



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

Препринты ИПМ • Препринт № 45 за 2018 г.



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

Аристова Е.Н., Караваева Н.И.

Бикомпактные схемы
высокого порядка
аппроксимации для
уравнений квазидиффузии

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Аристова Е.Н., Караваева Н.И. Бикомпактные схемы высокого порядка аппроксимации для уравнений квазидиффузии // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 45. 28 с. doi:[10.20948/prepr-2018-45](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-45)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-45>

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

Е.Н.Аристова, Н.И.Караваева

**Бикомпактные схемы
высокого порядка аппроксимации
для уравнений квазидиффузии**

Москва — 2018

Аристова Е.Н., Караваева Н.И.

Бикомпактные схемы высокого порядка аппроксимации для уравнений квазидиффузии

В работе рассмотрено построение бикомпактных схем для нестационарных уравнений квазидиффузии, используемых при решении уравнения переноса для ускорения сходимости итераций по рассеянию и делению. Дифференциально-разностная система уравнений бикомпактной схемы строится методом прямых на двухточечном пространственном шаблоне. Достигается четвертый порядок аппроксимации по пространству благодаря включению в список неизвестных не только узловых значений функций, но и интегральных средних. Полученная система дифференциально-разностных уравнений интегрируется по времени L-устойчивым диагонально-неявным методом Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации. Каждая стадия метода сводится к неявному методу Эйлера, реализованному для краевой задачи методом потоковой прогонки. Предложен итерационный алгоритм для сохранения высокого порядка аппроксимации при нелинейности, показано, что одной дополнительной итерации по нелинейности достаточно для восстановления четвертого порядка сходимости по пространственным переменным.

Ключевые слова: уравнение переноса, метод квазидиффузии, HOLO алгоритмы решения уравнения переноса, потоковая прогонка, диагонально-неявные методы Рунге–Кутты

Elena Nikolaevna Aristova, Nataliia Igorevna Karavaeva

Bicompact High Order Schemes for Quasi-Diffusion Equations

The construction of bicomcompact schemes for nonsteady quasi-diffusion equations used for acceleration of iterations over scattering and fission terms in a transport equation is considered. Differential-difference system of bicomcompact scheme equations is constructed by the method of lines on two points space stencil. The fourth order of approximation on space variable is achieved by calculating not only nodal values but integral averaged values of unknown function. This system is integrated over time by L-stable Runge-Kutta method of third order of approximation. Each stage of the method is equivalent to implicit Euler method which is realized by efficient method for boundary value problem. An iteration algorithm is proposed to save high order of approximation in presence of nonlinearity. It is shown that one additional iteration is sufficient for saving fourth order of convergence on space variable.

Key words: transport equation, quasi-diffusion method, HOLO algorithms for transport equation solving, diagonally implicit Runge-Kutta method

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-01-00857-а.

1. Введение

Нестационарное уравнение переноса излучения или частиц в одномерной плоской геометрии имеет вид:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + (\kappa_a(x,t) + \kappa_s(x,t))I = S(I) + Q(x,t,\mu),$$

$$S(I) = \kappa_s(x,t) \int_{-1}^1 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2j+1}{2} w_j q_j(\mu') q_j(\mu) I(x,t,\mu') d\mu'. \quad (1)$$

Здесь $I(x,t,\mu)$ – функция распределения, зависящая от фазовых переменных и времени, μ – косинус угла направления полета частицы, составленного с направлением оси x , $S(I)$ – член рассеяния, $Q(x,t,\mu)$ – внешний источник, κ_a, κ_s – коэффициенты поглощения и рассеяния соответственно, w_j – коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния по полиномам Лежандра.

Для уравнения (1) ставится начально-краевая задача

$$I(x,0,\mu) = \psi(x,\mu),$$

$$I(x,t,\mu)|_{x=x_0} = \varphi_0(t,\mu), \quad \mu \geq 0, \quad I(x,t,\mu)|_{x=L} = \varphi_L(t,\mu), \quad \mu \leq 0. \quad (2)$$

Для ускорения сходимости итераций по рассеянию, делению, а также для организации эффективной связи решения уравнения переноса с параметрами среды, используются так называемые HOLO алгоритмы решения уравнения переноса, в которых наряду с уравнением переноса (1) высокой размерности (НО – High Order) решаются уравнения более низкой размерности (ЛО – Low Order) [1–7]. Из семейства HOLO алгоритмов одним из самых успешных является метод квазидиффузии В.Я.Гольдина [4–7].

В общем случае уравнения квазидиффузии могут быть получены из уравнения переноса двухступенчатым понижением размерности решаемой задачи. На первом этапе происходит усреднение задачи по угловым переменным введением дробно-линейных функционалов, слабо зависящих от решения при сохранении заданной дискретизации по энергии (для данной энергетической группы при использовании многогруппового приближения или для обобщенной группы при использовании метода лебеговского осреднения). На втором этапе совершается осреднение по энергетической переменной, что приводит к квазидиффузионным уравнениям относительно полных плотности и потока частиц. Рассмотрим пока только первый этап квазидиффузионного подхода.

Введем $U(x,t)$ – плотность излучения, сопоставляемая с интегралом от функции распределения по угловой переменной $\mu = \cos \theta$:

$U(x,t) = \int_{-1}^1 I(x,t,\mu) d\mu$, $W(x,t)$ – поток, сопоставляемый с аналогичным

интегралом с весовой функцией μ : $W(x,t) = \int_{-1}^1 \mu I(x,t,\mu) d\mu$. Интегрируя уравнение (1) по переменной μ с весом 1 и μ для плотности и потока излучения можно получить систему уравнений квазидиффузии вида

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} + \kappa_0(x,t)U = Q_0(x,t), \\ \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial DU}{\partial x} + \kappa_1(x,t)W = Q_1(x,t). \end{cases} \quad (3)$$

$$\kappa_0 = \kappa_a, \quad \kappa_1 = \kappa_a + \kappa_s(1 - w_1)$$

В эту систему уравнений входит коэффициент квазидиффузии

$$D(x,t) = \int_{-1}^1 \mu^2 I(x,t,\mu) d\mu \Big/ \int_{-1}^1 I(x,t,\mu) d\mu \quad (4)$$

замыкающий систему уравнений (3), и определяемый как дробно-линейный функционал по решению уравнения переноса (1). Q_0 и Q_1 получены интегрированием Q по углу с весом 1 и μ . Начальные условия для (3) получаются интегрированием начальных условий (2) для функции распределения также с весами 1 и μ . Кроме коэффициента квазидиффузии (4), система уравнений (3) получает из решения уравнения переноса еще и коэффициенты связи плотности и потока на границе в качестве краевых условий:

$$\begin{aligned} \frac{W - W^{in}}{U - U^{in}} \Big|_{x=0} &= c_0, & \frac{W - W^{in}}{U - U^{in}} \Big|_{x=L} &= c_L, \\ U^{in} \Big|_{x=0} &= \int_0^1 \varphi_0(t,\mu) d\mu, & W^{in} \Big|_{x=0} &= \int_0^1 \mu \varphi_0(t,\mu) d\mu, \\ U^{in} \Big|_{x=L} &= \int_{-1}^0 \varphi_L(t,\mu) d\mu, & W^{in} \Big|_{x=L} &= \int_{-1}^0 \mu \varphi_L(t,\mu) d\mu, \end{aligned} \quad (5)$$

где коэффициенты рассчитываются по выходящей из области функции распределения

$$\begin{aligned}
c_0 &= \int_{-1}^0 \mu I(0, t, \mu) d\mu / \int_{-1}^0 I(0, t, \mu) d\mu, \\
c_L &= \int_0^1 \mu I(L, t, \mu) d\mu / \int_0^1 I(L, t, \mu) d\mu.
\end{aligned} \tag{6}$$

В свою очередь, уравнение переноса (1) также переписывается в виде, позволяющем выделить главные члены рассеяния (и, возможно, деления, если речь идет о переносе нейтронов [7,8]) и выразить их через плотность и поток излучения:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + (\kappa_a(x, t) + \kappa_s(x, t)) I &= S(I) + Q(x, t, \mu) \\
S(I) &= \kappa_s(x, t) \left(\frac{U}{2} + \frac{3}{2} w_1 \mu W + \frac{5}{2} w_2 \frac{3D-1}{2} \frac{3\mu^2-1}{2} U \right) + R(I) \\
R(I) &= \kappa_s(x, t) \int_{-1}^1 \sum_{j=3}^{\infty} \frac{2j+1}{2} w_j q_j(\mu') q_j(\mu) I(x, t, \mu') d\mu'
\end{aligned} \tag{7}$$

Таким образом, решения систем (3) и (7) оказываются тесно связанными, что позволяет значительно ускорить итерационные процессы решения интегро-дифференциального уравнения переноса.

