

**ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М. В. Келдыша РАН**

На правах рукописи

Волощенко Андрей Михайлович

АДАПТИВНЫЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ И СОГЛАСОВАННАЯ КР1 СХЕМА УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ЗАДАЧАХ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

Специальность 05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва - 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
Глава 1. Адаптивные положительные аппроксимации для уравнения переноса	10
1.1. Постановка краевой задачи для стационарного уравнения переноса	11
1.2. Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в плоской геометрии	15
1.3. Адаптивная WDD и MDS_N схемы для уравнения переноса в плоской геометрии	31
1.4. Адаптивная WLB/QC-WLD схема для уравнения переноса в плоской геометрии	36
1.5. Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в плоской геометрии	41
1.6. Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях	47
1.7. Адаптивная WDD и MDS_N схемы для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях	61
1.8. Адаптивная WLB/QC-WLD схема для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях	65
1.9. Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в одномерных криволинейных геометриях	68
1.10. Линейные консервативные схемы 1-4-ого порядка точности для уравнения переноса в двумерной геометрии.....	78
1.11. Адаптивная WDD схема для уравнения переноса в многомерной криволинейной геометрии	105
1.12. Адаптивная WLB-WLD схема для уравнения переноса в двумерных геометриях ...	114
1.13. Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в двумерных геометриях	116
Глава 2. Согласованная KP1 схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в 1D геометриях.....	124
Введение.....	124
2.1. Итерационная схема KP1 метода.....	125
2.2. KP1 схема ускорения внутренних итерация, согласованная с WDD схемой, для уравнения переноса в 1D геометриях	127
2.3. KP1 схема ускорения для закона рассеяния, определяемого матрицей рассеяния	131
2.4. Оценка спектрального радиуса сходимости KP1 схемы ускорения для закона рассеяния, определяемого матрицей рассеяния	132
2.5. KP1 схема ускорения внутренних итерация, согласованная с WLB-WLD схемой, для уравнения переноса в 1D геометриях.....	134
2.6. Результаты использования согласованной KP1 схема ускорения внутренних итерация для уравнения переноса в 1D геометриях.....	138
Глава 3. KP1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная со взвешенной алмазной схемой, для уравнения переноса в 2D геометриях.	144
Введение.....	144
3.1. Построение KP_1 схемы ускорения внутренних итераций в r, z геометрии.....	146
3.2. ADI метод для решения P_1 системы для ускоряющих поправок	150
3.3. Оценка границ спектра радиальной и аксиальной компонент P_1 оператора.....	154
3.4. Определение оптимальных параметров ADI алгоритма	156
3.5. KP_1 схема ускорения внутренних итераций в x, z и r, ϑ геометриях.....	158
3.6. Численные результаты использования согласованной KP1 схемы в 2D геометрии ...	160
3.7. Обсуждение результатов	166
Глава 4. KP1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная со взвешенной алмазной схемой, для уравнения переноса в 3D геометриях.	168

Введение.....	168
4.1. Построение KP_1 схемы ускорения внутренних итераций в r, ϑ, z геометрии.....	168
4.2. Алгоритм решения P_1 системы для ускоряющих поправок в r, ϑ, z геометрии.....	174
4.3. Оценка границ спектра r, ϑ и z компонент P_1 оператора.....	183
4.4. Определение итерационных параметров циклического МР.....	184
4.5. KP_1 схема ускорения внутренних итераций в x, y, z геометрии.....	187
4.6. Численные примеры использования KP_1 схема ускорения внутренних итераций в 3D геометрии.....	187
4.7. Обсуждение результатов.....	194
Глава 5. KP_1 схема ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической краевой задачи.....	196
Введение.....	196
5.1. KP_1 схема для ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов... 197	197
5.2. KP_1 схема для ускорения внешних итераций по источнику деления при решении подкритических задач.....	202
5.3. Оценка формы спектра для ускоряющих поправок для гомогенной среды.....	203
5.4. Оценка формы спектра для ускоряющих поправок для гетерогенной среды.....	205
5.5. Численные результаты использования KP_1 схемы ускорения внешних итераций.....	206
5.6. Обсуждение результатов.....	212
Глава 6. Разностные аппроксимации и итерационные алгоритмы в задачах переноса заряженного излучения.....	214
Введение.....	214
6.1. Уравнение Больцмана-Фоккера-Планка для заряженных компонент излучения.....	214
6.2. Численный алгоритм решения БФП уравнения с явным учетом ФП членов.....	215
6.3. Неявные аппроксимации членов непрерывного отклонения и замедления БФП уравнения.....	218
6.4. Согласованная KP_1 схема ускорения сходимости внутренних итераций для БФП уравнения.....	221
6.5. Проблема ускорения сходимости внутренних итераций для уравнения переноса электронов.....	222
6.6. Изменения, внесенные в оригинальную версию SEPXS для обеспечения совместной работы с программами РОЗ-6.6/КАСКАД-С/КАТРИН.....	224
6.7. Организация внешних итерационных циклов при расчете электронно-фотонного и адронного каскадов.....	226
6.8. Расчет профилей энерговыделения и депозиции заряда.....	228
6.9. Численные примеры расчета переноса электронно-фотонного каскада.....	229
6.10. Численные примеры расчета переноса адронного каскада.....	234
Глава 7. Распараллеливание вычислений при решении уравнения переноса в 2D и 3D геометриях.....	240
Введение.....	240
7.1. Алгоритм распараллеливания вычислений в 3D S_n программе КАТРИН.....	240
7.2. Алгоритм распараллеливания вычислений в 2D S_n программе КАСКАД-С.....	246
7.3. Обсуждение результатов.....	251
Глава 8. Аппроксимация геометрии и источника задачи при решении уравнения переноса в 2D и 3D геометриях.....	252
Введение.....	252
8.1. Алгоритм конвертации комбинаторного задания геометрии и источника в сеточное представление.....	253
8.2. Алгоритм формирования комбинаторного источника.....	257

