геометрия	Сетка	J	Спектральная функция ε^q	Число внешних итераций и расчетное время (мин)	
					Без ускорения	KP_1
ВВЭР-440	r,z	139×189	16	Максвелл, $T = 600°K$	58 (25.91)	12 (13.8)
				ε^q из Фурье анализа		12 (14.1)
	r,ϑ	134×60	32	Максвелл, $T = 500°K$	42(4.22)	9 (2.99)
				Максвелл, $T = 600°K$		8 (2.96)
				ε^q из Фурье анализа		9 (2.98)
ВВЭР-1000	r,z	173×155	16	Максвелл, $T = 600°K$	72 (43.94)	9 (19.18)
				ε^q из Фурье анализа		9 (19.48)
	r,ϑ	204×120	32	Максвелл, $T = 600°K$	69 (16.28)	7 (9.09)
				Максвелл, $T = 500°K$		6 (9.08)
				ε^q из Фурье анализа		7 (9.13)

Таблица 7. Число внешних итераций и расчетные времена (для ПК Pentium 4 3.2 Ghz, в круглых скобках) при расчете радиационной защиты РУ ВВЭР-440 в 3D геометрии по программе КАТРИН в P_3S_8 приближении с точность сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-3}$ и $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 5\times10^{-3}$. В таблице J - длина цикла метода расщепления.

Тип реакторной установки	Геометрия	Сетка	J	Спектральная функция ε^q	Число внешних итераций и расчетное время (часы)	
					Без ускорения	KP_1
ВВЭР-440	r,ϑ,z	139×60×189 = 1576260	16	Максвелл, T=600°K	60	Неустойчив
				ε^q из Фурье анализа		8 (38 часов)

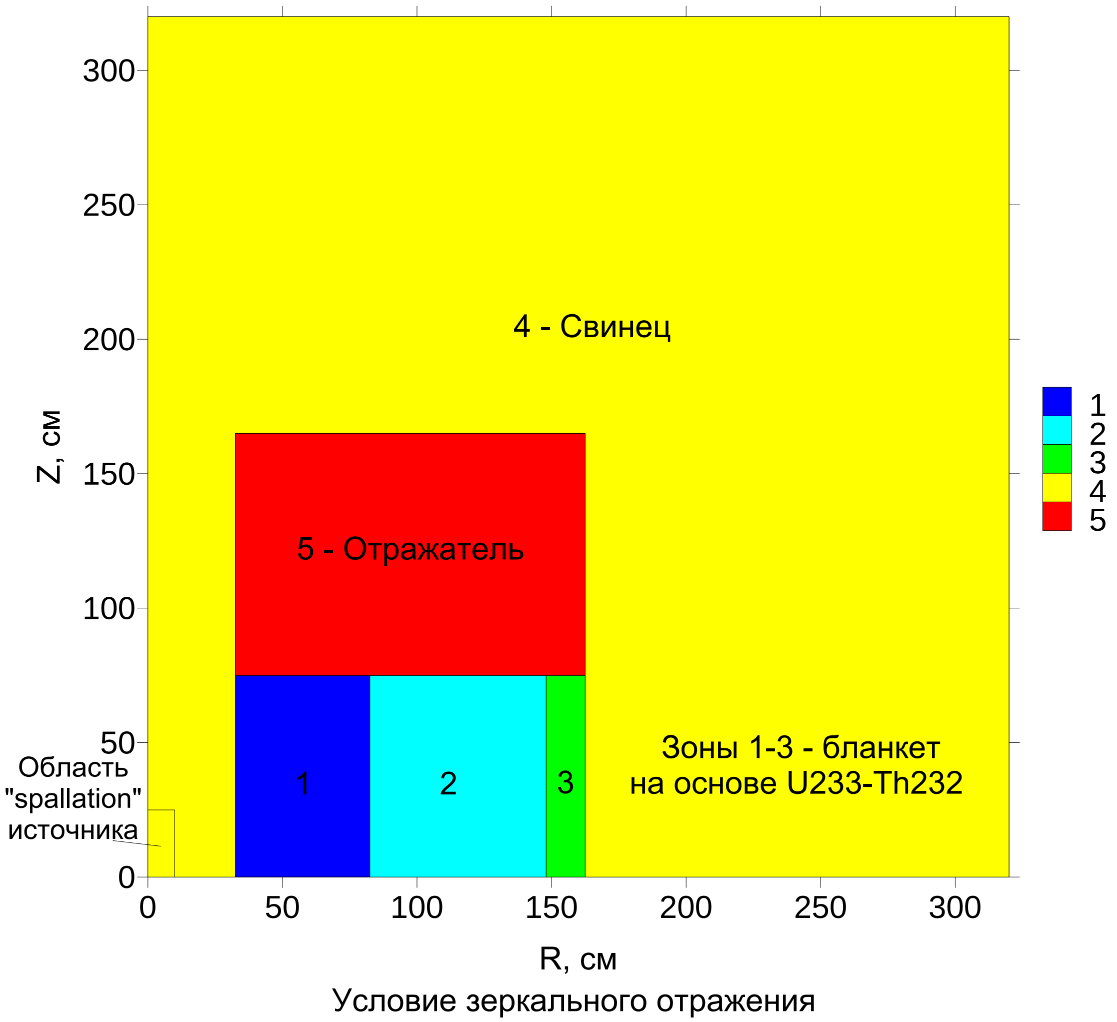


Рис. 14. ADS бенчмарк в r,z геометрии.