Для уравнения переноса были предложены бикомпактные схемы на минимальном двухточечном шаблоне [9–12], обладающие четвертым порядком аппроксимации по пространству. Схемы строятся методом прямых, и полученная дифференциально-разностная задача по времени может интегрироваться по схемам любого порядка аппроксимации. Были исследованы А– и L–устойчивые методы Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации, а также схемы более высокого порядка [13–14]. Высокий порядок пространственной аппроксимации при минимальности шаблона возможен при расширении списка искомых переменных и включения в него помимо узловых значений также и интегральных средних по ячейке от искомых величин, так что данный метод сочетает в себе лучшие черты конечно-разностных и конечно-объемных методов [15].

Целью данной работы является построение бикомпактной схемы для численного решения однорупповой системы уравнений квазидиффузии с прицелом на HOLO алгоритмы решения уравнения переноса в дальнейшем. Для тестирования порядка аппроксимации разностной схемы мы рассмотрим задачу ее построения для системы уравнений квазидиффузии независимо от решения уравнения переноса.

2. Постановка задачи и построение бикompактной схемы для системы уравнений квазидиффузии

Ставится задача получить бикompактную схему для системы уравнений (3) с краевыми условиями типа (5) четвертого порядка аппроксимации по пространству и третьего по времени.

Поставим для системы уравнений (5) начальные условия $x \in [0, L]$:

$$U(x,0) = U^0(x) \equiv \int_{-1}^1 \psi(x,\mu) d\mu, \quad W(x,0) = W^0(x) \equiv \int_{-1}^1 \mu\psi(x,\mu) d\mu \quad (8)$$

и краевые условия (5) для $t \in [0, T]$, которые могут быть переписаны в виде:

$$\begin{aligned} \mu_0(t)W(0,t) + \tau_0(t)U(0,t) &= \eta_0(t), \\ \mu_L(t)W(L,t) + \tau_L(t)U(L,t) &= \eta_L(t) \end{aligned} \quad (9)$$

Такой вид краевых условий описывает все три возможных типа краевых задач для системы уравнений второго порядка. Для HOLO алгоритмов коэффициенты граничных условий μ , τ , η вычисляются через c_0 , c_L и падающее на слой на границах внешнее излучение из (5). Для построения схемы будем считать их известными (заданными) величинами. Введем сетку $\{x_i, 0 \leq i \leq N_x\}$ на отрезке $x \in [0, L]$ с пространственными шагами $h_i = x_{i+1} - x_i$. Поскольку построение разностной схемы ведется в пределах только одной ячейки, в дальнейшем индекс ячейки у шага сетки будем опускать.

Для вывода аналога схемы Рогова, предложенной для решения уравнения переноса [9–12], для данной системы уравнений введем следующие обозначения для интегральных средних:

$$\begin{aligned} \bar{u}_i &= \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} U(x,t) dx, & \bar{w}_i &= \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,t) dx, \\ \bar{Q}_{0i} &= \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} Q_0(x,t) dx, & \bar{Q}_{1i} &= \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} Q_1(x,t) dx. \end{aligned} \quad (10)$$

Найдем средние по ячейкам от правой и левой частей уравнений (3). Тогда с учетом введенных обозначений первые два уравнения примут следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{1}{h} (W_{i+1} - W_i) + \overline{\kappa_0 u_i} = \bar{Q}_{0i} \\ \frac{\partial \bar{w}_i}{\partial t} + \frac{1}{h} ((DU)_{i+1} - (DU)_i) + \overline{\kappa_1 w_i} = \bar{Q}_{1i} \end{cases} \quad (11)$$

Чтобы составить полную замкнутую схему для системы уравнений квазидиффузии, эти уравнения необходимо дополнить еще двумя. Для их вывода используем первые дифференциальные следствия системы уравнений (3) и формулу Эйлера–Маклорена. Если исходная система была записана в виде

$$L_1(U, W) \equiv \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} + \kappa_0 U = Q_0, \quad L_2(U, W) \equiv \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial DU}{\partial x} + \kappa_1 W = Q_1,$$

то первыми дифференциальными следствиями системы будут уравнения вида:

$$\frac{\partial L_1(U, W)}{\partial x} = \frac{\partial Q_0}{\partial x}, \quad \frac{\partial L_2(U, W)}{\partial x} = \frac{\partial Q_1}{\partial x}.$$

Интегрируя их по ячейке и используя для выражения разности пространственных производных формулу Эйлера–Маклорена

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} g(x) dx = \frac{h}{2}(g_i + g_{i+1}) - \frac{h^2}{12}(g'_{i+1} - g'_i) + O(h^5),$$

в результате получим вторую подсистему:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(U_{i+1} - U_i)}{\partial t} + \frac{6}{h}(W_{i+1} - 2\bar{w}_i + W_i) + ((\kappa_0 U)_{i+1} - (\kappa_0 U)_i) = Q_{0i+1} - Q_{0i}, \\ \frac{\partial(W_{i+1} - W_i)}{\partial t} + \frac{6}{h}((DU)_{i+1} - 2\overline{(DU)}_i + (DU)_i) + ((\kappa_1 W)_{i+1} - (\kappa_1 W)_i) = \\ = Q_{1i+1} - Q_{1i}. \end{array} \right. \quad (12)$$

Рассмотрим сначала построение схемы четвертого порядка аппроксимации для случая постоянных коэффициентов κ_0, κ_1, D . Заметим, что наибольшие трудности доставляют члены осреднения произведения, как, например, $\overline{(DU)}_i$, т.к. замена их произведением средних

$$\overline{(DU)}_i = \bar{D}_i \bar{u}_i$$

является аппроксимацией по пространству всего лишь второго порядка. Достижение четвертого порядка пространственной аппроксимации возможно введением итераций, но об этом подробнее будет написано ниже. Итак, при постоянных коэффициентах имеем систему четырех дифференциально-разностных уравнений

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{1}{h}(W_{i+1} - W_i) + \kappa_0 \bar{u}_i &= \bar{Q}_{0i}, \\
\frac{\partial \bar{w}_i}{\partial t} + \frac{D}{h}(U_{i+1} - U_i) + \kappa_1 \bar{w}_i &= \bar{Q}_{1i}, \\
\frac{\partial(U_{i+1} - U_i)}{\partial t} + \frac{6}{h}(W_{i+1} - 2\bar{w}_i + W_i) + \kappa_0(U_{i+1} - U_i) &= Q_{0i+1} - Q_{0i}, \\
\frac{\partial(W_{i+1} - W_i)}{\partial t} + \frac{6D}{h}(U_{i+1} - 2\bar{U}_i + U_i) + \kappa_1(W_{i+1} - W_i) &= Q_{1i+1} - Q_{1i}.
\end{aligned} \tag{13}$$

Система уравнений (11)–(12), или ее следствие при постоянных коэффициентах система уравнений (13), является полной системой уравнений метода прямых бикомпактной схемы.

Для интегрирования полученной дифференциально-алгебраической системы уравнений по времени могут быть использованы различные методы [16]. В данной работе мы используем L–устойчивый жёстко-точный диагонально-неявный метод Рунге–Кутты 3 порядка аппроксимации с таблицей Бутчера

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array} = \begin{array}{c|cc} 1 & 1 & \\ \hline 1/3 & 0 & 1/3 \\ \hline 1 & -1/12 & 3/4 & 1/3 \\ \hline & -1/12 & 3/4 & 1/3 \end{array}.$$

Данный метод по свойствам решения и устойчивости очень близок к однократно диагонально-неявному методу Рунге-Кутты 3 порядка, однако значительно проще в реализации. Первая и вторая стадия этого метода представляют собой неявную схему Эйлера с шагом Δt и $\Delta t / 3$ соответственно. Третья стадия рассматриваемого метода Рунге–Кутты может рассматриваться как неявный метод Эйлера с шагом $\Delta t / 3$ относительно искомого решения на новом шаге по времени, отсчитываемая от комбинации уже известных значений на предыдущем шаге и предыдущих стадиях метода. Пусть $\vec{\xi} = (U, W)^T$. Тогда третья стадия рассматриваемого метода Рунге–Кутты может быть записана в следующем виде:

$$\frac{\vec{\xi} - \vec{\xi}}{\Delta t / 3} = \vec{k}^{(3)}, \quad \vec{\xi} = -\frac{7}{6}\vec{\xi} + \frac{9}{4}\vec{\xi}^{(1)} - \frac{1}{12}\vec{\xi}^{(2)},$$

где $\vec{\xi}$ обозначает решение на предыдущем шаге по времени, $\vec{\xi}$ – решение на новом шаге по времени. Цифры в скобках в верхних индексах обозначают номер стадии.