8.3. Чувствительность результатов расчёта к параметрам пространственной сетки	262
ПРИЛОЖЕНИЕ. Титульные страницы Аттестационных паспортов для программы КАТРИН.	269
ЛИТЕРАТУРА	270

ВВЕДЕНИЕ

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. За последние годы произошло заметное развитие методов, алгоритмов и расчетных кодов для решения уравнения переноса излучения для различных ядерных приложений, связанное, в первую очередь с бурным развитием вычислительной техники, с появлением возможности рассчитывать прямыми численными методами задачи большой размерности, например, полномасштабные ядерные энергетические реакторы.

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 приближение пространственной гомогенизации, диффузионный или нодальный диффузионный метод, сочетание прямых и нодальных диффузионных методов.

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 исполь-

зовании 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 КВА (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.

Актуальность работы по развитию S_n методики определяется необходимостью проведения большого числа расчетов с заданной точностью и за приемлемые времена (не более 1 суток) на доступной вычислительной технике.

Научная новизна результатов, представленных в диссертации материалов, 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 КВА 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.
- Разработанные алгоритмы реализованы (совместно с соавторами) 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 аттестован Ростехнадзором для расчета реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000.

Практическая ценность полученных результатов состоит в том, что разработанные S_n коды снабжены достаточно полной документацией, позволяющих их использование без участия авторов, снабжены пре- и пост- процессорами, позволяющими проводить расчеты без участия авторов. Они внедрены в основных научных центрах и опытно-конструкторский 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).

Разработанная автором для 2D и 3D геометрий AWDD схема реализована в американской программе PARTISN (Los Alamos National Laboratory, USA).

Личный вклад автора. Все основные результаты, за исключением методика аппроксимации геометрии и источника задачи, основанная 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 КВА 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 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 КВА 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.

Представленные в диссертационной работе материалы сгруппированы в восемь глав.

В первой главе 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, поддерживать приемлемый уровень монотонности, препятствовать появлению грубых ошибок аппроксимации в областях с большими градиентами разностного решения, хорошо сочетаться с алгоритмом 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.

В главах 2, 3 и 4 рассмотрены, соответственно согласованная KP_1 схема ускорения внутренних итераций в 1D, 2D и 3D геометриях. Приведены численные примеры, демонстрирующие эффективность разработанных алгоритмических решений.

В главе 5 рассмотрена КР1 схема ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи.

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

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

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

В Приложении приведены титульные страницы Аттестационных паспортов для программы КАТРИН.

Глава 1. Адаптивные положительные аппроксимации для уравнения переноса

Решение уравнения переноса нейтронов и фотонов во всем объеме активной зоны (АЗ) и радиационной защиты ядерно-энергетической установки (ЯЭУ) является сложной вычислительной задачей, для решения которой применяются как методы Монте-Карло, так и детерминистические методы, такие как S_n метод, метод характеристик и другие. Их применение, как правило, связано с большими вычислительными затратами. Однако, развитие средств вычислительной техники, поддерживающих параллельные вычисления, а также алгоритмов и программ, реализующих вышеуказанные методы, приводит к постепенному уменьшению астрономического времени расчета таких задач при одновременном повышении точности получаемых решений и степени детализации энергетической зависимости сечений и геометрии задачи.

Кроме того, существует ряд подходов, которые позволяют решать задачу переноса нейтронов для небольших фрагментов АЗ (в ячейках, кассетах), такие как метод поверхностных гармоник или метод источников-стоков. Вычислительные затраты при этом существенно уменьшаются.

Существует также обширный класс инженерных подходов для расчета АЗ, основанных, как правило, на том или ином способе пространственной гомогенизации и дальнейшем решении диффузионного уравнения, в том числе, с привлечением нодальных методов, обладающих более высоким порядком точности аппроксимации уравнения диффузии. При этом происходит дальнейшее снижение вычислительных затрат, однако точность расчета, как правило, оказывается не вполне достаточной.

Целью данной работы является разработка варианта S_n метода, и его программной реализации, позволяющих решать с необходимой точностью достаточно широкий класс задач переноса нейтрального и заряженного излучения за приемлемые астрономические времена. Качество получаемых разностных решений существенно зависит от качества разностных схем, используемых для аппроксимации уравнения переноса.