Таблица 8. Число внешних итераций при решении подкритического ADS бенчмарка в r,z геометрии по программе КАСКАД-С. Использовались полученная на основе Фурье анализа спектральная функция ε^q, P_5S_6 приближение, длина ADI цикла J=16, по-точечные критерии сходимости внутренних и внешних итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\varepsilon_{fis}^{dens} = 10^{-3}$, соответственно.

k_{eff} задачи	Геометрия	r,z сетка	Число внешних итераций и расчетное время (мин))	
			Без ускорения внешних итераций	KP_1
0.945	r,z	51×46	68 (5 мин 44 сек)	9 (1 мин 29 сек)
0.965	r,z	51×46	93 (7 мин 45 сек)	9 (1 мин 31 сек)
0.985	r,z	51×46	159 (12 мин 3 сек)	14 (2 мин 31 сек)

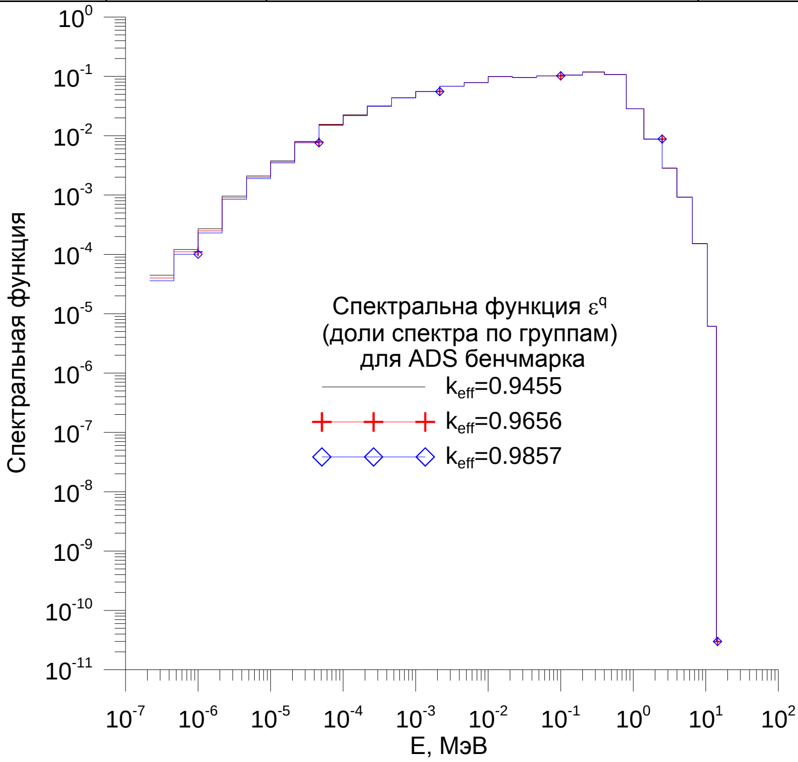


Рис. 15. Зависимость формы спектра ускоряющих поправок KP_1 схемы ускорения внешних итераций по источнику деления от значения k_{eff} задачи при решении ADS бенчмарка.

В **главе 6** рассмотрены разностные аппроксимации и итерационные алгоритмы в задачах переноса заряженного излучения.

Перенос заряженных компонент каскада может быть хорошо описан в рамках уравнения Больцмана-Фоккера-Планка (БФП (или BFP) уравнения) (K. Przybylski, J. Ligou, 1982):

$$-\frac{\partial}{\partial E}[\beta(\vec{r},E)\psi] - T(\vec{r},E)\left\{\frac{\partial}{\partial\mu}\left[(1-\mu^2)\frac{\partial\psi}{\partial\mu}\right] + \frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right\} + (\vec{\Omega}\vec{\nabla})\psi +$$

$$\sigma_t(\vec{r},E)\psi(\vec{r},\mu,\phi,E)=\int_0^\infty dE'\int_0^{2\pi}d\phi'\int_{-1}^{+1}d\mu'\sigma_s(\vec{r},E'\to E,\mu_s)\psi(\vec{r},\mu',\phi',E')+F(\vec{r},\mu,\phi,E)\,. \qquad (56)$$

$$\mu_s=\mu'\mu+\left[\left(1-\mu'^2\right)\left(1-\mu^2\right)\right]^{1/2}Cos(\phi'-\phi),\ \mu=Cos\theta=(\vec{\Omega}\vec{n}_z),\quad \mu'=Cos\theta'=(\vec{\Omega}'\vec{n}_z)\,.$$

Первые два оператора в этом уравнении – это ФП операторы. Оператор, содержащий производную по энергии – это оператор непрерывного замедления (continuous slowing-down (CSD) operator), оператор, содержащий вторые угловые производные – это оператор непрерывного отклонения (continuous-scattering operator). В уравнении (56) $\beta(E)$ - ограниченное сечение непрерывного замедления или ограниченная тормозная способность (restricted stopping power); $T(E)=\alpha(E)/2$, где $\alpha(E)$ - ограниченный момент передачи (restricted momentum transfer))

$$\beta(E)=\int_0^E 2\pi\int_{-1}^{1}\sigma_{\sin g}(E\to E',\mu_s)(E-E')d\mu_s dE'\,,$$

$$\alpha(E)=\int_0^E 2\pi\int_{-1}^{1}\sigma_{\sin g}(E\to E',\mu_s)(1-\mu_s)d\mu_s dE'\,, \qquad (57)$$

где $\sigma_{\sin g}(E\to E',\mu_s)$ - сингулярная компонента рассеяния. В уравнении (56) $\sigma_t(E)$ и $\sigma_s(E'\to E)$ - полное сечение и регулярная часть сечения рассеяния, μ_s - косинус угла рассеяния, F - заданный источник. К уравнению (56) следует также добавить граничные условия.

Для протонов и пионов, обычно, $T=0$ и β определяется неупругими рассеяниями. Для нейтральных частиц $\beta=T=0$.

Отметим также, что БФП уравнение соответствует декомпозиции сечения рассеяния на регулярную и сингулярную компоненты (А. Волощенко, С. Гуков, 1984):

$$\sigma_s(\mu)=\sigma_{reg}(\mu)+\sigma_{\sin g}(\mu),\qquad \sigma_{reg}(\mu)\cong\sum_{l=0}^{L}\frac{(2l+1)}{4\pi}\sigma_{reg,l}P_l(\mu\}\,,$$

$$\sigma_{\sin g}(\mu)\cong\sum_{k=0}^{K}\frac{\gamma_k}{2\pi}\delta^{(k)}(\mu-\mu_0)\,, \qquad (58)$$

где

$$\gamma_k=2\pi\frac{(-1)^k}{k!}\int_{-1}^{1}(\mu-\mu_0)^k\sigma_{\sin g}(\mu)\,. \qquad (59)$$

Здесь K - порядок представления сингулярной компоненты рассеяния (для случая БФП уравнения $K=1$), μ_0 - косинус угла расположения сингулярности ($\mu_0=1$).