3. Реализация базовой разностной схемы по времени

Таким образом, базовой схемой по времени является неявный метод Эйлера. Рассмотрим его реализацию для системы уравнений (13) при постоянных коэффициентах поглощения:

$$\begin{aligned}
& \frac{\bar{u}_i^{n+1} - \bar{u}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h}(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) + \kappa_0 \bar{u}_i^{n+1} = \bar{Q}_{0i}^{n+1}, \\
& \frac{(U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) - (U_{i+1}^n - U_i^n)}{\Delta t} + \frac{W_{i+1}^{n+1} - 2\bar{w}_i^{n+1} + W_i^{n+1}}{h/6} + \kappa_0(U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) = Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}, \\
& \frac{\bar{w}_i^{n+1} - \bar{w}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h}(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - D_i^{n+1}U_i^{n+1}) + \kappa_1 \bar{w}_i^{n+1} = \bar{Q}_{1i}^{n+1}, \\
& \frac{(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) - (W_{i+1}^n - W_i^n)}{\Delta t} + \frac{D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - 2(\overline{DU})_i^{n+1} + D_i^{n+1}U_i^{n+1}}{h/6} + \kappa_1(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) = \\
& \qquad \qquad \qquad = Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}.
\end{aligned} \tag{14}$$

Запишем систему (14) в виде:

$$\begin{cases} m_0 \bar{u}_i^{n+1} + C(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) = F_{1i}^n, \\ m_0(U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) + 6C(W_{i+1}^{n+1} - 2\bar{w}_i^{n+1} + W_i^{n+1}) = F_{2i}^n, \\ m_1 \bar{w}_i^{n+1} + C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - D_i^{n+1}U_i^{n+1}) = F_{3i}^n, \\ m_1(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) + 6C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - 2\bar{D}_i^{n+1}\bar{u}_i^{n+1} + D_i^{n+1}U_i^{n+1}) = F_{4i}^n, \end{cases} \tag{15}$$

где коэффициенты системы

$$m_0 = 1 + \Delta t \kappa_0, \quad m_1 = 1 + \Delta t \kappa_1, \quad C = \frac{\Delta t}{h}, \quad F_{1i}^n = \Delta t \bar{Q}_{0i}^{n+1} + \bar{u}_i^n,$$

$$F_{2i}^n = \Delta t(Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}) + (U_{i+1}^n - U_i^n), \quad F_{3i}^n = \Delta t \bar{Q}_{1i}^{n+1} + \bar{w}_i^n, \quad F_{4i}^n = \Delta t(Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}) + (W_{i+1}^n - W_i^n).$$

Теперь выразим из первого и третьего уравнений (15) \bar{u}_i^{n+1} и \bar{w}_i^{n+1} и подставим во второе и четвертое. Эти уравнения относительно неизвестных на верхнем слое примут вид (верхний индекс $n + 1$ в дальнейшем опускается):

$$\begin{cases} A_1 U_{i+1} + B_1 U_i + C_1 W_{i+1} + D_1 W_i = G_1, \\ A_2 U_{i+1} + B_2 U_i + C_2 W_{i+1} + D_2 W_i = G_2, \end{cases} \tag{16}$$

с коэффициентами

$$A_1 = m_0 + \frac{12C^2}{m_1} D_{i+1}^{n+1}, \quad B_1 = -m_0 - \frac{12C^2}{m_1} D_i^{n+1}, \quad C_1 = D_1 = 6C, \quad G_1 = F_{2i}^n + \frac{12C}{m_1} F_{3i}^n,$$

$$A_2 = 6CD_{i+1}^{n+1}, \quad B_2 = 6CD_i^{n+1}; \quad C_2 = -D_2 = m_1 + \frac{12C^2}{m_0} \bar{D}_i^{n+1}, \quad G_2 = F_{4i}^n + \frac{12C}{m_0} F_{1i}^n \bar{D}_i^{n+1}.$$

Система уравнений (16) с краевыми условиями (9) может быть решена методом потоковой прогонки. Однако здесь требуется обсуждение аппроксимации краевых условий по времени. В [16] было показано, что для решения уравнения переноса сохранение третьего порядка аппроксимации по времени требует, чтобы краевое условие было включено в общую схему интегрирования по времени тем же методом Рунге–Кутты. Использование в качестве граничных стадийных величин точных значений функции распределения в соответствующие моменты времени приводило к понижению порядка аппроксимации до второго. В [16] было отмечено, что результаты исследования погрешностей бикompактных схем, построенных на основе неявных схем Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации, согласуются с результатами исследования оптимальных (имеющих минимальную невязку) явных схем Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации [17–18]. Если оптимальную явную схему Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации [17–18] использовать для интегрирования системы ОДУ, то невязка этой схемы на точном решении задачи будет отлична от нуля и иметь порядок точности $O(\tau^3)$. Нет причин думать, что для уравнений квазидиффузии ситуация изменится.

Поэтому сделаем два замечания. Первое. Для HOLO алгоритмов стадийные коэффициенты граничных условий для уравнений квазидиффузии получатся при интегрировании по углам стадийных граничных условий для уравнения переноса. В этом случае при отсутствии зеркального отражения чаще всего получается смешанная краевая задача. Второе. Для тестирования порядка аппроксимации схемы для уравнений квазидиффузии в отрыве от решения уравнения переноса будем рассматривать только либо аналог задачи Дирихле с заданными на обеих границах значениями плотности, либо аналог задачи Неймана с заданными потоками. Смешанную задачу рассматривать не будем. И задача Дирихле, и задача Неймана могут быть приведены к виду, удобному для включения краевого условия в общую схему интегрирования по времени заданным методом Рунге–Кутты.

Рассмотрим задачу Дирихле. Для включения в общую схему интегрирования по времени методом Рунге–Кутты будем использовать вместо условий $U|_{x=0} = U_{ex}|_{x=0}, U|_{x=L} = U_{ex}|_{x=L}$ для величин на разных стадиях метода их дифференциальные следствия по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} U \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial t} U_{ex} \Big|_{x=0}, \quad \frac{\partial}{\partial t} U \Big|_{x=L} = \frac{\partial}{\partial t} U_{ex} \Big|_{x=L}, \quad (17)$$

интегрируемые по тем же формулам Рунге–Кутты, которые используются для интегрирования основной системы. Для приведения граничных условий (17) к виду (9) в базовой неявной схеме Эйлера примем

$$\begin{aligned}\mu_0 = 1, \quad \tau_0 = 0, \quad \eta_0 = U(t, 0) + \Delta t U'_{ex}(t + \Delta t, 0), \\ \mu_{N_x} = 1, \quad \tau_{N_x} = 0, \quad \eta_{N_x} = U(t, L) + \Delta t U'_{ex}(t + \Delta t, L).\end{aligned}\quad (18)$$

Для задачи Неймана при построении схемы считаем заданным на границе поток. В этом случае для сохранения третьего порядка аппроксимации по времени аналогично (17) на границе задаются производные от потока, задаваемые по точному решению, что приводит к значениям для граничных коэффициентов вида:

$$\begin{aligned}\mu_0 = 0, \quad \tau_0 = 1, \quad \eta_0 = W(t, 0) + \Delta t W'_{ex}(t + \Delta t, 0), \\ \mu_{N_x} = 0, \quad \tau_{N_x} = 1, \quad \eta_{N_x} = W(t, L) + \Delta t W'_{ex}(t + \Delta t, L).\end{aligned}\quad (19)$$

Метод потоковой прогонки заключается в перенесении граничных условий вида (9) в каждую внутреннюю точку расчетной области, т.е. будем считать, что в каждой точке i существует связь вида:

$$\mu_i U_i + \tau_i W_i = \eta_i. \quad (20)$$

Тогда для нахождения решения необходимо найти, как $\mu_{i+1}, \tau_{i+1}, \eta_{i+1}$ выражаются через μ_i, τ_i, η_i (прямая прогонка), что позволит учесть первое из двух граничных условий (9), а также необходимо выразить μ_i, τ_i, η_i через $\mu_{i+1}, \tau_{i+1}, \eta_{i+1}$, чтобы было выполнено второе граничное условие (9) (прогонка в обратном направлении). Наличие двух различных связей вида (20) в каждом узле позволяет найти оба узловых значения неизвестных функций U_i, W_i , а потом и восстановить интегральные средние по формулам (15).

Мы рассмотрим следующие два варианта реализации потоковой прогонки.