Перечень требований, предъявляемых к разностной схеме для ее успешного использования в S_n программе для аппроксимации уравнения переноса при решении практических задач обычно включает: требование консервативности разностной схемы, 2-ого и более высокого порядка аппроксимации уравнения переноса, возможности использования в многомерной криволинейной геометрии, арифметической простоты алгоритма. Кроме того, разностная схема должна быть положительной, поддерживать приемлемый уровень монотонности рассчитываемых разностных решений, препятствовать появлению грубых ошибок аппроксимации в областях с большими градиентами разностного решения. Кроме того, используемая разностная схема

должна хорошо сочетаться с алгоритмом ускорения итераций по интегралу рассеяния, не препятствовать и существенно не замедлять сходимости итерационного процесса.

В данной главе мы рассмотрим построение и свойства адаптивной взвешенной алмазной (adaptive weighted diamond differencing (AWDD)) схемы [6, 10, 4, 12, 11, 14, 17] 2-ого порядка точности, которая в значительной степени удовлетворяет перечисленным требованиям, а также рассмотрим семейство взвешенных нодальных (weighted linear best/quadratic continues - weighted linear discontinues (WLB/QC-WLD)) схем [27, 26, 28, 4, 32, 34, 35] 2-4-ого порядка точности, как средства для построения адаптивной положительной нодальной схемы высокого порядка точности, обладающей требуемыми свойствами.

Основные алгоритмы, представленные в данной работе, реализованы для одномерных плоской, сферической и цилиндрической геометрий, двумерных x, z , r, z и r, ϑ геометрий и трехмерных x, y, z и r, ϑ, z геометрий в 1D, 2D и 3D S_n программах РОЗ-6.6 [56], КАСКАД-С [57] и КАТРИН [58], включенных в систему программ CNCSN 2009 [60, 61]. Для удобства последующего изложения приведем явный вид уравнения переноса для каждой из перечисленных геометрий.

1.1. Постановка краевой задачи для стационарного уравнения переноса

В данном разделе мы начнем рассмотрение краевой задачи для уравнения переноса с наиболее общего случая 3D r, ϑ, z и x, y, z геометрий, а затем приведем вид уравнения переноса для 2D x, z , r, z и r, ϑ и 1D геометрий, т. е. при появлении дополнительных симметрий решения.

Используя стандартные обозначения, краевую задачу для уравнения переноса нейтрального излучения (нейтроны и фотоны) в 3D r, ϑ, z геометрии можно записать в виде [1, 2, 3, 4]:

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

$$0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{ext}}, \quad 0 \leq \vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_{\text{end}} \leq 2\pi, \quad 0 \leq z_{\text{bot}} = z_0 \leq z \leq z_{\text{top}} = H, \quad q = 1, \dots, Q, \quad (1.1.1)$$

$$\psi^q(r = r_{\text{int}}, \vartheta, z) |_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r) > 0} = f_{\text{int}}^q(\vartheta, z, \vec{\Omega}) + \frac{R_{\text{int}}^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r) < 0} \chi_{\text{int}}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r = r_{\text{int}}, \vartheta, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r = r_{\text{ext}}, \vartheta, z) |_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r) < 0} = f_{\text{ext}}^q(\vartheta, z, \vec{\Omega}) + \frac{R_{\text{ext}}^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_r) > 0} \chi_{\text{ext}}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r = r_{\text{ext}}, \vartheta, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}',$$

$$\psi^q(r, \vartheta, z = z_{\text{bot}}) |_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z) > 0} = f_{\text{bot}}^q(r, \vartheta, \vec{\Omega}) + \frac{R_{\text{bot}}^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z) < 0} \chi_{\text{bot}}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r, \vartheta, z = z_{\text{bot}}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}',$$

$$\begin{aligned}
\psi^q(r, \mathcal{G}, z = z_{top})|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z) < 0} &= f_{top}^q(r, \mathcal{G}, \vec{\Omega}) + \frac{R_{top}^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_z) > 0} \chi_{top}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r, \mathcal{G}, z = z_{top}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \\
\psi^q(r, \mathcal{G} = \mathcal{G}_0, z)|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_g) > 0} &= f_0^q(r, z, \vec{\Omega}) + \frac{R_0^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_g) < 0} \chi_0^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r, \mathcal{G} = \mathcal{G}_0, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \\
\psi^q(r, \mathcal{G} = \mathcal{G}_{end}, z)|_{(\vec{\Omega}\vec{n}_g) < 0} &= f_{end}^q(r, z, \vec{\Omega}) + \frac{R_{end}^q}{2\pi} \int_{(\vec{\Omega}\vec{n}_g) > 0} \chi_{end}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi^q(r, \mathcal{G} = \mathcal{G}_{end}, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \quad (1.1.2)
\end{aligned}$$

Здесь

$$\vec{r} = r\vec{n}_r + z\vec{n}_z, \quad \vec{n}_g = [\vec{n}_z\vec{n}_r], \quad \psi^q(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}) = \int_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}} \psi(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}, E) dE$$