Аппроксимация 2-ого порядка точности для БФП уравнения строится стандартным образом. Основная проблема возникает здесь при ускорении внутренних итераций. С повышением порядка P_L приближения (порядка квадратуры при использовании ФП матрицы рассеяния) KP_1 схема ускорения в 1D геометриях деградирует:

В 2D и 3D геометриях согласованная KP_1 схема становится неустойчивой при $\sigma_{s,1} > 0.5\sigma_{s,0}$ и нуждается в регуляризации.

Тем не менее, с ее использованием удается решить ряд практических задач переноса электронно-фотонного каскада.

Организация внешних итерационных циклов при расчете электронно-фотонного и адронного каскадов

При наличии в файле констант сечений переходов $\sigma_s^{p\to q}$ с $p > q$ (такая ситуация реализуется, в частности, при расчете электрон-фотонного и адронного каскадов), возникает необходимость в организации внешнего итерационного цикла по анизотропным переходам вверх по группам.

При использовании одинаковой энергетической сетки для всех частиц в области каскада имеется возможность (А. Волощенко) существенно уменьшить расчетное время, если в объединенном файле сечений перейти от упорядоченности групп по типам частиц (излучения), к их упорядочению «по энергии» участвующих в каскаде частиц.

Так при расчете электронно-фотонного каскада при переходе от стандартной, “по типам частиц”, последовательности групп в объединенном файле сечений:

$$1e,\ 2e, \ldots, Qe, 1\gamma,\ 2\gamma, \ldots, Q\gamma, \tag{60}$$

где Q - число групп электронов (фотонов), к их упорядочиванию “по энергии частиц”:

$$1e,\ 1\gamma,\ 2e,\ 2\gamma, \ldots, Qe,\ Q\gamma, \tag{61}$$

приводит к тому, что многогрупповая матрица переходов приобретает нижнюю блочно-треугольную (lower block triangular (LBT)) форму, которая позволяет существенно снизить вычислительные затраты:

$$\begin{matrix}
1e\to 1e & 1\gamma\to 1e & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\
1e\to 1\gamma & 1\gamma\to 1\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\
1e\to 2e & 1\gamma\to 2e & 2e\to 2e & 2\gamma\to 2e & 0 & 0 & \ldots \\
1e\to 2\gamma & 1\gamma\to 2\gamma & 2e\to 2\gamma & 2\gamma\to 2\gamma & 0 & 0 & \ldots \\
1e\to 3e & 1\gamma\to 3e & 2e\to 3e & 2\gamma\to 3e & 3e\to 3e & 3\gamma\to 3e & \ldots \\
1e\to 3\gamma & 1\gamma\to 3\gamma & 2e\to 3\gamma & 2\gamma\to 3\gamma & 3e\to 3\gamma & 3\gamma\to 3\gamma & \ldots \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots
\end{matrix} \tag{62}$$

Численные примеры расчета переноса электронно-фотонного каскада

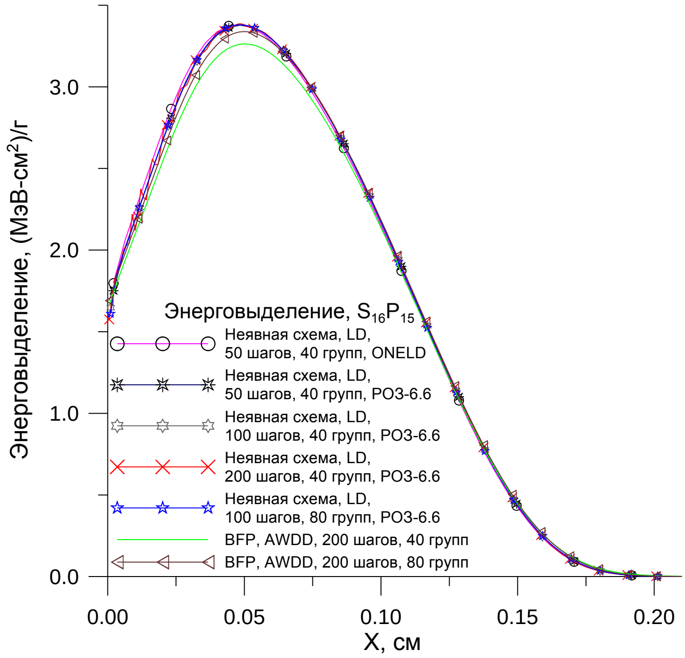


Рис. 17. Профиль энерговыделения в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в CSD приближении с использованием неявной аппроксимации члена непрерывного замедления и LD схемы по пространственной переменной по программам ONELD и РОЗ-6.6, а также с использованием BFP приближения и AWDD схемы по программе РОЗ-6.6.

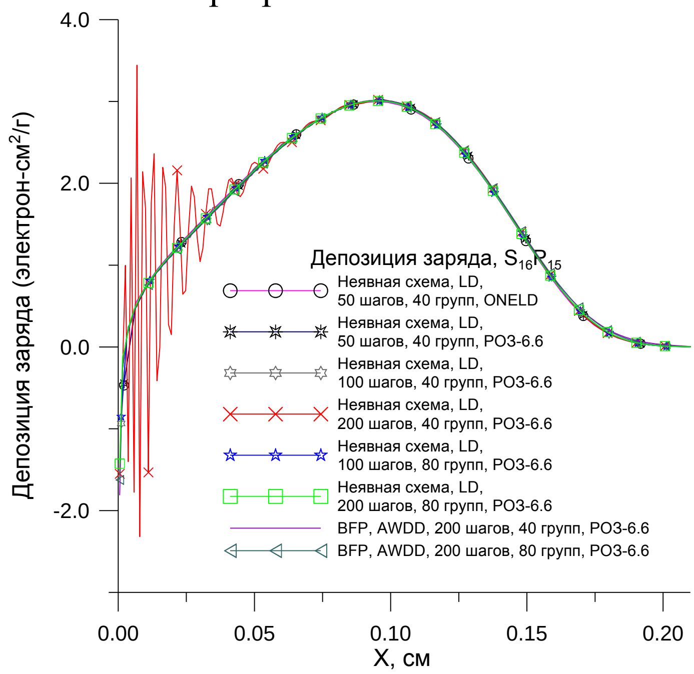


Рис. 18. Профиль депозиции заряда в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в CSD приближении с использованием неявной аппроксимации члена непрерывного замедления и LD схемы по пространственной переменной по программам ONELD и РОЗ-6.6, а также с использованием BFP приближения и AWDD схемы по программе РОЗ-6.6.