Вариант 1. Для задачи Дирихле выразим из (20) U_i :

$$U_i = (\eta_i - \tau_i W_i) / \mu_i \quad (21)$$

Это приведет нас к ограничению на значение μ_i , которое не должно быть нулевым. Формулы для $\mu_{i+1}, \tau_{i+1}, \eta_{i+1}$ примут следующий вид:

$$\mu_{i+1} = A_2 - A_1 \frac{\chi_1}{\chi_2}, \quad \tau_{i+1} = C_2 - C_1 \frac{\chi_1}{\chi_2}, \quad \eta_{i+1} = G_2 - B_2 \frac{\eta_i}{\mu_i} - \frac{\chi_1}{\chi_2} \left(G_1 - B_1 \frac{\eta_i}{\mu_i} \right). \quad (22)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\chi_1 = D_2 \mu_i - B_2 \tau_i, \quad \chi_2 = D_1 \mu_i - B_1 \tau_i. \quad (23)$$

Формулы для прогонки в обратном направлении могут быть получены аналогично и запишутся следующим образом:

$$\tilde{\mu}_i = B_2 - B_1 \frac{\phi_1}{\phi_2}, \quad \tilde{\tau}_i = D_2 - D_1 \frac{\phi_1}{\phi_2}, \quad \tilde{\eta}_i = G_2 - A_2 \frac{\tilde{\eta}_{i+1}}{\tilde{\mu}_{i+1}} - \frac{\phi_1}{\phi_2} \left(G_1 - A_1 \frac{\tilde{\eta}_{i+1}}{\tilde{\mu}_{i+1}} \right), \quad (24)$$

где используются обозначения:

$$\phi_1 = C_2 \tilde{\mu}_{i+1} - A_2 \tilde{\tau}_{i+1}, \quad \phi_2 = C_1 \tilde{\mu}_{i+1} - A_1 \tilde{\tau}_{i+1}.$$

Вариант 2. Для задачи Неймана выразим из (20) W_i :

$$W_i = (\eta_i - \mu_i U_i) / \tau_i. \quad (25)$$

Это приведет нас к аналогичному ограничению, но только на значение τ_i , которое также не должно быть нулевым. Формулы для коэффициентов прогонки в этом случае для μ_{i+1}, τ_{i+1} совпадут. Отличаться будет только формула для расчета η_{i+1} :

$$\mu_{i+1} = A_2 - A_1 \frac{\chi_1}{\chi_2}, \quad \tau_{i+1} = C_2 - C_1 \frac{\chi_1}{\chi_2}, \quad \eta_{i+1} = G_2 - D_2 \frac{\eta_i}{\tau_i} - \frac{\chi_1}{\chi_2} (G_1 - D_1 \frac{\eta_i}{\tau_i}) \quad (26)$$

Для коэффициентов прогонки в обратном направлении имеем:

$$\tilde{\mu}_i = B_2 - B_1 \frac{\phi_1}{\phi_2}, \quad \tilde{\tau}_i = D_2 - D_1 \frac{\phi_1}{\phi_2}, \quad \tilde{\eta}_i = G_2 - C_2 \frac{\tilde{\eta}_{i+1}}{\tilde{\tau}_{i+1}} - \frac{\phi_1}{\phi_2} (G_1 - C_1 \frac{\tilde{\eta}_{i+1}}{\tilde{\tau}_{i+1}}) \quad (27)$$

В реальной задаче в каждой конкретной ячейке реализуется либо вариант 1, либо вариант 2 в зависимости от того, какой коэффициент – μ или τ , – больше по абсолютной величине.

Таким образом, на каждом шаге по времени расчет новых значений представляет применение описанного выше метода прогонки для каждой из трех стадий используемого метода Рунге–Кутты.

4. Численные примеры

4.1. Численное тестирование порядка сходимости схемы по пространству и времени при постоянном коэффициенте квазидиффузии: $D = 1/3$

Тест 1. Пусть имеются следующие параметры системы уравнений (3): $\kappa_0 = 0.2$, $\kappa_1 = 0.3$, а отрезки по времени и пространству, на которых будет искаться решение задачи, составляют $x \in [0, 1]$, $t \in [0, \pi]$.

Построим аналитическое решение для системы уравнений (3) следующим образом. Пусть точное выражение для потока

$$W_{ex}(x,t) = \sin(x-t). \quad (28)$$

Положим $Q_1 = 0$, подставим решение для потока излучения во второе уравнение системы (3). Тогда для нахождения плотности излучения мы получаем следующее соотношение:

$$\frac{\partial DU_{ex}}{\partial x} = -\kappa_1 W_{ex} - \frac{\partial W_{ex}}{\partial t}. \quad (29)$$

Отсюда мы найдем, что

$$U_{ex}(x,t) = [\sin(x-t) + \kappa_1 \cos(x-t)] / D. \quad (30)$$

Тогда, подставив (28), (30) в первое уравнение системы (3), мы получим выражение для Q_0 . Начальные условия строятся проекцией точного решения на сетку и вычислением интегральных средних от точного решения в нулевой момент времени.

$$U^0(x) = 3[\sin(x) + \kappa_1 \cos(x)], \quad W^0(x) = \sin(x).$$

Граничные условия выбираются в соответствии с (18) или (19) в зависимости от того, какую величину (плотность или поток) мы считаем заданной на границе.

В табл. I и на рис. 1 представлены результаты работы программы, реализующей описанный выше алгоритм, демонстрирующие третий порядок по времени на серии решений на сгущающихся сетках при фиксированном гиперболическом числе Куранта. N_x – число ячеек в сетке по пространству.

Таблица I.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 1.

N_x	Вариант 1 (задача Дирихле) $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$		Вариант 2 (задача Неймана) $\mu_0 = 0, \tau_0 = 1, \mu_{N_x} = 0, \tau_{N_x} = 1$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-5,50	2,99	-5,83	2,93
100	-6,39	2,99	-6,72	2,97
200	-7,29	3,00	-7,62	2,98
400	-8,19	3,00	-8,51	2,99
800	-9,09	3,00	-9,42	2,97
1600	-10,00		-10,31	

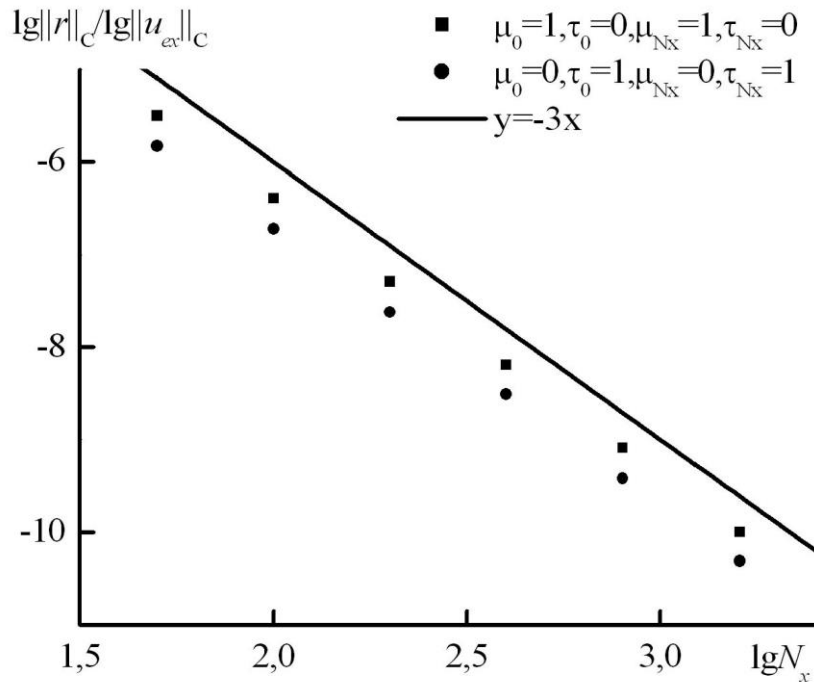


Рис. 1. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 1. Квадраты – задача Дирихле, круги – задача Неймана. Для сравнения проведена прямая с наклоном -3 (порядка аппроксимации по времени).

Для наглядности на рис. 1 проведена прямая с наклоном -3 . При фиксированном числе Куранта сгущение сеток производилось одновременно и по пространству, и по времени в одно и то же число раз, поэтому преобладающей была ошибка по времени.

Для исследования порядка сходимости по пространственной переменной, зафиксируем шаг по времени, положив его равным $\Delta t = 10^{-7}$. В этом случае гиперболическое число Куранта не является постоянным. Результаты расчета данного теста представлены в табл. II и на рис.2. При умеренных шагах пространственной сетки четвертый порядок аппроксимации по пространству достигается. При более мелких пространственных сетках основной вклад начинает вносить ошибка по времени, а для еще более мелких сеток — и ошибки округления. Бикомпактная пространственная аппроксимация не только на единицу выше аппроксимации по времени, но и константа погрешности бикомпактной аппроксимации мала.

Представленные результаты показывают, что заявленные порядки аппроксимации бикомпактной разностной схемы по пространству и времени достигаются.

