МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 год, том 28, номер 3, стр. 51-63

БИКОМПАКТНАЯ СХЕМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА МЕТОДОМ КВАЗИДИФФУЗИИ

© *2016 г.* ***Е.Н. Аристова[1,2], М.И. Стойнов[1]***

[1] Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН
[2] Московский физико–технический институт (Государственный университет)
aristovaen@mail.ru, misuka@mail.ru

Построены разностные схемы высокой (до четвертого порядка) точности для численного решения уравнения переноса нейтронов и системы уравнений квазидиффузии (следствий уравнения переноса более низкой размерности), используемой для ускорения итераций по рассеянию. Эти разностные схемы построены на одних и тех же принципах компактной (в рамках одной ячейки) аппроксимации, что позволяет аккуратно учитывать контактные разрывы в среде. Четвертый порядок аппроксимации на минимальном двухточечном шаблоне достигается расширением списка искомых величин и включением в него помимо узловых значений искомой функции дополнительных величин, в качестве которых может выступать либо интегральное среднее по ячейке, либо значение в полуцелом узле. Для связи этих величин используются квадратурные формулы Симпсона. Уравнения для дополнительных величин строятся с помощью формул Эйлера–Маклорена. Проведены расчеты ряда тестовых одномерных задач, показана хорошая фактическая точность построенных разностных схем. Схемы естественным образом обобщаются на двумерный и трехмерный случай; высокая точность, монотонность, экономичность, компактность предлагаемых схем делают их весьма привлекательными для проведения инженерных расчетов (расчеты атомных реакторов и др.).

Ключевые слова: уравнение переноса, бикомпактные разностные схемы, уравнения квазидиффузии.

BICOMPACT SCHEMES OF SOLVING AN STATIONARY TRANSPORT EQUATION BY QUASI–DIFFUSION METHOD

E.N. Aristova[1,2], M.I. Stoynov[1]

[1]Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow
[2]Moscow Institute of Physics and Technology, State University

High order approximation schemes (up to fourth order) for numerical calculation of neutron transport equation coupled with a quasi–diffusion system of equations (so called a low order system of transport equations), which is used for acceleration of iterations on scattering term, are constructed. These schemes are developed on the basis of the uniform principles of compact approximation (in the frame of single cell of a space mesh). That makes it possible to take into account contact discontinuities correctly. The fourth order approximation on minimal two point stencil is achieved by widening unknowns list. As additional unknowns are considered either the integral averaged values over the cell or a semi integer values. These values are connected by the

Simpson integration formula. An equation for determination of additional unknowns in a cell is constructed by implementation of Euler–Maclaurin formula. The calculation of a set of test problem has been carried out. The very good practical accuracy of suggested schemes has been revealed. These schemes might be extended naturally on 2D and 3D geometries. The high accuracy, monotonicity, high efficiency, compact stencil of the schemes make theme very attractive for engineering calculations such as numerical simulation of nuclear reactors and others.

Key words: linear transport equation, bicompact difference schemes, quasi–diffusion equations.

1. Введение

Линейное интегро–дифференциальное уравнение переноса является основным уравнением для описания переноса излучения или незаряженных частиц. Левая часть уравнения соответствует производной по направлению полета частиц и поглощению, правая – содержит интеграл рассеяния. В силу структуры уравнения возникают две задачи: хорошей аппроксимации дифференциального оператора в левой части уравнения, с одной стороны, и реализации какого–либо метода ускорения сходимости итерационного процесса по интегралу рассеяния, с другой.

В последнее время был предложен новый класс бикомпактных схем для решения уравнения переноса или гиперболических систем уравнений [1–9]. Он основан на повышении порядка аппроксимации до четвертого по пространственным переменным путем расширения списка переменных посредством введения помимо искомых узловых значений функции еще и интегральных средних, для нахождения которых строится также дополнительное разностное уравнение. Расширение списка переменных позволяет сохранить компактную аппроксимацию в рамках одной ячейки, что исключительно удобно и физически оправданно при наличии контактных разрывов в среде. Для решения расширенной системы уравнений может быть использован метод бегущего счета.

Классический метод итераций источника, в котором интеграл рассеяния вычисляется по функции распределения предыдущего приближения, сходится крайне медленно. Одним из признанных методов ускорения сходимости итераций по интегралу рассеяния является метод квазидиффузии [10–12]. Суть метода квазидиффузии заключается в том, что помимо уравнения переноса решается система уравнений меньшей размерности. Эти уравнения получаются из уравнения переноса интегрированием по углам полета частицы с различными весовыми коэффициентами. В результате получается система уравнений баланса частиц и уравнения для векторного потока. Замыкание полученной системы уравнений происходит посредством введения дробно–линейных функционалов от функции распределения, которые довольно слабо зависят от решения. В качестве таких функционалов выступают коэффициенты квазидиффузии и коэффициенты граничных условий. Оказывается, что интеграл рассеяния можно преобразовать к виду, в котором главная часть интеграла рассеяния вычисляется по решению уравнений меньшей размерности [10–13]. Взаимосвязь уравнения переноса и уравнений меньшей размерности приводит к итерационному методу по интегралу рассеяния, скорость сходимости которого выше линейной [12]. Такой метод ускорения итераций позволяет с вычислительной точки зрения выигрывать дважды: за счет сокращения числа итераций и за счет решения уравнений меньшей размерности как основной вычислительной процедуры. Заметим, что вывод уравнений квазидиффузии из уравнений переноса примерно соответствует

выводу уравнений газовой динамики из уравнения Больцмана, однако при совершенно другой процедуре замыкания. В данной работе предлагается бикомпактная аппроксимация как уравнения переноса, так и уравнений квазидиффузии, построенная на одних и тех же принципах; фактически для уравнений квазидиффузии строятся кинетически–согласованные разностные схемы [14–17].