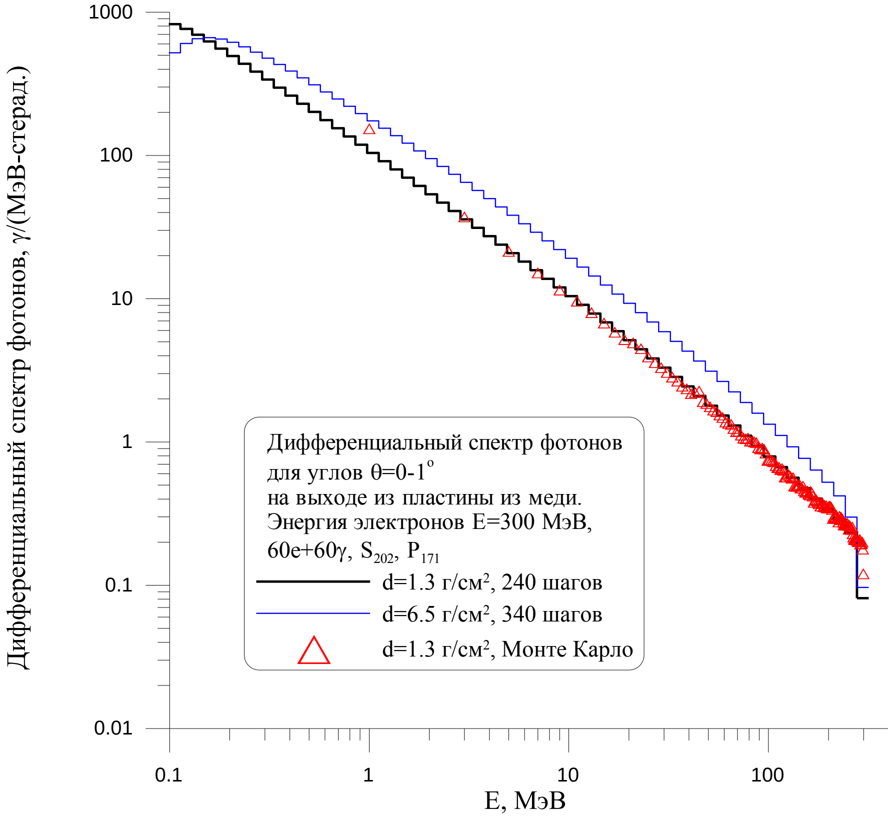


Рис. 19. Дифференциальный спектр тормозного излучения, вылетающего в интервал углов $0-1°$ из пластин из Cu, толщиной $d=1.3 г/см^2$ и $d=6.5 г/см^2$, облучаемых падающим перпендикулярно пучком электронов с энергией 300 МэВ.

Численные примеры расчета переноса адронного каскада

Таблица 10. Выход нейтронов из вольфрамовой мишени диаметром 10.2 см и длиной 40 см, и свинцовой мишени диаметром 10.2 см и длиной 61 см, облучаемую пучком протонов в сопоставлении с результатами экспериментов BNL.

Энергия пучка протонов, МэВ	Мишень из W, $d=10.2$ см, $l=40$ см			Мишень из Pb, $d=10.2$ см, $l=61$ см		
	Эксперимент BNL	КАСКАД-С/ БНАБ-93/САДКО-2.4	LAHET (preequi-librium model)	BNL experimental data (1998)	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	LAHET (preequilibrium model)
800	15.11	15.84	17.47	13.60	13.94	14.96
1000	20.40	21.31	23.22	17.38	18.31	19.82
1200	-	26.74	28.81	22.31	22.17	24.25
1400	28.46	33.70	33.67	26.21	27.14	28.26

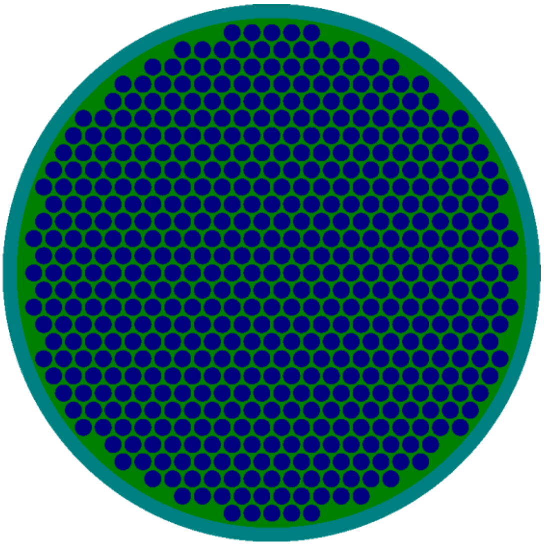


Рис. 20. Поперечное сесение мишени, составленной из стержней из вольфрама диаметром 0.6 см и длиной 40 см. Стержни помещены в узлах гексагональной решетки с шагом 0.7 cm, помещенной в жидкосолевой раствор FLiNaK (46.5 % LiF – 11.5 % NaF – 42 % KF). Оболочка мишени сделана из сплава хастеллой с внешним диаметром 9.5 см и толщиной 0.5 см. Задание геометрии осуществлено посредством геометрического модуля программы MCU.