Таблица II.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по пространству для теста 1 при фиксированном шаге по времени $\Delta t = 10^{-7}$.

N_x	Вариант 1 (задача Дирихле) $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$		Вариант 2 (задача Неймана) $\mu_0 = 0, \tau_0 = 1, \mu_{N_x} = 0, \tau_{N_x} = 1$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-6,96	3,99	-6,89	4,00
100	-8,63	3,93	-8,54	3,99
200	-10,20	3,98	-9,98	3,90
400	-10,03	2,71	-10,61	3,70
800	-12,21	1,90	-12,56	2,69
1600	-12,82		-13,37	

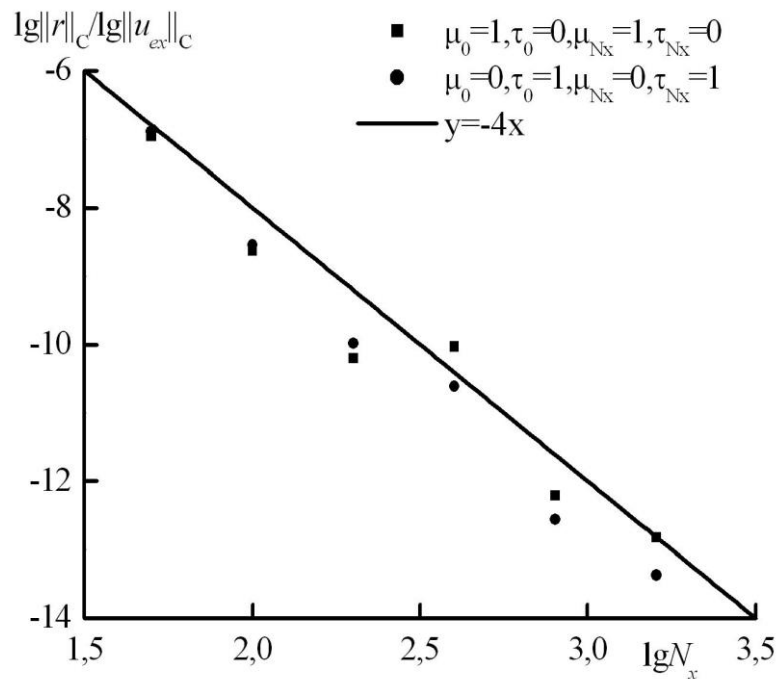


Рис. 2. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при фиксированном шаге по времени $\Delta t = 10^{-7}$ для теста 1. Квадраты – задача Дирихле, круги – задача Неймана. Для сравнения проведена прямая с наклоном -4 (порядка аппроксимации по пространству).

4.2. Построение точных тестов и порядки сходимости схемы при переменном коэффициенте квазидиффузии: $D \neq \text{const}$

Тест 2. Построим точное решение системы (3) по аналогии [3] при переменном коэффициенте квазидиффузии D :

$$D = 1/3 + l(x - x_m)^2, \quad l = \frac{1}{3(x_0 - x_m)^2}, \quad (31)$$

где x_m – середина отрезка, на котором производится рассмотрение, l – нормировочный множитель, позволяющий осуществить переход от диффузионного предела в центре области к преимущественному направлению распространения вдоль оси x на краях, x_0 – начало отрезка, на котором производится рассмотрение задачи.

По-прежнему возьмем $\kappa_0 = 0.2$, $\kappa_1 = 0.3$, и область изменения независимых переменных $x \in [0, 1]$, $t \in [0, \pi]$. Будем конструировать аналитическое решение по той же схеме, что была описана выше для теста 1 в случае $D = \text{const}$. То есть положим $Q_1 = 0$, выберем $W_{ex}(x, t) = \sin(x - t)$ и найдем плотность излучения из (29). Полученное выражение не будет отличаться от (30) с учетом того, что в нем коэффициент квазидиффузии уже будет зависеть от пространственной координаты:

$$U^0(x) = [\sin(x) + \kappa_1 \cos(x)] / [1/3 + l(x - x_m)^2], \quad W^0(x) = \sin(x).$$

Краевые условия строятся в соответствии с (18) или (19).

Результаты работы алгоритма представлены в Таблице III ниже. Как и ожидалось, получен второй порядок сходимости, что является следствием замены интегрального среднего от произведения на произведение интегральных средних.

Тест 3. Применим несколько иной подход к построению точного решения. Пусть снова $\kappa_0 = 0.2$, $\kappa_1 = 0.3$, $x \in [0, 1]$, $t \in [0, \pi]$. На этот раз сначала зададим плотность излучения:

$$U_{ex}(x) = \sin(x - t)$$

Выберем зависимость $D(x)$ в том же виде (31), что и раньше. Найдем поток из следующего соотношения:

$$W = -\frac{1}{\kappa_1} \frac{\partial(DU)}{\partial x} \quad (32)$$

$$W_{ex} = -\kappa_1^{-1} \left((1/3 + l(x - x_m)^2) \cos(x - t) + 2l(x - x_m) \sin(x - t) \right)$$

При этом положим, что

$$Q_1 = \frac{\partial W}{\partial t}, \quad Q_0 = \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} + \kappa_0 U. \quad (33)$$

Начальные и краевые условия ставятся в соответствии с точным решением по формулам (18) или (19).

Порядок сходимости на примере этого теста также представлен в Таблице III. Интересно заметить, что порядок в этом случае (для задачи Неймана) получился несколько ниже теоретического второго, как и в случае теста 1.

Таблица III.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при $D \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для тестов 2 и 3.

N_x	Тест 2 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$		Тест 3 $\mu_0 = 0, \tau_0 = 1, \mu_{N_x} = 0, \tau_{N_x} = 1$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-2,69	2,00	-3,61	1,92
100	-2,94	2,02	-4,15	1,95
200	-3,12	2,00	-4,71	1,98
400	-3,53	2,01	-5,30	2,00
800	-4,55	2,01	-5,89	1,99
1600	-5,27		-6,49	

Тест 4. Построим еще одно аналитическое решение. Как и раньше, возьмем $\kappa_0 = 0.2, \kappa_1 = 0.3$, но теперь $x \in [0, 1], t \in [0, \pi]$. На этот раз приблизим ситуацию к реальной и выберем плотность излучения в виде «шапочки», ширина которой зависит от времени:

$$U_{ex} = 5 - \tanh\left(30e^{-t}(x - x_m)^2\right).$$

Пусть коэффициент квазидиффузии зависит от координаты и задается выражением (31). Найдем вид W_{ex} из (32), а именно:

$$W_{ex} = -\frac{1}{\kappa_1} \left[2l(x - x_m) \left(5 - \tanh(30e^{-t}(x - x_m)^2) \right) - \frac{60e^{-t}(x - x_m)(1/3 + l(x - x_m)^2)}{\cosh^2(30e^{-t}(x - x_m)^2)} \right].$$

Источники Q_0 и Q_1 зададим выражениями (33), как и в предыдущем тесте. В соответствии с приведенными точными решениями выбираются начальные и краевые условия.

В табл. IV и на рис.3 приведены результаты погрешности численного расчета для этого теста.

Таблица IV.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при $D \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 4.

N_x	Тест 4 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
25	-3,11	2,93
50	-4,06	2,60
100	-4,85	2,32
200	-5,49	2,07
400	-6,11	2,00
800	-6,71	2,00
1600	-7,31	

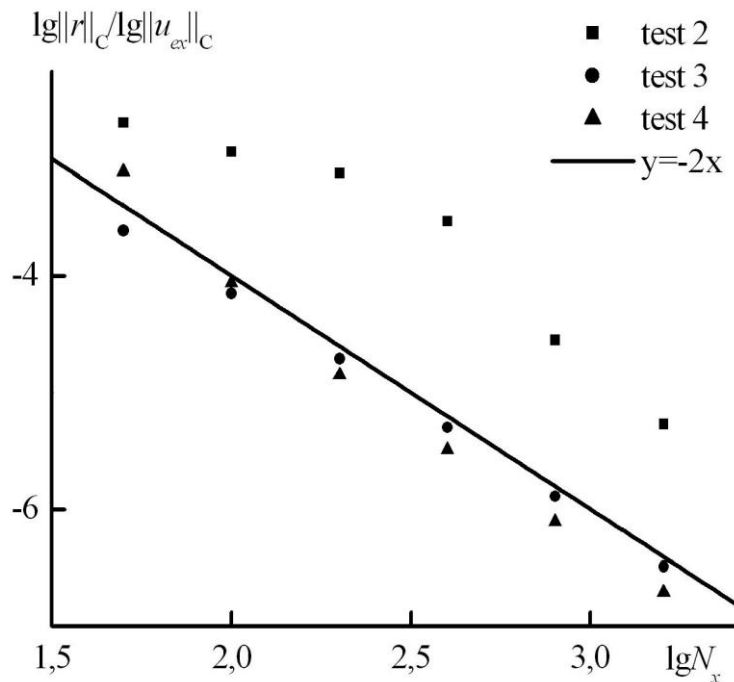


Рис.3. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для тестов 2 (квадраты), 3 (круги) и 4 (треугольники). Для сравнения проведена прямая с наклоном -2 (порядка аппроксимации по пространству при переменных коэффициентах).