- 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:

$Q = Q_n + Q_\gamma$. Явный вид оператора $(\vec{\Omega}\vec{\nabla})$ для различных геометрий будет конкретизирован ниже. В (1.1.1) $\sigma^q(r, \mathcal{G}, z)$ - полное сечение в q -ой группе, $S^q(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega})$ - правая часть уравнения переноса, состоящая из источника межгрупповых переходов, источника деления и заданного внутреннего источника $F^q(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega})$:

$$\begin{aligned}
S^q(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}) &= \sum_{p=P_{\min}(q)}^{P_{\max}(q)} \sigma_s^{p \rightarrow q}(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}\vec{\Omega}') \psi^p(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \frac{\chi^q}{4\pi} \sum_p \nu \sigma_f^p(r, \mathcal{G}, z) \Phi_0^p(r, \mathcal{G}, z) + \\
&\quad + F^q(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}), \\
\Phi_0^p(r, \mathcal{G}, z) &= \int_{4\pi} \psi^p(r, \mathcal{G}, z, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}, \quad 1 \leq P_{\min}(q) \leq q, \quad q \leq P_{\max}(q) \leq Q. \quad (1.1.3)
\end{aligned}$$

Здесь $\sigma_s^{p \rightarrow q}(r, \mathcal{G}, z, \mu_s)$ - 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 $P_{\min}(q) \leq p < q$, 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 (1.1.2) $f_{int}^q(\mathcal{G}, z, \vec{\Omega})$, $f_{ext}^q(\mathcal{G}, z, \vec{\Omega})$, $f_{bot}^q(r, \mathcal{G}, \vec{\Omega})$, $f_{top}^q(r, \mathcal{G}, \vec{\Omega})$, $f_0^q(r, z, \vec{\Omega})$ и $f_{end}^q(r, z, \vec{\Omega})$; R_{int}^q , R_{ext}^q , R_{bot}^q , R_{top}^q , R_0^q и R_{end}^q ; $\chi_{int}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{ext}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{bot}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{top}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_0^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ и $\chi_{end}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ - граничные источники, коэффициенты отражения и функции, задающие закон отражения, в q -ой группе на левой (внутренней), правой (внешней), нижней и верхней, $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0$ и $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{end}$ грани-

цах области. Предполагается, что функции $\chi_{int}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{ext}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{bot}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_{top}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, $\chi_0^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ и $\chi_{end}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ в уравнении (1.1.2) нормированы следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{(\vec{\Omega}'n_r)>0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_r)<0} d\vec{\Omega}' \chi_{int}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi, & \int_{(\vec{\Omega}'n_r)<0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_r)>0} d\vec{\Omega}' \chi_{ext}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi, \\ \int_{(\vec{\Omega}'n_z)>0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_z)<0} d\vec{\Omega}' \chi_{bot}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi, & \int_{(\vec{\Omega}'n_z)<0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_z)>0} d\vec{\Omega}' \chi_{top}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi. \\ \int_{(\vec{\Omega}'n_g)>0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_g)<0} d\vec{\Omega}' \chi_0^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi, & \int_{(\vec{\Omega}'n_g)<0} d\vec{\Omega} \int_{(\vec{\Omega}'n_g)>0} d\vec{\Omega}' \chi_{end}^q(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') &= 2\pi. \end{aligned}$$

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

$$\sigma_s^{p \rightarrow q}(r, \vartheta, z, \mu_s) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{4\pi} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q}(r, \vartheta, z) P_l(\mu_s). \quad (1.1.4)$$

Наряду с неоднородной краевой задачей (1.1.1)-(1.1.2), 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:

$$S^q(r, \vartheta, z, \vec{\Omega}) = \sum_{p=P_{min}(q)}^{P_{max}(q)} \sigma_s^{p \rightarrow q}(r, \vartheta, z, \vec{\Omega}\vec{\Omega}') \psi^p(r, \vartheta, z, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \frac{\chi^q}{4\pi k_{eff}} \sum_p \nu \sigma_f^p(r, \vartheta, z) \Phi_0^p(r, \vartheta, z). \quad (1.1.5)$$

Приведем явный вид уравнения (1.1.1) для x, y, z и r, ϑ, z трехмерных геометрий. При этом, с целью уменьшения громоздкости приводимых выражений, мы будем, как правило, опускать индекс номера группы.