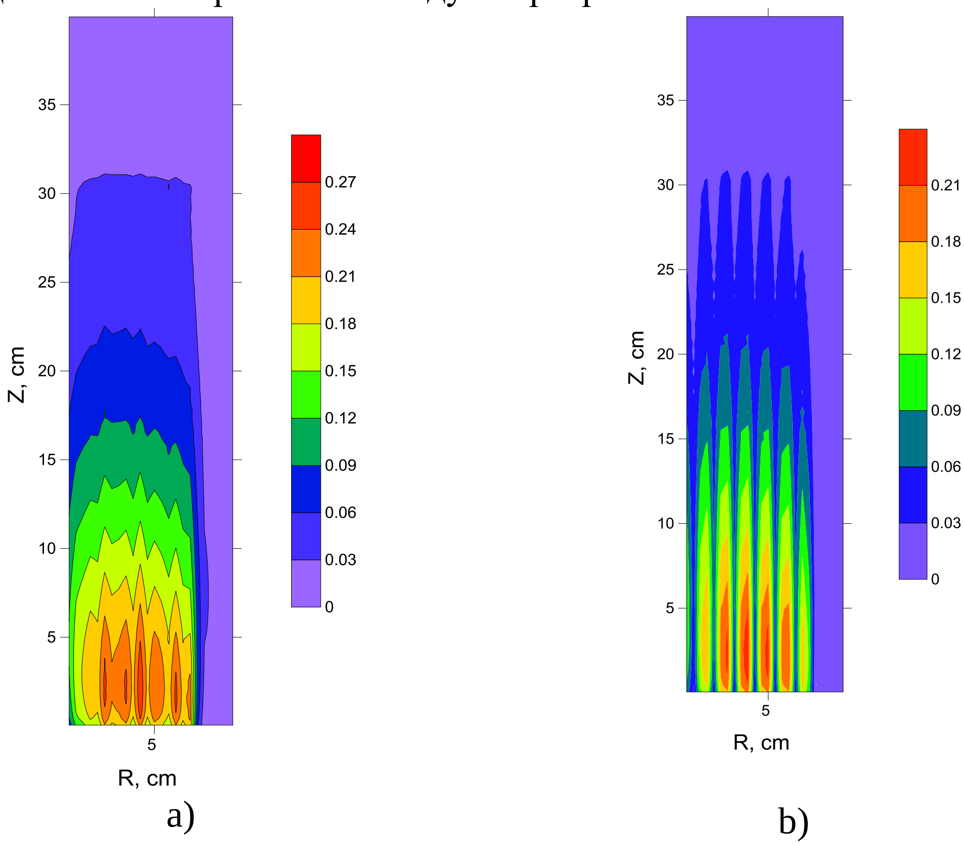
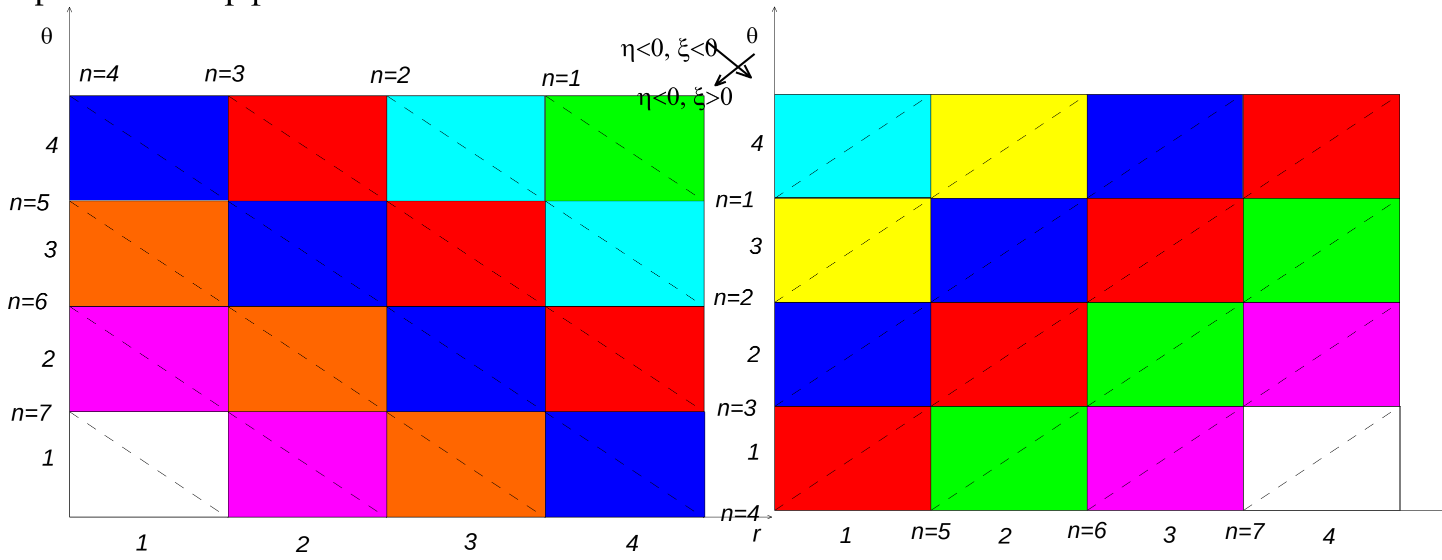


Рис. 21. Пространственное распределение энерговыделения в мишени из вольфрама: в аксиальных сечениях: (a) при $\vartheta = 0.25°$ и (b) $\vartheta = 29.75°$, МэВ/(см^3-сек).

В **главе 7** рассмотрены используемые алгоритмы распараллеливания вычислений для уравнения переноса в 2D и 3D геометриях.

Для распараллеливания вычислений в 2D и 3D S_n программах КАСКАД-С и КАТРИН используется KBA (K. Koch, R. Baker, R. Alcouff) алгоритм и OpenMP интерфейс.



а) б)

Рис. 24. а) Последовательность расчета подобластей для III и VII октантов ($\eta < 0$, $\xi < 0$; б) для IV и VIII октантов ($\eta < 0$, $\xi > 0$ при 2D декомпозиции поперечного сечения расчетной области;

Для определения оптимального разбиения на подобласти по умолчанию используются следующие эмпирические формулы:

$$I_{sub} = \max\left(\min\left(I, N_{thr}\right), I/4\right), \qquad J_{sub} = \max\left(\min\left(J, N_{thr}\right), J/4\right), \qquad (63)$$

где N_{thr} - число используемых трэдов, I и J - число подобластей по переменным r и ϑ, соответственно. Использование более мелких подобластей приводит к возрастанию накладных расходов.

Таблица 12. Время расчета 1-ой группы РУ ВВЭР-1200 для сектора поворотной симметрии $60°$, покассетного источника, пространственной r, ϑ, z сетки из $218 \times 120 \times 175 = 4\ 578\ 000$ ячеек в P_3S_8 приближении с точностью сходимости внутренних итераций 10^{-3}, мин.