Можно видеть, что на не слишком подробных сетках в тесте 4 достигается более высокий порядок схемы, чем теоретический второй. Объяснения этому у авторов нет.

Итерационный процесс для достижения третьего порядка при переменных коэффициентах системы (3) ($D \neq \text{const}$ и $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$)

Как было показано выше, замена интегрального среднего произведением интегральных средних приводит к понижению порядка аппроксимации по пространству до второго. Существует возможность усовершенствовать алгоритм и при помощи итерационного процесса добиться сохранения порядка сходимости метода не ниже третьего. Рассмотренная схема для решения системы уравнений квазидиффузии может быть обобщена на случай, когда коэффициенты поглощения и коэффициент квазидиффузии зависят от пространственных координат: в уравнения (11),(12) помимо \overline{DU} входят также средние $\overline{\kappa_0 u}$ и $\overline{\kappa_1 w}$.

Расчетные формулы для реализации базовой схемы по времени изменятся следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{u}_i^{n+1} - \overline{u}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h}(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) + \overline{\kappa_0 u}_i^{n+1} &= \overline{Q}_{0i}^{n+1}, \\ \frac{(U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) - (U_{i+1}^n - U_i^n)}{\Delta t} + \frac{6}{h}(W_{i+1}^{n+1} - 2\overline{w}_i^{n+1} + W_i^{n+1}) + (\kappa_0 U)_{i+1}^{n+1} - (\kappa_0 U)_i^{n+1} &= Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}, \\ \frac{\overline{w}_i^{n+1} - \overline{w}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h}((DU)_{i+1}^{n+1} - (DU)_i^{n+1}) + \overline{\kappa_1 w}_i^{n+1} &= \overline{Q}_{1i}^{n+1}, \\ \frac{(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) - (W_{i+1}^n - W_i^n)}{\Delta t} + \frac{D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - 2\overline{DU}_i^{n+1} + D_i^{n+1}U_i^{n+1}}{h/6} + (\kappa_1 W)_{i+1}^{n+1} - (\kappa_1 W)_i^{n+1} &= Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}. \end{aligned} \quad (34)$$

Запись системы в компактном виде похожа на (15) с небольшими вариациями (введены средние и узловые значения коэффициентов):

$$\begin{cases} m_0 \overline{u}_i^{n+1} + C(W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) = F_{1i}^n, \\ m_{0i+1} U_{i+1}^{n+1} - m_{0i} U_i^{n+1} + 6C(W_{i+1}^{n+1} + W_i^{n+1}) - 12C\overline{w}_i^{n+1} = F_{2i}^n, \\ m_1 \overline{w}_i^{n+1} + C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - D_i^{n+1}U_i^{n+1}) = F_{3i}^n, \\ m_{1i+1} W_{i+1}^{n+1} - m_{1i} W_i^{n+1} + 6C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} + D_i^{n+1}U_i^{n+1}) - 12C\overline{D}_i^{n+1}\overline{u}_i^{n+1} = F_{4i}^n. \end{cases} \quad (35)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} m_0 &= 1 + \Delta t \overline{\kappa}_0, \quad m_1 = 1 + \Delta t \overline{\kappa}_1, \quad m_{0i} = 1 + \Delta t \kappa_{0i}, \quad m_{1i} = 1 + \Delta t \kappa_{1i}, \\ m_{0i+1} &= 1 + \Delta t \kappa_{0i+1}, \quad m_{1i+1} = 1 + \Delta t \kappa_{1i+1}, \quad C = \Delta t / h, \\ F_{1i}^n &= \Delta t \overline{Q}_{0i}^{n+1} + \overline{u}_i^n; F_{2i}^n = \Delta t(Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}) + (U_{i+1}^n - U_i^n), \\ F_{3i}^n &= \Delta t \overline{Q}_{1i}^{n+1} + \overline{w}_i^n; F_{4i}^n = \Delta t(Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}) + (W_{i+1}^n - W_i^n). \end{aligned}$$

Снова выразим из первого и третьего уравнений \bar{u}_i^{n+1} и \bar{w}_i^{n+1} и подставим во второе и четвертое.

Получим систему уравнений (16), где соответствие обозначениям будет следующим:

$$A_1 = m_{0i+1} + \frac{12C^2}{m_1} D_{i+1}^{n+1}, \quad B_1 = -m_{0i} - \frac{12C^2}{m_1} D_i^{n+1}, \quad C_1 = D_1 = 6C, \quad G_1 = F_{2i}^n + \frac{12C}{m_1} F_{3i}^n,$$

$$A_2 = 6CD_{i+1}^{n+1}, \quad B_2 = 6CD_i^{n+1}, \quad C_2 = m_{1i+1} + \frac{12C^2}{m_0} \bar{D}_i^{n+1},$$

$$D_2 = -m_{1i} - \frac{12C^2}{m_0} \bar{D}_i^{n+1}, \quad G_2 = F_{4i}^n + \frac{12C}{m_0} F_{1i}^n \bar{D}_i^{n+1}.$$

Для решения полученной системы может быть применен метод потоковой прогонки без видоизменений. Пока это схема второго порядка пространственной аппроксимации.

Третьего порядка сходимости можно добиться, пересчитав интегральное среднее в значение в средней точке по формуле Симпсона:

$$\bar{D}_i = (D_i + 4D_{i+1/2} + D_{i+1}) / 6, \quad D_{i+1/2} = 1.5\bar{D} - 0.25(D_i + D_{i+1}),$$

$$\bar{u}_i = (U_i + 4U_{i+1/2} + U_{i+1}) / 6, \quad U_{i+1/2} = 1.5\bar{u}_i - 0.25(U_i + U_{i+1})$$

Тогда

$$\overline{(DU)}_i = (D_i U_i + 4D_{i+1/2} U_{i+1/2} + D_{i+1} U_{i+1}) / 6.$$

Подстановка в последнее равенство выражений для величин в полуцелой точке позволяет получить очевидные, но громоздкие формулы для интегрального среднего от произведения.

Аналогично для произведений коэффициентов поглощения с искомыми функциями получим:

$$\bar{\kappa}_{0i} = (\kappa_{0i} + 4\kappa_{0i+1/2} + \kappa_{0i+1}) / 6,$$

$$\bar{\kappa}_{1i} = (\kappa_{1i} + 4\kappa_{1i+1/2} + \kappa_{1i+1}) / 6,$$

$$\overline{\kappa_0 u}_i = (\kappa_{0i} U_i + 4\kappa_{0i+1/2} U_{i+1/2} + \kappa_{0i+1} U_{i+1}) / 6,$$

$$\overline{\kappa_1 w}_i = (\kappa_{1i} W_i + 4\kappa_{1i+1/2} W_{i+1/2} + \kappa_{1i+1} W_{i+1}) / 6.$$

Тогда с использованием этих равенств представляется возможным организовать итерационные процессы следующим образом:

$$\begin{aligned}
\overline{(DU)}_i^{(s+1)} &= \overline{D}_i^{(s+1)} \overline{u}_i^{(s+1)} + \left(\overline{(DU)}_i^{(s)} - \overline{D}_i^{(s)} \overline{u}_i^{(s)} \right), \\
\overline{\kappa_0 U}_i^{(s+1)} &= \overline{\kappa_0}^{(s+1)} \overline{u}_i^{(s+1)} + \left(\overline{(\kappa_0 U)}_i^{(s)} - \overline{\kappa_0}^{(s)} \overline{u}_i^{(s)} \right), \\
\overline{\kappa_1 W}_i^{(s+1)} &= \overline{\kappa_1}^{(s+1)} \overline{w}_i^{(s+1)} + \left(\overline{(\kappa_1 W)}_i^{(s)} - \overline{\kappa_1}^{(s)} \overline{w}_i^{(s)} \right).
\end{aligned} \tag{36}$$