В разделе 2 на примере простейшего модельного уравнения построены бикомпактные схемы четвертого порядка точности для типичного при расчетах атомных реакторов случая кусочно–гладких коэффициентов уравнений. В известных нам работах разработаны разностные схемы лишь для случая кусочно–постоянной аппроксимации коэффициентов поглощения и рассеяния. Проведено сравнение точности построенных схем. Эти схемы применяются в разделах 3 и 4 для аппроксимации стационарного уравнения переноса и уравнений квазидиффузии. На известной модельной задаче показана хорошая фактическая точность построенной схемы и эффективность итерационной процедуры.

2. Бикомпактная схема для модельного уравнения с разрывными коэффициентами

Рассмотрим модельное уравнение

$$\frac{du}{dx} + \sigma(x)u = Q(x) \tag{1}$$

с граничным условием $u(0) = u_a$, где $\sigma(x) > 0$ и $Q(x)$ – заданные функции. Приближенное решение $\{u_i\}_{i=0}^{I+1}$ уравнения (1) ищется на сетке $G_I = \{x_i\}_{i=0}^{I+1} = \{0 = x_0 < x_1 < ... < x_{I+1} = X\}$.

Интегрируя (1) по i-й ячейке $[x_i, x_{i+1}]$ получаем точно:

$$u_{i+1} - u_i + \overline{(\sigma u)}_i = \overline{Q}_i, \qquad i = \overline{0, I}, \tag{2}$$

где $\overline{(\cdot)}_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\cdot) dx$. В (2) в дополнение к u_i появляются новые неизвестные $\overline{(\sigma u)}_i$. Для построения компактной разностной схемы, аппроксимирующей (1), необходимо выразить $\overline{(\sigma u)}_i$ через значения u_{i+1} и u_i. В [1] предложено использовать для этого квадратурную формулу Эйлера–Маклорена, записанную для решений уравнения (1) (производные от подынтегральной функции вычисляются с помощью (1)):

$$\begin{aligned} \overline{u}_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x)dx = 0.5h_i(u_{i+1} + u_i) - h_i^2 / 12(u_{x,i+1} - u_{x,i}) = \\ &= 0.5h_i(u_{i+1} + u_i) - h_i^2 / 12(\Phi_{i+1} - \Phi_i), \qquad i = \overline{0, I}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $h_i = x_{i+1} - x_i$, $\Phi_i = Q_i - \sigma_i u_i$. Связь $\overline{(\sigma u)}_i$ с $\overline{u}_i$ определим следующим образом:

$$\overline{(\sigma u)}_i = 0.5(\sigma_{i+1} + \sigma_i)\overline{u}_i, \qquad i = \overline{0, I}. \tag{4}$$

Равенства (4) аппроксимируют $\overline{(\sigma u)}$ с точностью $O(h^2)$, возможна также аппроксимация второго порядка точности $\overline{(\sigma u)}_i = \sigma_{i+0.5}\overline{u}_i$, традиционно используемая при кусочно–постоянной аппроксимации коэффициентов поглощения и рассеяния для задач переноса нейтронов. Квадратурные формулы Эйлера–Маклорена (3) требуют вычисления σ в це-

лых узлах сетки, поэтому аппроксимация (4) предпочтительнее. Возможна также аппроксимация $\overline{(\sigma u)}$ четвертого порядка. Эта аппроксимация выводится с помощью квадратурных формул Симпсона и требует вычисления σ в целых и полуцелых узлах сетки (см. ниже).

Граничное условие записывается в виде

$$u_0 = u_a. \tag{5}$$

Число уравнений в (2)–(5) $N = 3I + 4$ совпадает с числом неизвестных. Система (2)–(5) определяет разностную схему (назовем ее схемой "А"), совпадающую при $\sigma = \text{const}$ с бикомпактной схемой [1] в стационарном случае. Решения системы разностных уравнений (2)–(5) легко выписать в явном виде. Исключая из этой системы неизвестные $\overline{u}_i$, $\overline{(\sigma u)}_i$, получаем

$$u_{i+1} = A_i u_i + F_i, \quad i = \overline{0, I}, \tag{6}$$

где

$$A_i = (1 - 0.5 a_i h_i + a_i \sigma_i h_i^2 / 12) / \alpha_i, \qquad F_i = (\overline{Q}_i + a_i h_i^2 / 12 (Q_{i+1} - Q_i)) / \alpha_i,$$

$$\alpha_i = (1 + 0.5 a_i h_i + a_i \sigma_{i+1} h_i^2 / 12), \qquad a_i = 0.5(\sigma_{i+1} + \sigma_i).$$

При $\sigma = \text{const}$ уравнения (2) и (4), (5) выполняются точно на решениях (1), поэтому точность схемы "А" определяется точностью квадратурных формул (3). При достаточно гладкой функции $Q(x)$ (при условии существования $Q^{(4)}(x)$ на $[0, X]$) схема "А" является схемой четвертого порядка. Несложная модификация схемы "А" позволяет построить бикомпактные схемы четвертого порядка для важного случая кусочно–гладких $Q(x)$ и $\sigma(x)$ (этот случай является типичным в расчетах атомных реакторов).

Рассмотрим две тестовые задачи:

Задача 1

$$X = 2; \quad u_a = 1, \quad Q = 100, \quad \sigma = 1, \quad x \in [0,1), \quad Q = 1, \quad \sigma = 100, \quad x \in (1,2].$$

Задача 2

$$X = 1; \quad u_a = 1; \quad \sigma(x) = 10x + 1; \quad Q(x) = 0.$$

Результаты решения задачи 1 представлены на рис.1 и в табл.1. Расчеты проводятся с помощью схемы "А". Шаг h выбирается так, чтобы один из узлов сетки i_d попал в точку разрыва ($x_d = 1$) функции $\sigma(x)$. В ячейках, примыкающих слева и справа к точке разрыва, в уравнениях (2)–(4) ($i = i_d - 1$ и $i = i_d$) используются различные значения функций $\sigma(x)$ и $Q(x)$. Например, для $\sigma(x)$:

$$\sigma_{i+1} = \lim_{x \to 1-0} \sigma(x), \quad i = i_d - 1; \qquad \sigma_i = \lim_{x \to 1+0} \sigma(x), \quad i = i_d. \tag{7}$$

В этом случае для любого i уравнения (2) и (4), (5) выполняются точно на решениях (1), и схема "А" так же, как в случае $\sigma = \text{const}$ имеет четвертый порядок точности. При неудачном выборе сетки, когда узлы не попадают в точки разрыва и (или) невыполнении условий (7) точность схемы "А" существенно понижается.