Процессор	Количество ядер	Скалярная версия программы КАТРИН	Параллельная версия программы КАТРИН
Intel Core 2 Duo E6600	2	59.1	35.6
Intel Core i7 920	4 +4 виртуальных	41.1	12.7

Intel Core i7 970	6 +6 виртуальных	34.6	9.5
Intel Haswell Core i7 4770K	4 +4 виртуальных		7.3
Intel Sandy Bridge-E Core i7 3930K	6 +6 виртуальных		7.2
Intel Ivy Bridge-E Core i7 4930K	6 +6 виртуальных		6.83
Intel Ivy Bridge-E Core i7 4960X	6 +6 виртуальных		6.08

Таблица 13. Астрономическое время расчета радиационной защиты РУ ВВЭР-1200 для сектора поворотной симметрии $60°$ с источником, заданным потвэльно, в r, ϑ, z геометрии с пространственной сеткой из 218×120×175 = 4 578 000 ячеек, с 47 нейтронными и 20 фотонными группами константной системы BGL1000_B7 в P_3 приближении, при использовании по-точечного критерия сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций 10^{-3} и 5×10^{-3}, соответственно. Для области энергий E>3.0 МэВ использовалась квадратура ES_{16}, а для области энергий E<3.0 МэВ – квадратура ES_8.

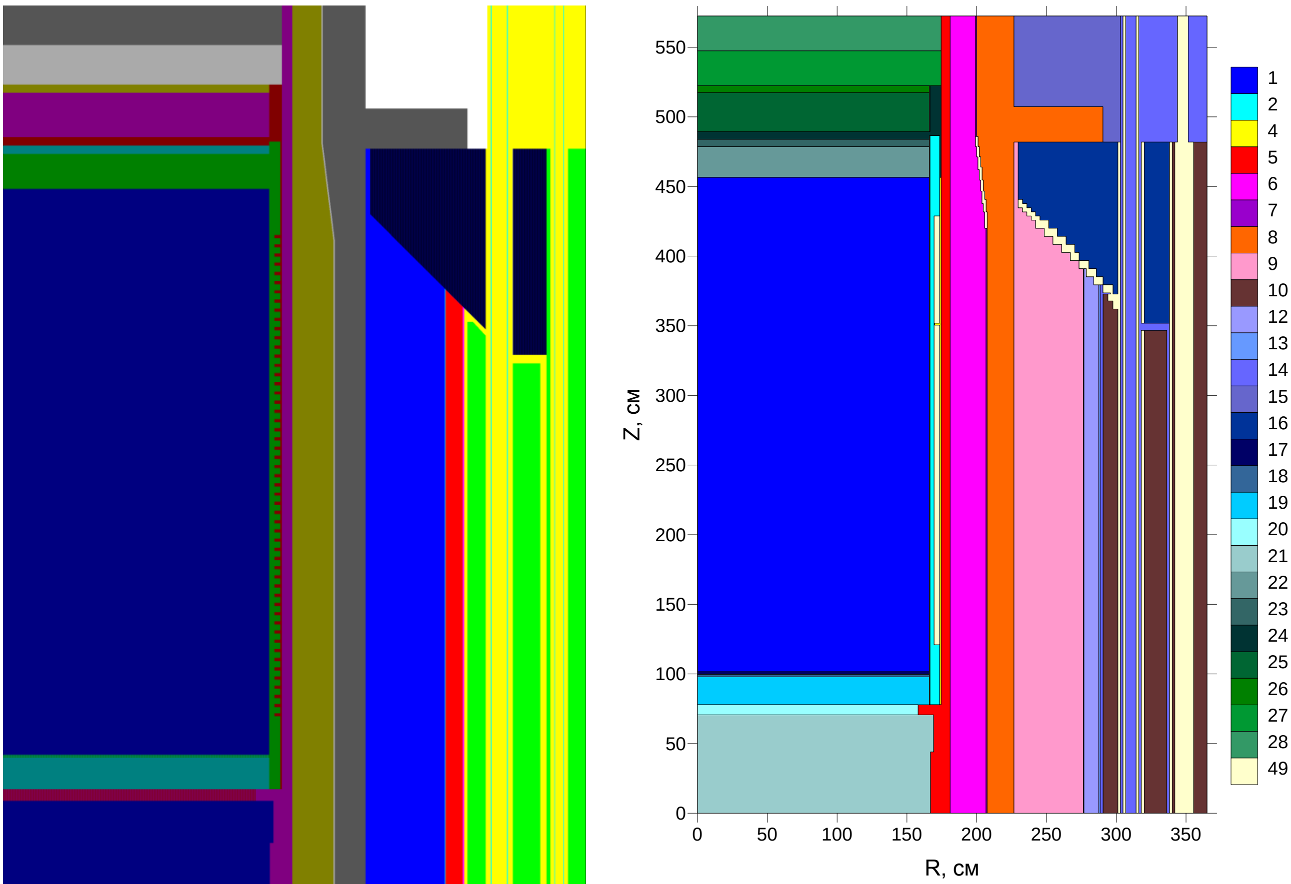
Процессор, оперативная и внешняя память	Количество ядер	Параллельная версия программы КАТРИН
Intel Core i7 970, 24 Gb RAM, RAID 0 массив из 3-х OCZ “Apex Series” 60 Gb SSD SATA-2	6+6 виртуальных	17 часов 08 мин
Intel Core i7 3930K, 64 Gb RAM, Intel SSD DC S3700, 200 Gb, SATA-3	6+6 виртуальных	12 часов 38 мин

В **главе 8** рассмотрены используемые алгоритмы аппроксимации геометрии и источника на разностной сетке задачи.

Задание 3D геометрии ЯЭУ и источника деления для их использования в расчете радиационных полей S_n методом представляет собой информационно-вычислительную задачу, решение которой возможно лишь при наличии специально разработанных средств.