Это подставляется в систему (12), приводит к изменениям в системе (14), и в конечном итоге выражается в поправке для F_{1i}^n, F_{3i}^n и F_{4i}^n : все величины, рассчитанные на предыдущей итерации, переносятся в правую сторону. Итоговые формулы для этих величин будут выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned}
F_{1i}^n &= \Delta t \overline{Q}_{0i}^{n+1} + \overline{u}_i^n - \Delta t \left(\overline{(\kappa_0 U)}_i^{(s)} - \overline{\kappa_0}^{(s)} \overline{u}_i^{(s)} \right), \\
F_{3i}^n &= \Delta t \overline{Q}_{1i}^{n+1} + \overline{w}_i^n - \Delta t \left(\overline{(\kappa_1 W)}_i^{(s)} - \overline{\kappa_1}^{(s)} \overline{w}_i^{(s)} \right), \\
F_{4i}^n &= \Delta t (Q_{i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}) + (W_{i+1}^n - W_i^n) + 12C (\overline{DU}_i^{(s)} - \overline{D}_i^{(s)} \overline{u}_i^{(s)}).
\end{aligned}$$

Реализация этого алгоритма позволяет достичь третьего порядка аппроксимации по времени с сохранением четвертого порядка по пространству. Причем, оказывается, указанные порядки возможно получить уже за одну итерацию. Это продемонстрировано в таблицах (V-VIII) для следующих тестов:

Тест 5. Пусть коэффициенты поглощения зависят от пространственной координаты следующим образом:

$$\begin{aligned}
\kappa_0 &= A_0 + B \sin x, \quad A_0 = 0.2, B = 0.01, \\
\kappa_1 &= A_1 + B \sin x, \quad A_1 = 0.3.
\end{aligned}$$

Тогда аналог теста 2 примет вид

$$\begin{aligned}
W_{ex}(x, t) &= \sin(x - t) \\
U_{ex}(x, t) &= \frac{[\sin(x - t) + A_1 \cos(x - t) + 0.25B \sin(2x - t) - 0.5Bx \cos(t)]}{[1/3 + l(x - x_m)^2]}
\end{aligned}$$

Краевые условия строятся в соответствии с (18) или (19).

Тесты 6, 7. Возьмем пространственную зависимость коэффициентов поглощения из предыдущего теста. Нетрудно построить аналоги тестов 3 и 4 при переменных коэффициентах системы. Тогда формулы для начальных и граничных условий внешне не изменятся по сравнению с тестами 3 и 4, но в них коэффициент поглощения подразумевается зависящим от пространственной координаты.

Точные решения в тесте 6:

$$U_{ex} = \sin(x - t)$$

$$W_{ex} = -\kappa_1^{-1}(x)[(1/3 + l(x - x_m)^2)\cos(x - t) + 2l(x - x_m)\sin(x - t)]$$

Точные решения в тесте 7:

$$U_{ex} = 5 - \tanh(30e^{-t}(x - x_m)^2)$$

$$W_{ex} = -\frac{1}{\kappa_1(x)}[2l(x - x_m)(5 - \tanh(30e^{-t}(x - x_m)^2)) - \frac{60e^{-t}(x - x_m)(1/3 + l(x - x_m)^2)}{\cosh^2(30e^{-t}(x - x_m)^2)}]$$

Таблица V.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 5 в усовершенствованном алгоритме

N_x	Тест 5, число итераций: 1 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-5,75	3,01
100	-6,65	3,01
200	-7,55	3,00
400	-8,46	3,00
800	-9,36	3,00
1600	-10,26	

Таблица VI.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по пространству при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном шаге по времени $\Delta t = 10^{-7}$ для теста 6 в усовершенствованном алгоритме

N_x	Тест 6, число итераций: 1 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-7,66	4,00
100	-8,95	4,00
200	-10,22	3,98
400	-11,41	3,86
800	-12,94	1,80
1600	-13,79	

Таблица VII.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 6 в усовершенствованном алгоритме

N_x	Тест 6, число итераций: 1 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-4,72	2,91
100	-5,60	2,95
200	-6,49	2,97
400	-7,38	2,98
800	-8,28	2,99
1600	-9,18	

Таблица VIII.

Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для теста 7 в усовершенствованном алгоритме

N_x	Тест 7, число итераций: 1 $\mu_0 = 1, \tau_0 = 0, \mu_{N_x} = 1, \tau_{N_x} = 0$	
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок схемы
50	-4,10	3,18
100	-5,06	3,09
200	-5,90	2,86
400	-6,76	2,94
800	-7,65	2,98
1600	-8,55	

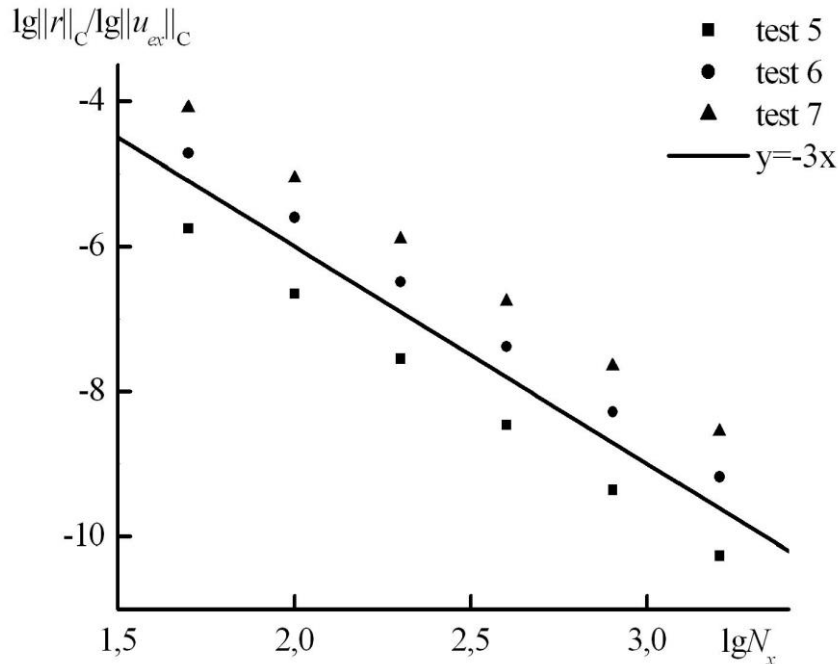


Рис. 4. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном гиперболическом числе Куранта $C = 0.5\pi$ для тестов 5 (квадраты), 6 (круги) и 7 (треугольники) в усовершенствованном алгоритме. Для сравнения проведена прямая с наклоном -3 (порядка аппроксимации по времени).

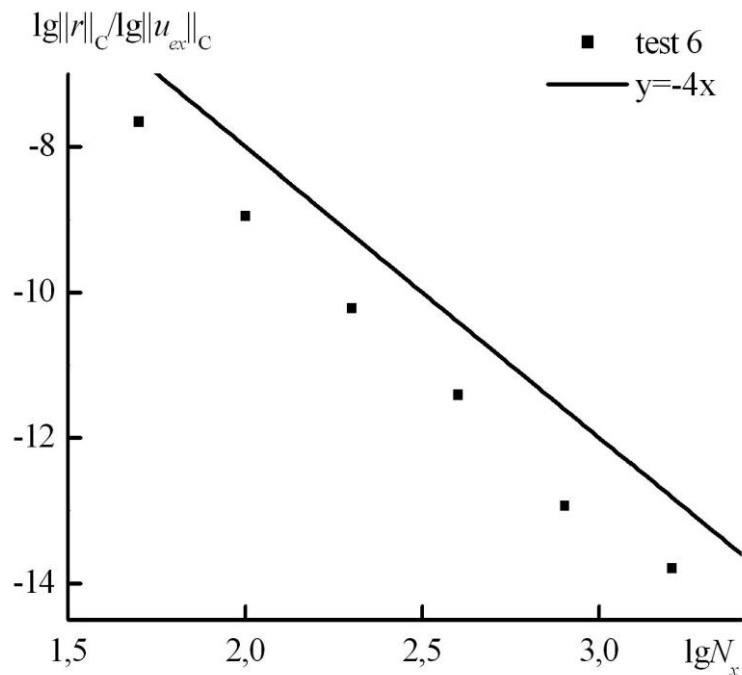


Рис. 5. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при $D \neq \text{const}$, $\kappa_{0,1} \neq \text{const}$ и фиксированном шаге по времени $\Delta t = 10^{-7}$ для теста 6 в усовершенствованном алгоритме. Для сравнения проведена прямая с наклоном -4 (порядка аппроксимации по пространству).