На грубой сетке ($I = 4$) качественное поведение приближенного решения правильно описывает точное решение (см. рис.1). При всех I приближенное решение монотонно до и после точки разрыва σ и Q. При $I = 7$ порядок точности схемы достигает своего теоретического предела (см. табл.1).

Рассмотрим случай $Q(x)$ и $\sigma(x) \neq \text{const}$ (задача 2). В этом случае уравнения (4) аппроксимируют $\overline{(\sigma u)}_i$ с точностью $O(h^2)$ и схема "А" имеет второй порядок точности. Результаты расчетов по схеме "А" представлены на рис.2 и в табл.1. При всех I приближенное решение монотонно. Скорость сходимости приближенного решения близка ко второй. На грубой сетке ($I \le 5$) при x, близких к 1, приближенное решение отрицательно.

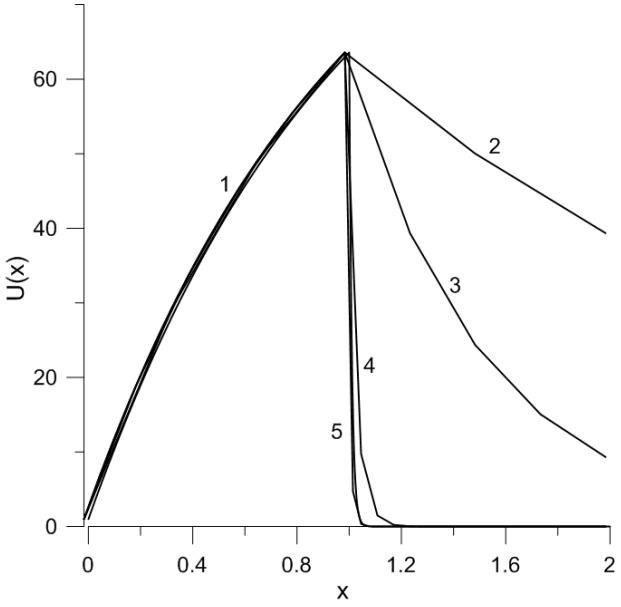

Рис.1. Решение задачи 1 при различном числе узлов: 1 – точное решение, 2 – $I = 4$, 3 – $I = 8$, 4 – $I = 32$, 5 – $I = 64$.

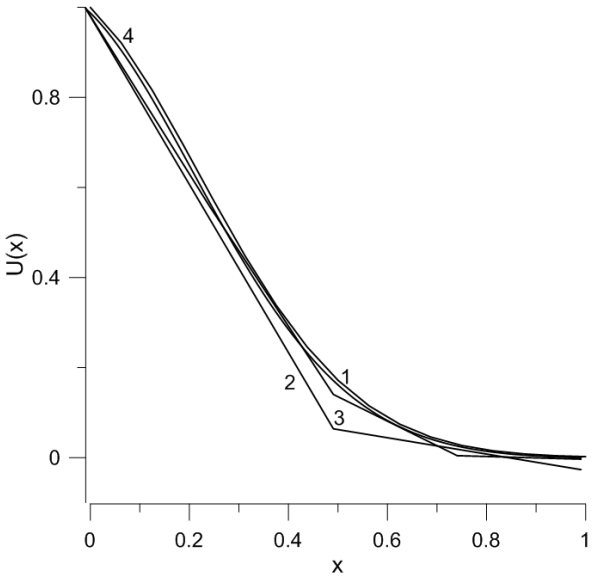

Рис.2. Решение задачи 2 при различном числе узлов: 1 – точное решение, 2 – $I = 2$, 3 – $I = 4$, 4 – $I = 16$.

Из уравнения (1) следует тождество $(\sigma u)' = \sigma Q + \sigma' u - \sigma^2 u$. С помощью этого тождества и квадратурной формулы Эйлера–Маклорена получаем

$$\overline{(\sigma u)}_i = 0.5 h_i (\sigma_{i+1} u_{i+1} + \sigma_i u_i) - h_i^2 / 12 (\Phi_{i+1} - \Phi_i), \quad i = \overline{0, I}, \tag{8}$$

где $\Phi_i = \sigma_i Q_i + \sigma_i' u_i - \sigma_i^2 u_i$.

Система разностных уравнений (2),(8) относительно неизвестных u_i и $\overline{(\sigma u)}_i$ определяет бикомпактную схему (схему "Б") для решения задачи (1). При достаточной гладкости σ и Q эта схема имеет четвертый порядок точности.