В r, ϑ, z геометрии уравнение переноса имеет вид [4, 2, 3]:

$$\eta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \mu r \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi} (\eta\psi) + \sigma r\psi(r, \vartheta, z; \mu, \varphi) = rS(r, \vartheta, z; \mu, \varphi), \quad (1.1.6)$$

где ξ , η и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы:

$$\xi = (\vec{\Omega}\vec{n}_r) = \sqrt{1-\mu^2} \cos\varphi, \quad \eta = (\vec{\Omega}\vec{n}_g) = \sqrt{1-\mu^2} \sin\varphi, \quad \mu = (\vec{\Omega}\vec{n}_z) = \cos\theta, \quad (1.1.7)$$

который изменяется в пределах единичной сферы (восьми октантов): $-1 \leq \xi, \mu, \eta \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$;

переменные r , ϑ и z изменяются в пределах: $0 \leq r_{int} \leq r \leq r_{ext}$, $0 \leq \vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_{end} \leq 2\pi$,

$0 \leq z_{bot} \leq z \leq z_{top} = H$;

$$S(r, \vartheta, z; \mu, \varphi) = \int_0^\pi d\varphi' \int_{-1}^1 d\mu' \sigma_s(r, \vartheta, z; \mu_s) \psi(r, \vartheta, z; \mu', \varphi') + f(r, \vartheta, z; \mu, \varphi),$$

$$\mu_s = \vec{\Omega}\vec{\Omega}' = \mu\mu' + \sqrt{1-\mu^2}\sqrt{1-\mu'^2}\text{Cos}(\varphi - \varphi'). \quad (1.1.8)$$

Здесь μ_s - угол рассеяния, $f(r, \vartheta, z; \mu, \varphi)$ - постоянная компонента правой части для данной группы.

В случае индикатрисы рассеяния, заданной в P_L приближении (1.1.4), для упрощения интеграла рассеяния можно воспользоваться теоремой сложения для полиномов Лежандра [5]:

$$P_l(\mu_s) = P_l(\mu)P_l(\mu') + 2\sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu)P_l^m(\mu')\text{Cos}(m(\varphi - \varphi')). \quad (1.1.9)$$

Это дает:

$$S(r, \vartheta, z; \mu, \varphi) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\mu, \varphi) \Phi_l^m(r, \vartheta, z) + f(r, \vartheta, z; \mu, \varphi), \quad (1.1.10)$$

где $Y_l^m(\mu, \varphi)$ - сферические гармоники:

$$Y_l^m(\mu, \varphi) = \left[(2 - \delta_{0,m}) \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\mu) \begin{cases} \sin |m|\varphi, & m = -l, -l+1, \dots, -1 \\ \cos m\varphi, & m = 0, 1, \dots, l \end{cases}, \quad l = 0, 1, \dots, \quad |m| \leq l, \quad (1.1.11)$$

$\Phi_l^m(r, \vartheta, z)$ - угловые моменты потока:

$$\Phi_l^m(r, \vartheta, z) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\mu Y_l^m(\mu, \varphi) \psi(r, \vartheta, z; \mu, \varphi). \quad (1.1.12)$$

Отметим также, что

$$\psi(r, \vartheta, z; \mu, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{(2l+1)}{4\pi} \Phi_l^m(r, \vartheta, z) Y_l^m(\mu, \varphi), \quad (1.1.13)$$

Для граничных направлений $\varphi = \pi$ и $\varphi = 2\pi$, используемых для организации расчета ячеек в r, ϑ, z геометрии, уравнение (1.1.6) имеет вид:

$$\mu r \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \left[\frac{\partial}{\partial r} (r\psi) - \psi \right] + \sigma r \psi(r, z, \mu, \varphi) = rS(r, z, \mu, \varphi). \quad (1.1.14)$$

В x, y, z геометрии уравнение переноса имеет вид [4, 2, 3]:

$$\xi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y} + \mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \sigma \psi(x, y, z; \theta, \varphi) = S(x, y, z; \theta, \varphi), \quad (1.1.15)$$

$$x_{\text{left}} \leq x \leq x_{\text{right}}, \quad y_{\text{front}} \leq y \leq y_{\text{back}}, \quad z_{\text{bot}} \leq z \leq z_{\text{top}},$$

где ξ , η и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы:

$$\xi = (\vec{\Omega}\vec{n}_x) = \sqrt{1-\mu^2}\text{Cos}\varphi, \quad \eta = (\vec{\Omega}\vec{n}_y) = \sqrt{1-\mu^2}\text{Sin}\varphi, \quad \mu = (\vec{\Omega}\vec{n}_z) = \text{Cos}\theta, \quad (1.1.16)$$

которые изменяется в тех же пределах, что и в случае r, ϑ, z геометрии: $-1 \leq \xi, \eta, \mu \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Правую часть $S(x, y, z; \theta, \varphi)$ уравнения (1.1.15) можно представить в виде, аналогичном случаю r, ϑ, z геометрии (см. уравнения (1.1.8), (1.1.10)) с заменой $r \rightarrow x$ и $\vartheta \rightarrow y$.