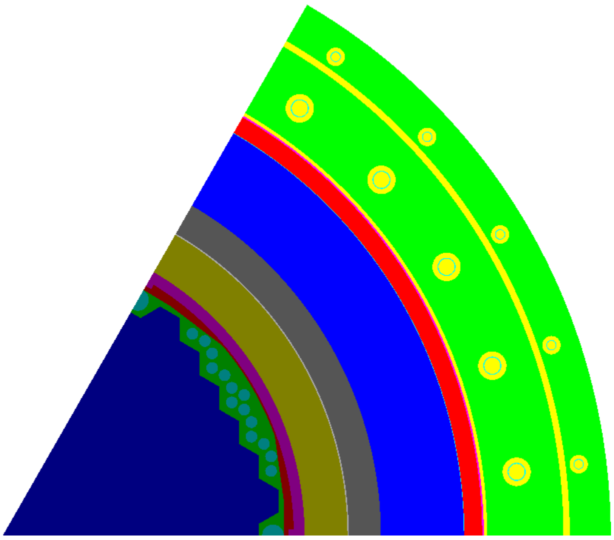
Для задания модели геометрии активной зоны, радиационной защиты и источника деления ВВЭР-1000 нами был выбран следующий набор таких средств:
(1) геометрический модуль программы MCU задания 3D геометрии и источника средствами комбинаторной геометрии;
(2) визуализатор MCU Viewer комбинаторной геометрии, содержащий средства диагностики правильности задания геометрии;
(3) утилита BurnDat для подготовки комбинаторного представления (потвэльного и (или) покассетного) плотности нейтронов деления на основе данных о выгорании (плотности распределения осколков деления), содержащихся в выходных файлах программ ПЕРМАК-А и БИПР-7А, выполняющих, соответственно, потвэльный и покассетный расчет кампании реакторных установок (РУ) с ВВЭР;
(4) разработанные на базе геометрического модуля программы MCU конвертеры геометрии и источника ConDat и ConSource, поддерживающие локальный

баланс масс материалов и источника в каждой пространственной ячейке в рамках volume fraction (VF) метода.

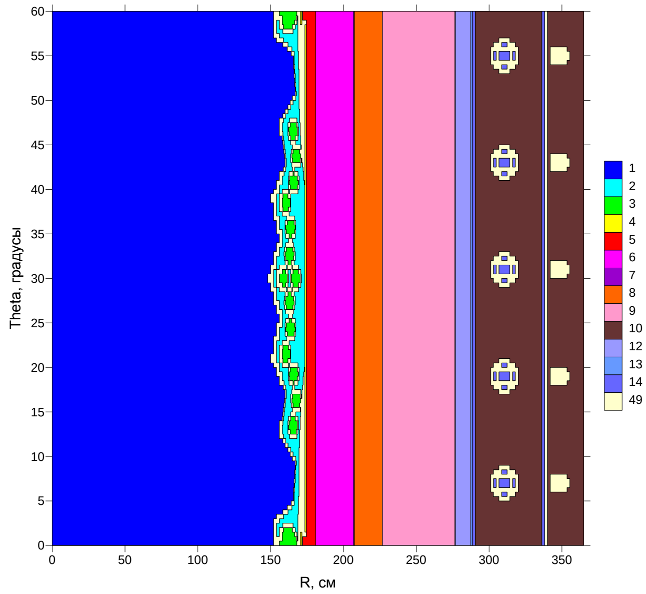


а) б)

Рис. 25 - Аксиальное сечение 3D r, ϑ, z модели радиационной защиты РУ В-320 для угла $\vartheta = 7°$: а) комбинаторное представление геометрии задачи (для визуализации геометрии использована программа MCU Viewer); б) представление геометрии на r, z сетке (190×192) задачи (для визуализации геометрии использован скрипт Maplook и программа SURFER, дополнительные смеси обозначены как 49-ый материал)

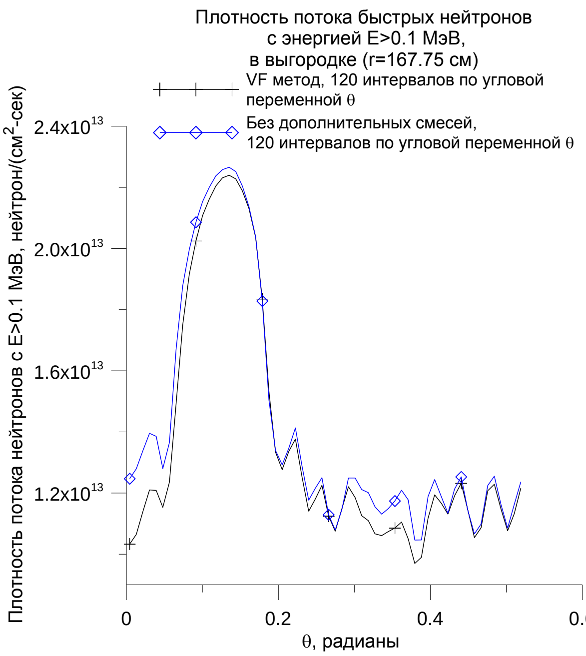


а)

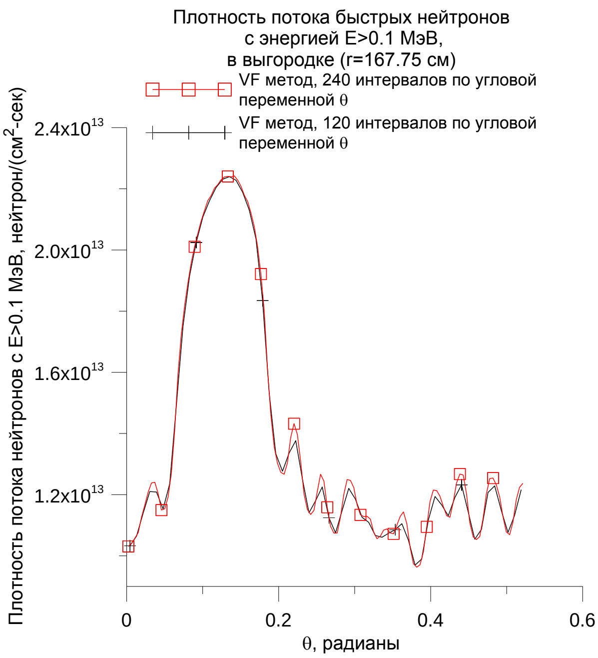


б)

Рис. 26. - а) Поперечное сечение РУ В-320 при z=22.6 см от низа АЗ (желоб насечки); б) то же на r,ϑ сетке (120×190) задачи. Для визуализации геометрии использован скрипт Maplook и программа SURFER. Дополнительные смеси обозначены как 49-ый материал



а)



б)

В **Приложении** приведены титульные страницы Аттестационных паспортов для программы КАТРИН:

1. Аттестационный паспорт №356 программного средства «Программа КАТРИН-2.5 вместе с пре- и пост процессорами и библиотеками констант BGL440 и V7-200N47G», заявитель ПС: ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС»; область

применения ПС по типу объекта использования атомной энергии: реакторы ВВЭР-440, Ростехнадзор, 2014.