Уравнение (1) можно переписать также в виде

$$\frac{d}{dx}(Dv) + v = Q(x), \tag{9}$$

где $v = \sigma u$, $D = 1/\sigma$. Для уравнения (9) легко построить бикомпактную схему четвертого порядка аппроксимации относительно переменных $\omega_i = \frac{d}{dx}(Dv)|_{x_i}$, v_i, $\overline{v}_i$, $\overline{(Dv)}_i$, $v_{i+0.5}$:

$$\omega_i + v_i = Q_i, \tag{10}$$

$$D_{i+1}v_{i+1} - D_i v_i + \overline{v}_i = \overline{Q}_i, \tag{11}$$

$$\overline{(Dv)}_i = 0.5h_i(D_{i+1}v_{i+1} + D_i v_i) - h_i^2/12(Q_{i+1} - Q_i - v_{i+1} + v_i), \tag{12}$$

$$\overline{(Dv)}_i = h_i/6(D_{i+1}v_{i+1} + D_i v_i + 4D_{i+0.5}v_{i+0.5}), \tag{13}$$

$$\overline{(v)}_i = h_i/6(v_{i+1} + v_i + 4v_{i+0.5}), \tag{14}$$

$$v_0 = \sigma_0 u_a, \tag{15}$$

где $D_{i+0.5} = D(x_{i+0.5})$, $x_{i+0.5} = 0.5(x_{i+1} + x_i)$, $i = \overline{0, I}$. Уравнения (13),(14) получаются применением квадратурных формул Симпсона для вычисления $\overline{(Dv)}_i$ и $\overline{(v)}_i$. При достаточно гладких Q и σ разностная схема (10)–(15) (схема "В") имеет четвертый порядок точности.

Результаты расчетов по схемам "Б" и "В" представлены в табл.1. При $I > 4$ порядок сходимости схем близок к 4. Точность схемы "В" несколько выше.

Таблица 1. Ошибка схем в норме С (левая колонка для каждой схемы) и эффективный порядок сходимости схемы (правая колонка) для задач 1 и 2. Число точек сетки определяется значением $I = 2^n$.

n	Задача 1. Схема “А”		Задача 2. Схема “А”		Задача 2. Схема “Б”		Задача 2. Схема “В”	
1			1.1–1		1.1 –2		1.3–2	
2	50		3.1–2	1.8	1.6–3	2.78	8.5–4	3.9
3	39	0.48	7.4–3	2.1	9.8–5	4.03	5.1–5	4.05
4	25	0.81	1.8–3	2.0	6.1 –6	4.01	3.4–6	3.91
5	10	1.46	4.6–4	2.0	3.8 –7	4.0	2.1–7	4.01
6	1.9	2.41	1.2–4	2.0	2.4–8	3.98	1.3–8	4.01
7	0.2	3.35	2.9–5	2.0				
8	1.3–2	3.99	5.6–6	2.0				
9	7.5–4	4.11						
10	4.7–5	4.0						
11	2.9–6	4.0						
12	1.8–7	4.0						
13	1.6–8	4.03						

Отметим, что все три рассмотренные схемы могут быть записаны в виде (6) (коэффициенты A_i и F_i определяются схемой) и, следовательно, приближенные решения могут быть найдены методом бегущего счета. В схеме "Б" в систему разностных уравнений входит функция σ_i, а в схеме "В" – функция $D_{i+0.5}$. В случае когда σ не задано аналитически и определяется в процессе расчета (например, по концентрациям компонентов активной зоны реактора), $D_{i+0.5}$ может быть вычислена более точно и схема "В" предпочтительнее. Схему "Б" можно использовать при $\sigma \geq 0$, тогда как схему "В" только при положительных σ.

3. Бикомпактная схема для уравнения переноса в плоском слое

Кинетическое интегро–дифференциальное уравнение переноса первого порядка для плоской геометрии с интегралом изотропного рассеяния записывается в виде

$$\mu u_x + \sigma^t(x)u = Q(x,\mu), \tag{16}$$

где $u = u(\mu, x)$ – функция распределения нейтронов в фазовом пространстве, $x \in [0, X]$, $\mu \in [-1,1]$ определяет косинус угла между направлением полета нейтронов и осью x, интеграл рассеяния и источник в правой части

$$Q(\mu, x) = 0.5\left(\sigma^s(x)\int_{-1}^{1} u d\mu + F(\mu, x)\right),$$

$\sigma^t = \sigma^a + \sigma^s$, где σ^t – полное сечение, σ^a – сечение поглощения, σ^s – сечения рассеяния. Правая часть в (16) включает в себя интеграл рассеяния $0.5\sigma^s(x)\int_{-1}^{1} u d\mu$ и внешний источник нейтронов $F(\mu, x)$. Граничные условия записываются в виде

$$u(\mu > 0, 0) = u_0(\mu), \qquad u(\mu < 0, X) = u_X(\mu). \tag{17}$$

Определим сетку по координате μ:

$$\mu_m^- = -0.5 - 0.5\cos(\pi m / M), \qquad \mu_m^+ = 0.5 - 0.5\cos(\pi m / M), \quad \text{где} \quad m = \overline{0, M}.$$

Для аппроксимации по переменной x используется схема "А" (см. раздел 2) на сетке G_I:

$$\mu_m^-(u_{m,i+1}^- - u_{mi}^-) + \sigma_i^t \overline{u}_{mi}^- = \overline{Q}_{mi}^-, \quad m = \overline{0, M}, \quad i = \overline{0, I}, \tag{18}$$

$$\mu_m^+(u_{m,i+1}^+ - u_{mi}^+) + \sigma_i^t \overline{u}_{mi}^+ = \overline{Q}_{mi}^+, \quad m = \overline{1, M}, \quad i = \overline{0, I}, \tag{19}$$

$$\overline{u}_{mi}^- = 0.5h_i(u_{mi}^- + u_{m,i+1}^-) - h_i^2 / 12(\Phi_{m,i+1}^- - \Phi_{mi}^-), \quad m = \overline{0, M}, \quad i = \overline{0, I}, \tag{20}$$

$$\overline{u}_{mi}^+ = 0.5h_i(u_{mi}^+ + u_{m,i+1}^+) - h_i^2 / 12(\Phi_{m,i+1}^+ - \Phi_{mi}^+), \quad m = \overline{1, M}, \quad i = \overline{0, I}, \tag{21}$$

где $Q_{mi}^{\pm} = 0.5\sigma_i^s \sum_{m=0}^{M} c_m u_{mi}^{\pm} + 0.5\overline{F}_{mi}^{\pm}$, c_m – коэффициенты квадратурной формулы, имею-