5. Заключение

В данной работе построены бикомпактные схемы для системы уравнений квазидиффузии, обладающие четвертым порядком аппроксимации по пространству и третьим по времени. Данные схемы построены по аналогии с бикомпактными схемами, предложенными Б.В.Роговым для численного решения уравнения переноса. Более того, построенные схемы являются кинетически-согласованными с бикомпактными схемами для уравнения переноса, т.е. могут быть получены применением квадратур по углам непосредственно к схеме для уравнения переноса. Такое привлекательное свойство схемы является следствием аппроксимации на минимальном двухточечном шаблоне по каждой из независимых переменных. Было показано, что если рассматривать аппроксимацию системы уравнений квазидиффузии независимо от уравнения переноса, то в случае переменного в пространстве коэффициента квазидиффузии четвертый порядок аппроксимации по пространству достижим в итерационном процессе, и ожидается, что при совместном решении уравнения переноса и системы уравнений квазидиффузии в рамках единого HOLO алгоритма специальный итерационный процесс для этого не понадобится. Аналогичный процесс можно применить в случае переменного в пространстве коэффициента поглощения. Это важно при включении в схему расчета уравнений газовой динамики. Базовой схемой для реализации метода Рунге–Кутты по времени является неявная схема Эйлера. Решение краевой задачи при реализации базовой схемы строится экономичным методом потоковой прогонки.

Литература

1. *M.L.Adams, E.W.Larsen*, Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // *Progress in Nuclear Energy*, 2002, vol. 40, # 1, pp. 3–159.
2. *L. Chacón, G. Chen, D.A. Knoll, C. Newman, H. Park et al.* Multiscale high-order/low-order (HOLO) algorithms and applications // *J. Comp. Phys.*, Feb. 2017, v.330, p. 21–45.
3. *W.A.Wiesequist, D.Y.Anistratov, J.E.Morel*, A cell-local finite difference discretization of the low order of the quasidiffusion equations for neutral particle transport on unstructured quadrilateral meshes // *J. Comp. Phys.*, 273 (2014), 343–357.
4. *В.Я.Гольдин*. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*, 1964, т.4, №6, с.1078–1087.
<http://mi.mathnet.ru/rus/zvmmf/v4/i6/p1078>
<http://mi.mathnet.ru/zvmmf7676>
V.Ya.Gol'din. A quasi-diffusion method of solving the kinetic equation // *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, V. 4, # 6, 1964, p. 136–149.

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0041555364900850?via%3Dihub>

5. *В.Я.Гольдин*. О математическом моделировании задач сплошной среды с неравновесным переносом. // Современные проблемы математической физики и вычислительной математики – М.: Наука, 1982, 340с.
V.Ya.Gol'din. O matematicheskom modelirovanii zadach sploshnoi sredy s neravnovesnym perenosom // Sovremennye problemy matematicheskoi fiziki i vychislitelnoi matematiki – М., Nauka, 1982, 340p.
6. *E.N.Aristova*. Simulation of radiation transport in channel on the basis of quasi-diffusion method // Transport Theory and Statistical Physics, v.37, (2008), #05-07, p. 483–503.
7. *Е.Н.Аристова, Д.Ф.Байдин*. Экономичность методов квазидиффузии расчета критических параметров быстрого реактора // Математическое моделирование, т. 24, (2012), № 4, стр. 129–136.
<http://mi.mathnet.ru/mm3264>
E.N.Aristova, D.F. Baydin. Efficiency of Quasi_Diffusion Method for Calculating Critical Parameters of a Fast Reactor // Mathematical Models and Computer Simulations, 2012, Vol. 4, No. 6, pp. 568–573.
<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048212060026>
8. *Е.Н.Аристова, Д.Ф.Байдин*. Реализация метода квазидиффузии для расчета критических параметров реактора на быстрых нейтронах в трехмерной гексагональной геометрии // Математическое моделирование, т. 24, (2012), № 8, стр.65–80.
<http://mi.mathnet.ru/mm3301>
E.N.Aristova, D.F. Baydin. Implementation of the Quasi Diffusion Method for Calculating the Critical Parameters of a Fast Neutron Reactor in 3D Hexagonal Geometry // Mathematical Models and Computer Simulations, 2013, Vol. 5, No. 2, pp. 145–155.
<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048213020026>
9. *Б.В.Рогов, М.Н.Михайловская*. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // ДАН, 2011, т.436, №5, с.600–605.
B. V. Rogov, M. N. Mikhailovskaya. Monotone Bicomact Schemes for a Linear Advection Equation // Doklady Mathematics. 2011. V. 83, No. 1. P.121–125.
<https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562411010273>
10. *Б.В.Рогов, М.Н.Михайловская*. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2011, т.23, №6, с.98-110.
<http://mi.mathnet.ru/mm3122>
B. V. Rogov, M. N. Mikhailovskaya. Monotonic bicomact schemes for linear transport equations // Mathematical Models and Computer Simulations, 2012, Vol. 4, # 1, pp 92–100.
<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048212010103>

11. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации для гиперболических уравнений // ДАН, 2010, т.430, №4, с.470-474.
B. V. Rogov, M. N. Mikhailovskaya. Fourth-Order Accurate Bicomact Schemes for Hyperbolic Equations // *Doklady Mathematics*. 2010. V. 81, No. 1. P.146–150.
<https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562410010400>
12. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* О сходимости компактных разностных схем // Математическое моделирование, 2008, т.20, №1, с.99-116.
<http://mi.mathnet.ru/mm2141>
B. V. Rogov, M. N. Mikhailovskaya. On the convergence of compact difference schemes // *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2009, V. 1, No. 1, P. 91–104.
<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048209010104>
13. *А.В.Чикиткин, Б.В.Рогов, Е.Н.Аристова.* Высокоточные бикомпактные схемы для многомерного неоднородного уравнения переноса и их эффективная параллельная реализация // Доклады Академии Наук, серия Математика, 2016, т. 469, № 4, с. 1-6.
A. V. Chikitkin, B. V. Rogov, E. N. Aristova. High-Order Accurate Bicomact Schemes for Solving the Multidimensional Inhomogeneous Transport Equation and Their Efficient Parallel Implementation // *Doklady Mathematics*, 2016, Vol. 94, No. 2, pp. 516–521.
14. *М.Д.Брагин, Б.В.Рогов.* Метод итерированной приближенной факторизации операторов высокоточной бикомпактной схемы для систем многомерных неоднородных уравнений гиперболического типа // Доклады РАН, 2017, т.473, №3, с. 263–267.
M.D.Bragin, B.V.Rogov. Iterative Approximate Factorization for Difference Operators of High-Order Bicomact Schemes for Multidimensional Nonhomogeneous Hyperbolic Systems // *Doklady Mathematics*, 2017, V. 95, No. 2, P. 140–143.
<https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562417020107>
15. *Е.Н.Аристова, Б.В.Рогов, А.В.Чикиткин.* Оптимальная монотонизация высокоточной бикомпактной схемы для нестационарного многомерного уравнения переноса // ЖВМ и МФ, 2016, т. 56, № 6, с. 973–988.
<http://mi.mathnet.ru/zvmmf10399>
E.N.Aristova, B.V.Rogov, A.V.Chikitkin. Optimal Monotonization of a High-Order Accurate Bicomact Scheme for the Nonstationary Multidimensional Transport Equation // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2016, Vol. 56, No. 6, pp. 962–976.
<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS0965542516060038>
16. *Е.Н.Аристова, Б.В.Рогов.* О реализации граничных условий в бикомпактных схемах для линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, т. 24, (2012), № 10, стр. 3–14.

<http://mi.mathnet.ru/mm3316>

E.N.Aristova, B.V.Rogov. Boundary conditions implementation in bicomact schemes for the linear transport equation // *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2013, Vol. 5, №3, pp. 199–208.

<https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048213030022>

17. *Е.А. Альшина, Е.М. Закс, Н.Н. Калиткин.* Оптимальные параметры явных схем Рунге-Кутты невысоких порядков // *Математическое моделирование*, 2006, т.18, №2, с.61–71.

<http://mi.mathnet.ru/mm100>

E. A. Alshina, E. M. Zaks, N. N. Kalitkin. Optimalnye parametry yavnyh shem Runge–Kutty nevysokih poruyadkov // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2006, v.18, №2, p.61–71.

18. *Е.А. Альшина, Е.М. Закс, Н.Н. Калиткин.* Оптимальные схемы Рунге-Кутты с первого по шестой порядок точности // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2008, т.48, №3, с.418-429.

<http://mi.mathnet.ru/zvmmf167>

E. A. Alshina, E. M. Zaks, N. N. Kalitkin. Optimal first- to sixth-order accurate Runge-Kutta schemes // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2008, V. 48, №3, pp 395–405.

Оглавление

1. Введение.....	3
2. Постановка задачи и построение бикомпактной схемы для системы уравнений квазидиффузии.....	6
3. Реализация базовой разностной схемы по времени	9
4. Численные примеры.	12
4.1. Численное тестирование порядка сходимости схемы по пространству и времени при постоянном коэффициенте квазидиффузии: $D = 1/3$	12
4.2. Построение точных тестов и порядки сходимости схемы при переменном коэффициенте квазидиффузии: $D \neq \text{const}$	16
5. Заключение	25