1.2. 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:

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \sigma \psi(x, \mu) = S(x, \mu), \quad (1.2.1)$$

где $\mu = \text{Cos}\theta = (\vec{\Omega} \vec{n}_x)$, $\vec{\Omega}$ - направляющий вектор скорости частицы, $-1 \leq \mu \leq 1$; пространственная переменная x изменяются в пределах: $x_0 \leq x \leq x_h$. Правая часть $S(x, \mu)$ уравнения (1.2.1) имеет вид:

$$S(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} P_l(\mu) \Phi_l(x) + f(x, \mu). \quad (1.2.2)$$

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

$$\Phi_l(x) = 2\pi \int_{-1}^1 P_l(\mu) \psi(x, \mu) d\mu. \quad (1.2.3)$$

Для аппроксимации уравнения переноса (1.2.1) в плоской геометрии введем квадратуру $\{w_m, \mu_m\}$ по углу μ на интервале $-1 \leq \mu \leq 1$, а также разностную сетку по переменной x , покрывающую расчетную область $x_0 \leq x \leq x_h$, и устроенную таким образом, чтобы границы геометрических зон с различными сечениями совпадали с какими-либо границами пространственных интервалов $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, $i = 1, 2, \dots, I$; через x_i обозначим центры интервалов. В целях единообразия записи алгоритмов для углов $\mu_m > 0$ и $\mu_m < 0$, введем следующие величины:

$$\psi_m^\pm = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, m}, \mu_m > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, m}, \mu_m < 0 \end{cases}, \quad x^\pm = \begin{cases} x_{i\pm 1/2}, \mu_m > 0 \\ x_{i\mp 1/2}, \mu_m < 0 \end{cases}, \quad s = \text{sign}(\mu_m), \quad h = \frac{\sigma \Delta x_i}{|\mu_m|}, \quad \Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}. \quad (1.2.4)$$

Интегрируя уравнение (1.2.1) вдоль характеристики в пределах разностной ячейки, получим:

$$\psi_m^+ = \psi_m^- e^{-h} + \frac{1}{\mu_m} \int_{x^-}^{x^+} S_m(x) \exp\left[-\frac{(x^+ - x)\sigma}{\mu_m}\right] dx. \quad (1.2.5)$$

Соотношение (1.2.5) является точным. Использование аппроксимаций источника $S_m(x)$ и, возможно, экспоненты в (1.2.5) может быть использовано при построении разностных схем для уравнения переноса.

При построении консервативных схем для уравнения переноса фундаментальную роль играет выполнение балансных соотношений для разностной ячейки, которые получаются путем интегрирования уравнение (1.2.1) по x на интервале $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ с весом полиномов Лежандра

$p_{i,k}(x)$, ортогональных на этом интервале:

$$p_{i,k}(x) \equiv P_k \left[\frac{2}{\Delta x} (x - x_i) \right], \quad k = 0, 1, \dots, \quad \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} p_{i,k}(x) p_{i,j}(x) dx = \delta_{k,j} \frac{\Delta x}{2k+1}, \quad (1.2.6)$$

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

и пользуясь теоремой сложения [20], стр. 1040:

$$\sum_{j=0}^{k-2} (2k-4j-1) p_{k-2j-1}(z) = P_k'(z), \quad (1.2.7)$$

получим следующую цепочку балансных уравнений (ниже целые индексы опускаются в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$\frac{1}{h} (\psi^+ - \psi^-) + \psi^{(0)} = \frac{S^{(0)}}{\sigma}, \quad (1.2.8)$$

$$\frac{3}{hs} [\psi^+ + \psi^- - 2\psi^{(0)}] + \psi^{(1)} = \frac{S^{(1)}}{\sigma}, \quad (1.2.9)$$

...

$$\frac{(2k+1)}{hs} \left\{ s^{(k+1)} [\psi^+ - (-1)^k \psi^-] - 2 \sum_{j=0}^{k-2} \psi^{(k-2j-1)} \right\} + \psi^{(k)} = \frac{S^{(k)}}{\sigma}, \quad (1.2.10)$$

$$\psi^{(k)} = \frac{(2k+1)}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x) p_{i,k}(x) dx, \quad S^{(k)} = \frac{(2k+1)}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S(x) p_{i,k}(x) dx. \quad (1.2.11)$$

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 (1.2.5) и (1.2.11) в пределах разностной ячейки аппроксимируется своим разложением по полиномам Лежандра (1.2.6):

$$S(x) \cong L(x) = \sum_{k=0}^{n-1} C_k p_{i,k}(x), \quad C_k = L^{(k)} = S^{(k)}. \quad (1.2.12)$$

Данное приближение, сохраняющее n пространственных моментов источника в ячейке, соответствует M_n схеме Вадьянатана [21], имеющей $2n$ -ый порядок точности. При $n = 1$ уравнение (1.2.5) приобретает вид:

$$\psi^+ = \psi^- e^{-h} + \frac{S^{(0)}}{\sigma} (1 - e^{-h}). \quad (1.2.13)$$

Совместно с уравнением баланса нулевого порядка (1.2.8) данное дополнительное уравнение образует step continuous (SC) [22] или M_1 схему 2-ого порядка точности [23, 4]. При $n = 2$ уравнение (1.2.5) приобретает вид:

$$\psi^+ = \psi^- e^{-h} + \frac{S^{(0)}}{\sigma} (1 - e^{-h}) + \frac{2sS^{(1)}}{\sigma} \left[1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{h} \right) (1 - e^{-h}) \right]. \quad (1.2.14)$$