щие алгебраический порядок точности, равный M, $\Phi_{mi}^{\pm} = Q_{mi}^{+} - \sigma_i^t \bar{u}_{mi}^{\pm}$. Значения сечений σ_i выбирается постоянными в пределах i-й ячейки. Граничные условия (17) аппроксимируются следующим образом:

$$u_{m,0}^{+} = u_0(\mu_m^{+}), \quad m = \overline{0, M}; \qquad u_{m,I+1}^{-} = u_X(\mu^{-}), \quad m = \overline{0, M-1}. \tag{22}$$

Необходимо также добавить условия непрерывности приближенного решения при $\mu = 0$

$$u_{M,i}^{-} = u_{0,i}^{+}, \quad i = \overline{0, I+1}; \qquad \bar{u}_{M,i}^{-} = \bar{u}_{0,i}^{+}, \quad i = \overline{0, I}. \tag{23}$$

Количество уравнений ($2(M+1)(2I+3)$) в системе (18)–(23) совпадает с числом неизвестных $u_i^{\pm}$, $\bar{u}_i^{\pm}$. Схема верифицировалась на тестовой задаче (Задаче 3) из [18] и [19]. В этой задаче решается уравнение (16) с граничными условиями $u_0 = 0.5$, $u_X = 0$. Расчетную область можно разбить на 5 слоев, в каждом из которых коэффициенты уравнения (16) не зависят от x:

Задача 3.

Слой 1. $x \in (0,2)$, $\sigma^t(x) = 50$, $\sigma^s(x) = 0$, $F(x) = 50$.

Слой 2. $x \in (2,3)$, $\sigma^t(x) = 5$, $\sigma^s(x) = 0$, $F(x) = 0$.

Слой 3. $x \in (3,5)$, $\sigma^t(x) = 0$, $\sigma^s(x) = 0$, $F(x) = 0$.

Слой 4. $x \in (5,6)$, $\sigma^t(x) = 1$, $\sigma^s(x) = 0.9$, $F(x) = 1$.

Слой 5. $x \in (6,8)$, $\sigma^t(x) = 1$, $\sigma^s(x) = 0.9$, $F(x) = 0$.

Расчеты проводились на сгущающейся к границам слоев сетке. Для коэффициентов уравнения (16) на границе слоев использовались условия (7). Схема "А" в этом случае имеет четвертый порядок точности. Линейная система алгебраических уравнений решалась методом Гаусса с помощью стандартных программ.

Результаты расчетов на различных сетках приводятся на рис.3. Во всех расчетах дискретизация по μ одинакова, $M = 4$. В первом слое $I = 16$, в остальных слоях $I = N$, где N варьировалось от 2 до 20. Приемлемая точность достигается уже при $N > 8$. На грубой сетке $N = 2$ наблюдается правильное качественное поведение приближенного решения (участки монотонности, границы изменения решения), однако при $x \approx 2.5$ приближенное решение отрицательно.

Прямой метод решения интегро–дифференциального уравнения переноса возможен в одномерном случае, но становится неоправданно трудным в многомерной геометрии. В этом случае применяется метод итерации источника, в котором правая часть уравнения переноса считается известной и вычисляется по предыдущей итерации. На каждой итерации интегро–дифференциальное уравнение заменяется дифференциальным уравнением (16) с заданной правой частью $Q(\mu, x)$ (значение интеграла рассеяния $I(x) = 0.5\sigma^s(x)\int_{-1}^{1} u d\mu$ вычисляется по $u(\mu, x)$ с предыдущей итерации). На каждой итерации системы разностных уравнений при любом m могут быть записаны в виде (6) и решены методом бегущего счета. Рис.4 демонстрирует скорость сходимости итераций

для приближенного решения задачи 3 (расчеты проводятся при $N = 20$, на первой итерации берется $Q(\mu, x) = 0.5F(\mu, x)$). На рис.4 приводится зависимость $\ln(A_s)$, где A_s отклонение (в норме *C*) приближенного решения $u_{mi}^{(s)}$ (на s-й итерации) от решения $u_{mi}^{(100)}$. По наклону кривой можно оценить приближенную зависимость $A_s = O(e^{-0.256s})$. Сходимость неприемлемо медленная – сходимость итераций с точностью 10^{-12} достигается при 100 итерациях.

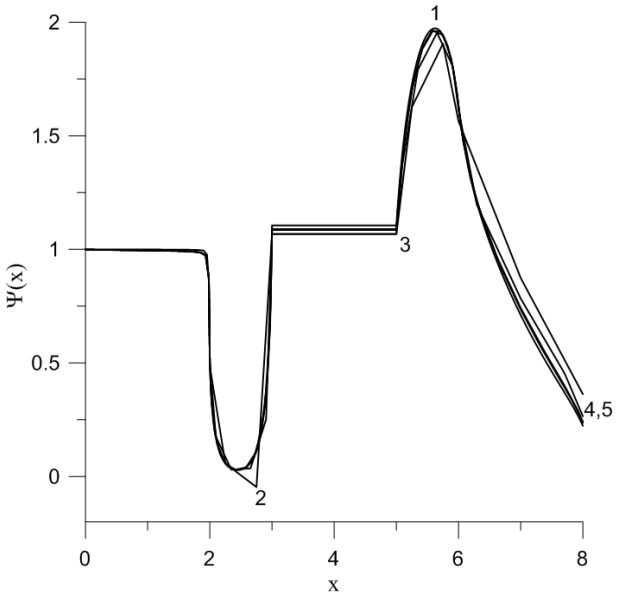

Рис.3. Решение задачи 3 при сгущении сеток: 1 – «точное» решение, 2 – *N*=2, 3 – *N*=4, 4 – *N* = 8, 5 – *N* = 10.