2. Аттестационный паспорт №357 программного средства «Программа КАТРИН-2.5 вместе с пре- и пост процессорами и библиотеками констант BGL1000, BGL1000_B7 и V7-200N47G», заявитель ПС: ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС»; область применения ПС по типу объекта использования атомной энергии: реакторы ВВЭР-1000, ВВЭР-1200 и ВВЭР-ТОИ, Ростехнадзор, 2014.

Публикации в журналах из списка ВАК и иностранных журналах

1. А. М. Волощенко, А. А. Дубинин, "РОЗ-6.3 - программа для решения уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов в одномерных геометриях методом дискретных ординат," *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. яд. реакт.*, 1984, вып. 6(43), с. 30.
2. Т. А. Гермогенова, А. М. Волощенко, "К развитию метода дискретных ординат," *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. ядерных реакторов*, №5, 57 (1985).
3. Волощенко А. М. Численное решение нестационарного уравнения переноса с импульсными источниками // *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. яд. реакт.*, 1986, вып. 4, стр. 17-21.
4. А. М. Волощенко, А. В. Швецов, "Опыт использования нодальных схем для решения стационарного уравнения переноса нейтронов и фотонов в двумерных защитных композициях," *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. ядерных реакторов*, №1, 31 (1992).
5. Yu. I. Balashov, V. V. Bolyatko and A. M. Voloschenko, "Sensitivity and Uncertainty Analysis on the Base of One and Two-Dimensional Transport Calculations," *Transp. Theory and Stat. Physics*., **22**, No. 2&3, 331-345 (1993).
6. Averin A. V., Voloschenko A. M. Consistent P1 synthetic acceleration method for outer iterations // Transp. Theory and Stat. Phys., 1994, vol. 23, №5, pp. 701-730.
7. A. M. Voloschenko, T. A. Germogenova, "Numerical Solution of the Time-Dependent Transport Equation with Pulsed Sources," *Transp. Theory and Stat. Phys*., **23**, No. 6, 845, 1994.
8. T. A. Germogenova, A. V. Shwetsov and A. M. Voloschenko, "The Adaptive Positive Nodal Method for the Transport Equation", *Transp. Theory and Stat. Physics*., **23**, No. 7, 923 (1994).
9. А. М. Волощенко, " КР1 схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в двумерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой," *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, **41**, №9, 1379, 2001.
10. V. A. Pechenkin, Yu. V. Konobeev, I. V. Pyshin, E. E. Petrov, V. A. Khoromskij, V. P. Kryuchkov, A. M. Voloshchenko, V. I. Tsofin, K. G. Rozanov, **"**Method for calculating the characteristics of the damaging dose for VVÉR vessel steel," *Atomic Energy*, **100**, №5, 332-339 (2006).
11. А. М. Волощенко, А. А. Руссков, М. И. Гуревич, Д. С. Олейник, "Расчет нейтронных полей в активной зоне реактора с помощью аппроксимаций,

поддерживающих балансы масс в разностной ячейке сетки,” Атомная энергия, т. 104, вып. 5, стр. 264-269, 2008.

12. А. М. Волощенко, А. А. Руссков, М. И. Гуревич, Д. С. Олейник, Д. А. Шкаровский, В. И. Цофин, А. Д. Джаландинов, “Расчет радиационных полей в защите ВВЭР с помощью аппроксимаций, поддерживающих локальный баланс массы материалов и нейтронов источника деления,” Атомная энергия, т. 104, вып. 6, стр. 328-333, 2008.
13. Волощенко А.М. “KP1 схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в трехмерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой”. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., **49**, №2, 1-30, 2009.
14. М. И. Гуревич, С. М. Зарицкий, В. В. Синица, В. И. Цофин, А. Д. Джаландинов, А. М. Волощенко, А. А. Руссков, Г. Н. Мантуров, "Русский инженер", специальный выпуск, «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР», стр. 20-28, 2009.
15. А. А. Руссков, А. М. Волощенко, М. И. Гуревич, «Уменьшение дисперсии в расчетах радиационной защиты ВВЭР посредством гибридного метода CADIS», Атомная энергия, т. 110, №1, стр. 6-12, 2011 г.
16. V. A. Nevinitsa, A. A. Dudnikov, A. A. Frolov, A. S. Lubina, A. A. Sedov, V. Yu. Blandinskii, A. L. Balanin, I. A. Belov, P. A. Fomichenko, A. S. Subbotin, S. A. Subbotin, P. N. Alekseev, A. M. Voloshchenko, Yu. E. Titarenko, V. F. Batyaev, V. I. Rogov, K. V. Pavlov, A. Yu. Titarenko, T. V. Kulevoy, K. A. Gerasimov, A. N. Didenko, S. M. Polozov, “Analysis of the Possibilities of Developing a Molten-Salt Blanket for a Subcritical Demonstration Reactor,” Atomic Energy, vol. 117, Issue 1, pp. 14-18, 2014.
17. Yu. E. Titarenko, V. F. Batyaev, K. V. Pavlov, A. Yu. Titarenko, V. I. Rogov, V. M. Zhivun, T. V. Kulevoy, N. M. Sobolevsky, A. M. Voloshchenko, A. N. Didenko, S. M. Polozov, A. B. Koldobsky, P. N. Alekseev, P. A. Fomichenko, A. A. Dudnikov, V. A. Nevinitsa, A. A. Sedov, A. A. Frolov, A. S. Lubina, A. L. Balanin, S. A. Subbotin, A. S. Subbotin, A. Yu. Stankovskiy, G. Van den Eynde, S. G. Mashnik, “Analysis of the Parameters of the Target Unit of a Molten-Salt Subcritical Electronuclear Facility,” Atomic Energy, vol. 117, Issue 1, pp. 19-28, 2014.

Подписано в печать 24.02.2015. Формат 60x84/16. Усл. печ. л. 1,1. Тираж 80 экз. Заказ А-2.
ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4