Совместно с уравнениями баланса нулевого и первого порядка (1.2.8) и (1.2.9) данное дополнительное уравнение образует M_2 схему четвертого порядка точности [23, 4]. M_1 и M_2 схемы обладают хорошей точностью, однако не допускают простого обобщения на практически важный случай криволинейной многомерной геометрии. Кроме того, M_2 схема не является положительной [4]. Поэтому вместо M_1 и M_2 схем мы будем рассматривать их аппроксимации, для которых дополнительные уравнения могут быть записаны в виде некоторой линейной комбинации потоков в ячейке, коэффициенты которой не зависят от h , σ и источника. Кроме того, мы ограничимся рассмотрением разностных схем, использующих уравнения баланса не выше первого порядка (1.2.9). Для дальнейшего изложения мы перепишем уравнения баланса нулевого (1.2.8) и первого (1.2.9) порядка в более удобном виде:

$$|\mu|(\psi^+ - \psi^-) + \sigma V \psi^{(0)} = V S^{(0)}, \quad (1.2.15)$$

$$\mu_m \Delta x \left[(\psi^+ + \psi^-) / 2 - \psi^{(0)} \right] + \sigma V^x \psi^x = V^x S^x, \quad (1.2.16)$$

где

$$V = \Delta x, \quad V_i^x = \frac{2}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (x - x_i)^2 dx = \frac{(\Delta x)^2}{6}, \quad \psi \equiv \psi^{(0)}, \quad \psi^x \equiv \psi^{(1)}.$$

1.2.1. Семейство WDD схем в плоской геометрии

Взвешенная алмазная (weighted diamond differencing (WDD)) схема получается путем добавления к уравнению баланса нулевого порядка (1.2.15) следующего дополнительного уравнения [6, 4]:

$$\psi^+ = (1 + P)\psi - P\psi^-, \quad 0 \leq P \leq 1, \quad (1.2.17)$$

Значение веса $P = 1$ отвечает алмазной схеме 2-ого порядка точности, значения $0 \leq P < 1$ и $P = 0$ - взвешенной и шаговой схеме 1-ого порядка точности [23, 24, 4]. Действительно, разлагая входящие в дополнительное уравнение (1.2.17) величины на решении уравнения переноса $\bar{\psi}(x)$ в ряд Тэйлора в точке x_i получим, что уравнение (1.2.17) удовлетворяется с ошибкой:

$$\delta_p = \bar{\psi}^+ - (1+P)\bar{\psi} + P\bar{\psi}^- = (1-P)\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} + (1+P)\frac{(\Delta x)^2}{12}\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial x^2} + O(\Delta x)^3. \quad (1.2.18)$$

Локальные ошибки при определении ψ^+ и ψ при заданной правой части S и входящем потоке $\psi^- = \bar{\psi}^-$: $\varepsilon^+ = \psi^+ - \bar{\psi}^+$, $\varepsilon = \psi - \bar{\psi}$ с учетом того, что точное решение $\bar{\psi}(x)$ удовлетворяет уравнению баланса (1.2.15), могут быть найдены из решения системы:

$$\varepsilon^+ + h\varepsilon = 0, \quad \varepsilon^+ - (1+P)\varepsilon = -\delta_p. \quad (1.2.19)$$

Это дает:

$$\varepsilon^+ = -h\varepsilon, \quad \varepsilon = \delta_p / (1+P+h). \quad (1.2.20)$$

С учетом того, что количество разностных ячеек $I \sim 1/\Delta x$, глобальная ошибка в определении ψ^+ и ψ имеет 2-ой порядок для алмазной схемы и 1-ый порядок для взвешенной схемы. Более подробно этот вопрос рассмотрен в [24, 4].

Исключая из уравнений (1.2.15) и (1.2.17) величину ψ , получим для ψ^+ формулу типа (1.2.13):

$$\psi^+ = \frac{1+P-hP}{1+P+h}\psi^- + \frac{(1+P)h}{1+P+h}\frac{S^{(0)}}{\sigma}. \quad (1.2.21)$$

Сравнение уравнений (1.2.13) и (1.2.21) показывает, что WDD схема эквивалентна M_1 схеме с дополнительной дробно-рациональной аппроксимацией экспоненты:

$$e^{-h} \cong \frac{1+P-hP}{1+P+h} \equiv a_{WDD} \leq 1. \quad (1.2.22)$$

WDD схема может быть интерпретирована как аппроксимация решения в ячейке посредством линейного элемента с разрывом Δ_i^- в точке x^- , величина которого определяется весом P (см. Рис. 1.2.1):

$$\psi(x) = \frac{(x^+ - x)}{s\Delta x}\psi^- + \frac{(x - x^-)}{s\Delta x}\psi^+ = \psi + \frac{2(x - x_i)}{\Delta x}\psi^x, \\ \psi^- = \psi - \Delta_i^-, \quad \Delta_i^- = (1-P)(\psi - \psi^-), \quad \psi = (\psi^- + \psi^+)/2, \quad \psi^x = s(\psi^+ - \psi^-)/2. \quad (1.2.23)$$