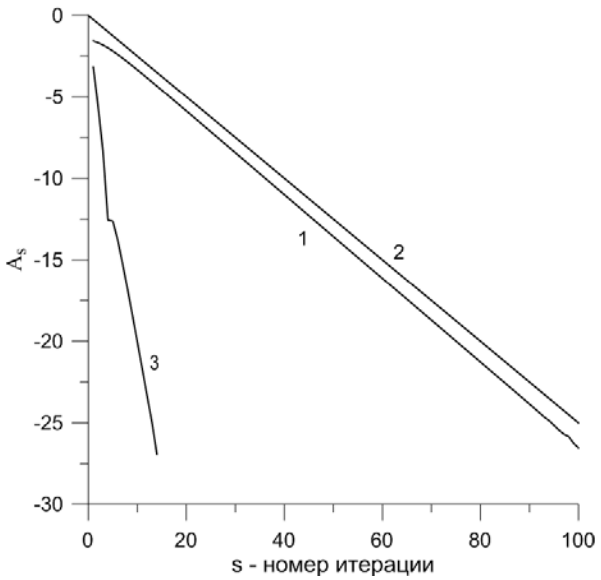

Рис.4. Сходимость итераций решения задачи 3 в норме C при числе пространственных узлов *N*= 20 в зависимости от числа итераций. 1 – метод итераций по источнику, прямая 2 – 0.256 *x*, 3 – метод квазидиффузии.

Одним из эффективных методов ускорения сходимости итераций является метод квазидиффузии. Этот метод отличается от метода итерации источника более точным способом вычисления интеграла рассеяния: в методе итерации источника $I(x)$ вычисляется по приближенному решению с предыдущей итерации, тогда как в методе квазидиффузии $I(x)$ вычисляется из вспомогательной системы уравнений (уравнений квазидиффузии) меньшей размерности (коэффициенты уравнений не зависят от угловой переменной μ). Коэффициенты уравнений квазидиффузии вычисляются по значениям $u(\mu, x)$ с предыдущей итерации. Уравнения строятся таким образом, чтобы эти коэффициенты слабо зависели от решения уравнения (16). За счет этого достигается высокая точность вычисления $I(x)$ и существенное (на порядок и больше) ускорение сходимости итераций по сравнению с методом итерации по источнику.

Для построения уравнений квазидиффузии для уравнения (16) в качестве неизвестной функции удобно использовать скалярный поток нейтронов $\psi(x) = \int_{-1}^{1} u d\mu$, отличающийся от $I(x)$ множителем. Первое из уравнений (уравнение баланса частиц) получается интегрированием (16) по μ на отрезке $[-1,1]$, второе (уравнение для потока частиц) –

интегрированием на этом же отрезке уравнения (16), умноженного на μ. В результате получаем следующую систему ОДУ (см.[10]):

$$\frac{dw}{dx} + \bar{A}\psi = \Phi, \tag{24}$$

$$\frac{d(D\psi)}{dx} + Bw = 0, \tag{25}$$

где $w(x)=\int_{-1}^{1}\mu u d\mu$ – поток нейтронов, $\bar{A}=\sigma^t(x)-\sigma^s(x)$, $B=\sigma^t(x)$, $D(x)=\int_{-1}^{1}\mu^2 u d\mu / \psi(x)$ – коэффициент квазидиффузии, $\Phi(x) = 0.5\int_{-1}^{1}F(\mu,x)d\mu$.

Проинтегрируем уравнения (17) по μ на отрезках $[0,1]$ и $[-1,0]$. В результате получаем граничные условия для переменных ψ и w:

$$w(0) = C_0(\psi(0) - \psi^0) + w^0, \tag{26}$$

$$w(X) = C_X(\psi(X) - \psi^X) + w^X, \tag{27}$$

где $C_0 = \int_{-1}^{0}\mu u d\mu / \int_{-1}^{0} u d\mu$, $C_X = \int_{0}^{1}\mu u d\mu / \int_{0}^{1} u d\mu$, $\psi^0 = \int_{0}^{1} u_0 d\mu$, $\psi^X = \int_{-1}^{0} u_X d\mu$, $w^0 = \int_{0}^{1}\mu u_0 d\mu$, $w^X = \int_{-1}^{0}\mu u_X d\mu$ – константы, вычисляемые по заданным граничным условиям для уравнения переноса.

Отметим, что функции $D(x)$ и константы C_0, C_X можно рассматривать как дробно–линейные функционалы, которые определяются на произвольных функциях $u(\mu,x)$. Если $u(\mu,x)$ близки к решениям уравнения переноса (16), то решения уравнений (24), (25) позволяют с хорошей точностью вычислить интеграл рассеяния в (16). Таким образом, последовательное решения уравнений квазидиффузии и уравнения переноса (с интегралом рассеяния, который вычисляется из уравнений квазидиффузии) приводит к быстро сходящейся итерационной процедуре решения уравнения переноса.

Для решения уравнений (24), (25) может быть использована бикомпактная схема.

4. Бикомпактная схема для уравнений квазидиффузии

Введем новую переменную $v(x) = D\psi$ и обозначим $A = \bar{A} / D$. В новых переменных (24), (25) перепишется в виде

$$\frac{dw}{dx} + Av = \Phi, \tag{28}$$

$$\frac{dv}{dx} + Bw = 0. \tag{29}$$

Бикомпактная схема (схема "А" из раздела 2) для этой системы на сетке G_I записывается в виде

$$w_{i+1} - w_i + 0.5(A_{i+1} + A_i)\overline{v}_i = \overline{\Phi}_i \tag{30}$$

$$v_{i+1} - v_i + 0.5(B_{i+1} + B_i)\overline{w}_i = 0, \tag{31}$$

$$\overline{w}_i = 0.5h_i(w_{i+1} + w_i) - h_i^2 / 12(-A_{i+1}v_{i+1} + A_i v_i + \Phi_{i+1} - \Phi_i), \tag{32}$$

$$\overline{v}_i = 0.5h_i(v_{i+1} + v_i) - h_i^2 / 12(-B_{i+1}w_{i+1} + B_i w_i), \tag{33}$$

$$w_0 = \hat{C}_0(v_0 - \hat{\psi}^0); \quad w_{I+1} = \hat{C}_X(v_{I+1} - \hat{\psi}^X), \tag{34}$$

где $i = \overline{0, I}$. Число уравнений 4(I+1)+2 равно числу неизвестных 2(I+2)+2(I+1).

Схема (30)–(34) – в общем случае имеет второй порядок точности, а при кусочно–постоянных коэффициентах σ^t и σ^s ($D = \text{const}$) – имеет 4 порядок точности.

Исключая неизвестные $\overline{v}_i$ и $\overline{w}_i$ из уравнения (30)–(34), получаем систему уравнений относительно v_i и w_i ($i = \overline{0, I}$):

$$A_i^1 v_{i+1} + A_i^2 v_i + B_i^1 w_{i+1} + B_i^2 w_i = F_i^1 , \tag{35}$$

$$C_i^1 v_{i+1} + C_i^2 v_i + D_i^1 w_{i+1} + D_i^2 w_i = F_i^2 \tag{36}$$

с граничными условиями (34).

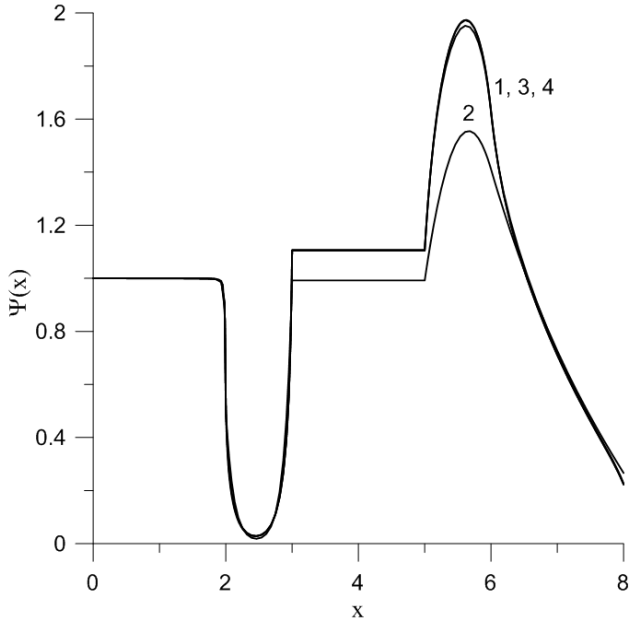

Рис.5. Сходимость решения задачи 3 методом квазидиффузии для пространственного профиля. 1 – «точное» решение; 2 – на первой итерации s=1; 3 – на второй итерации s = 2; 4 – на десятой итерации s = 10.

Систему (35), (36) можно привести к каноническому виду системы двухточечных матричных уравнений [20]:

$$P_{i+1}V_{i+1} - Q_iV_i = \widetilde{F}_i,\ i = \overline{0,I}, \tag{37}$$

где $V_i = \begin{pmatrix} v_i \\ w_i \end{pmatrix}$, $\widetilde{F}_i = \begin{pmatrix} F_i^1 \\ F_i^2 \end{pmatrix}$, P_i и Q_i –матрицы 2×2, например, $P_{i+1} = \begin{pmatrix} A_i^1 & B_i^1 \\ C_i^1 & D_i^1 \end{pmatrix}$. Система (37) эффективно решается методом матричной прогонки.

Результаты решения уравнений квазидиффузии (30)–(34) совместно с уравнением переноса (18)–(23) по сходимости итераций приводятся на рис.4, а по пространственному распределению плотности нейтронов на рис.5. Расчеты проводились для тестовой задачи 3, для $N=20$. На первой итерации решается уравнение (30)–(34) для $D=1/3$, $C_0 = -1/2$, $C_X = 1/2$. Система (35), (36) решается методом матричной прогонки. Для достижения приемлемой точности достаточно трех–четырех итераций (см. рис.5). Скорость сходимости итераций при использовании метода квазидиффузии повышается больше чем на порядок (см. рис.4) по сравнению с методом итерации по интегралу рассеяния. Величина погрешности $A_s = O(e^{-1.9s})$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации для гиперболических уравнений // ДАН, 2010, т.430, №4, с.470-474;
   англ.пер.: *B.V. Rogov and M.N. Mikhailovskaya*. Fourth Order Accurate Bicompact Schemes for Hyperbolic Equations // Doklady Mathematics, 2010, v.81, №1, p.146–150. © Pleiades Publishing, Ltd.
2. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2011, т.23, №6, с.98-110;
   англ.пер.: *B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya*. Monotonic bicompact schemes for linear transport equations // Mathematical Models and Computer Simulations, 2012, v.4, Issue 1, p.92-100.
3. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* Монотонная высокоточная компактная схема бегущего счета для квазилинейных уравнений гиперболического типа // Матем. модел., 2011, т.23, №12, с.65–78;
   англ.пер.: *B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya*. Monotone high-accuracy compact running scheme for quasi-linear hyperbolic equations // Mathematical Models and Computer Simulations, 2012, v.4, Issue 4, p.375-384.
4. *М.Н. Михайловская, Б.В. Рогов.* Бикомпактные монотонные схемы для многомерного линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2011, т.23, №10, с.107–116;
   англ.пер.: *M.N. Mikhailovskaya, B.V. Rogov*. The bicompact monotonic schemes for a multidimensional linear transport equation // Math. Models and Comput. Simul., 2012, v.4:3, p.355–362.
5. *Е.Н. Аристова, Б.В. Рогов.* О реализации граничных условий в бикомпактных схемах для линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2012, т.24, №10, с.3-14;
   англ.пер.: *E.N. Aristova, B.V. Rogov.* Boundary conditions implementation in bicompact schemes for the linear transport equation // Mathematical Models and Computer Simulations, 2013, v.5, №3, p.199–208.
6. *М.Н. Михайловская, Б.В. Рогов.* Монотонные компактные схемы бегущего счета для систем уравнений гиперболического типа // ЖВМ и МФ, 2012, т.52, №4, с.672-695;
   англ.пер.: *M.N. Mikhailovskaya, B.V. Rogov*. Monotone compact running schemes for systems of hyperbolic equations // Comput. Mathematics and Mathematical Physics, 2012, v.52, Issue 4, p.578-600.
7. *Б.В. Рогов.* Высокоточная монотонная компактная схема бегущего счета для многомерных уравнений гиперболического типа // ЖВМ и МФ, 2013, т.53, №2, с.94-104;
   англ.пер.: *B.V. Rogov*. High-order accurate monotone compact running scheme for multidimen-

sional hyperbolic equations // Computational Mathematics and Mathematical Physics 2013, v.53, Issue 2, p.205-214.

8. *Е.Н. Аристова, Д.Ф. Байдин, Б.В. Рогов.* Бикомпактные схемы для неоднородного линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2013, т.25, №5, с. 55-66;
англ.пер.: *E.N. Aristova, D.F. Baydin, B.V. Rogov.* Bicompact Schemes for an Inhomogeneous Linear Transport Equation // Math. Models and Computer Simulations, 2013, v.5, №6, p.586–594.
9. *Е.Н. Аристова.* Бикомпактные схемы для неоднородного линейного уравнения переноса в случае больших оптических толщин // Математич. моделирование, 2013, т.25, №10, с.3-18;
англ.пер.: *E.N. Aristova.* Bicompact Schemes for an Inhomogeneous Linear Transport Equation in the Case of a Large Optical Depth // Mathematical Models and Computer Simulations, 2014, v.6, №3, p.227–238.
10. *В.Я. Гольдин.* Квазидиффузный метод решения кинетического уравнения // ЖВМ и МФ, 1964, т.4, №6, с.1078–1087;
англ.пер.: *V.Ya. Gol'din.* A quasi-diffusion method of solving the kinetic equation // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1964, v.4, Issue 6, p.136-149.
11. *В.Я. Гольдин.* О математическом моделировании задач сплошной среды с неравновесным переносом // В сб.: Современные проблемы математической физики и вычислительной математики. – М.: Наука, 1982, с.113–127;
V.Ya. Gol'din. O matematicheskom modelirovanii zadach sploshnoj sredy s neravnovesnym perenosom // V sb.: Sovremennye problemy matematicheskoj fiziki i vychislitelnoj matematiki. – M.: Nauka, 1982, str. 113–127.
12. *Marvin L. Adams, Edward W. Larsen*. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // Progress in Nuclear Energy, 2002, v.40, Issue 1, p.3-159;
13. *Е.Н. Аристова, В.Я. Гольдин.* Расчет уравнения переноса нейтронов совместно с уравнениями квазидиффузии в r-z геометрии // Математ. моделир., 2006, т.18, №11, с.61-66.
E.N. Aristova, V.Ya. Gol'din. Raschet uravneniya perenosa nejtronov sovmestno s uravneniyami kvazidiffuzii v r-z geometrii // Matematicheskoe modelirovanie, 2006, t.18, № 11, s.61-66.
14. *Т.Г. Елизарова, Б.Н. Четверушкин*. Кинетически-согласованные разностные схемы для моделирования течений вязкого тепловодного газа // ЖВМиМФ, 1988, v.28:11, p.1695–1710;
англ.пер.: *T.G. Elizarova, B.N. Chetveryushkin*. Kinetically coordinated difference schemes for modelling flows of a viscous heat-conducting gas // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1988, v.28, Issue 6, p.64–75.
15. *Б.Н. Четверушкин*. Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике: новая модель вязкого газа, алгоритмы, параллельная реализация, приложения. – М.: Изд-во МГУ, 1999, 232 с.;
B.N. Chetverushkin. Kineticheski-soglasovannye sxemy v gazovoj dinamike: novaya model vyazkogo gaza, algoritmy, parallelnaya realizaciya, prilozheniya. – M.: Izd-vo MGU, 1999, 232 s.
16. *Л.В. Дородницын, Б.Н. Четверушкин*. Кинетически согласованные схемы для моделирования течения вязкого газа // ЖВМ и МФ, 2000, v.40:12, 1875–1889;
L.V. Dorodnicyn, B.N. Chetverushkin. Kineticheski soglasovannye sxemy dlya modelirovaniya techeniya vyazkogo gaza // Zh. vychisl. matem. i matem. fiz., 2000, v.40:12, p.1875–1889.
17. *И.В. Абалакин, А.В. Жохова, Б.Н. Четверушкин*. Кинетически-согласованные схемы повышенного порядка точности // Матем. моделирование, 2001, т.13, №5, с.53–61;
I.V. Abalakin, A.V. Zhoxova, B.N. Chetverushkin. Kineticheski-soglasovannye schemy povyshennogo poryadka tochnosti // Matem. modelirovanie, 2001, t.13, №5, s.53–61.
18. *W.H. Reed*. New Difference Schemes for the Neutron Transport Equation // Nucl. Sci. Eng., 1971, v.46, p.309-315.
19. *В.Е. Трощиев, Ю.В. Трощиев*. Монотонные разностные схемы с весом для уравнения переноса в плоском слое // Матем. моделирование, 2003, т.15, №1, с.3–13;
V.E. Troshhiev, Yu.V. Troshhiev. Monotonnye raznostnye sxemy s vesom dlya uravneniya perenosa v ploskom sloe // Matem. modelirovanie, 2003, t.15, №1, s.3–13.
20. *А.А. Самарский, Е.С. Николаев*. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 732 с.;
англ.пер.: *A.A. Samarskii, E.S. Nikolaev*. Numerical Methods for Grid Equations. Springer, 1989, 744p.

Поступила в редакцию 08.12.2014