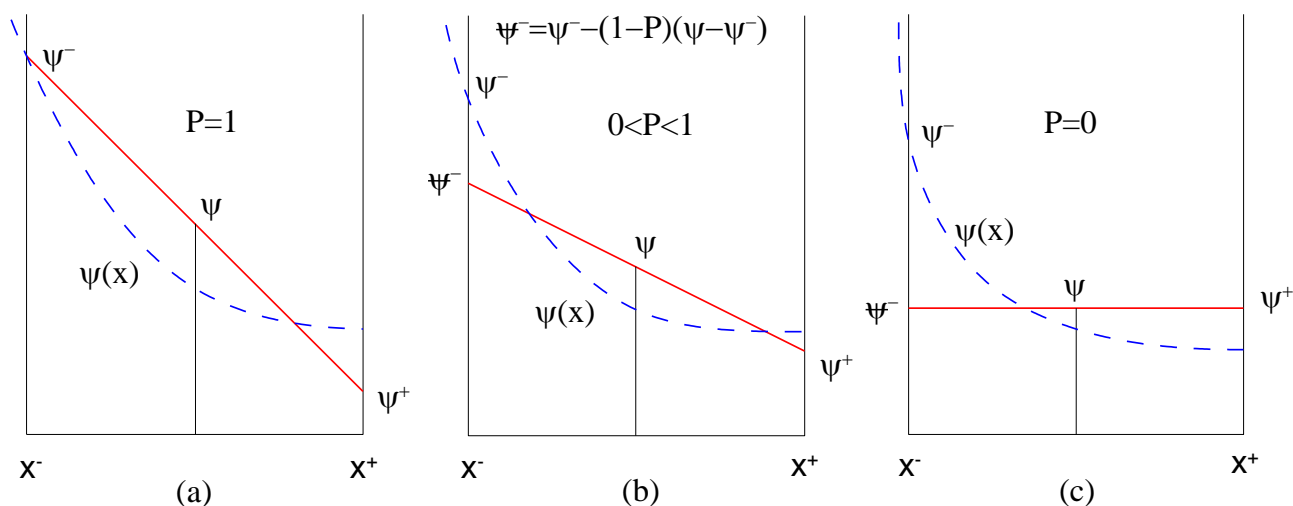


Рисунок 1.2.1. Геометрическая интерпретация WDD схемы

Точное решение уравнения (1.2.1) обладает свойствами положительности и монотонности. Первое следует из интегрального соотношения (1.2.5).

Путем соответствующего выбора веса P в дополнительном уравнении (1.2.17) можно обеспечить положительность WDD схемы, когда при неотрицательных входящем угловом потоке и источнике:

$$\psi^- \geq 0, S \geq 0 \quad (1.2.24)$$

полученное решение в ячейке также неотрицательно:

$$\psi^+ \geq 0, \psi \geq 0. \quad (1.2.25)$$

Величина ψ положительна при всех допустимых значениях веса P :

$$\psi = \frac{1+P}{1+P+h} \psi^- + \frac{h}{1+P+h} \frac{S^{(0)}}{\sigma}. \quad (1.2.26)$$

Неотрицательность величины ψ^+ , как это следует из (1.2.21), заведомо имеет место при $0 \leq P \leq 1$ если $h \leq 2$ и при $P \leq 1/(h-1)$ если $h > 2$.

Под монотонностью мы будем понимать следующее свойство уравнения (1.2.1): при монотонно изменяющейся правой части и соответствующих граничных условиях решение также является монотонной функцией. Действительно, пусть, например $\mu > 0$. Интегрируя уравнение (1.2.1) вдоль характеристики в пределах $[x_0, x]$, получим:

$$\psi(x) = B(x) + [\psi(x_0) - B(x_0)] \exp\left(-\int_{x_0}^x \frac{\sigma(x) dx}{\mu}\right) - \int_{x_0}^x B'(\bar{x}) \exp\left(-\int_{\bar{x}}^x \frac{\sigma(x) dx}{\mu}\right) d\bar{x}, \quad B(x) = \frac{S(x)}{\sigma(x)}, \quad (1.2.27)$$

откуда при $\psi(x_0) \leq B(x_0)$ для неубывающих $B(x)$ с учетом (1.2.1) следует, что $\psi(x)$ также является неубывающей функцией, ограниченной сверху функцией $B(x)$, а при $\psi(x_0) \geq B(x_0)$ для невозрастающих $B(x)$, $\psi(x)$ - невозрастающая функция, $\psi(x) \geq B(x)$.

Следуя [18, 4], введем следующее определение монотонности для класса схем, удовлетворяющих балансному уравнению (1.2.15) и дополнительному уравнению, обеспечивающему выполнение следующих условий:

1) Величины ψ^+ и ψ однозначно определяются по заданным значениям ψ^- и S :

$$\psi^+ = \psi^+(\psi, \psi^-), \quad \psi = \psi(\psi^-, S). \quad (1.2.28)$$

2) На постоянном решении разностная схема удовлетворяется тождественно:

$$\text{если } \psi^- = S/\sigma, \text{ то и } \psi = \psi^+ = S/\sigma. \quad (1.2.29)$$

3) Выполнены неравенства:

$$\psi^- < \psi \leq \psi^+, \quad \psi < S/\sigma \quad \text{при } \psi^- < S/\sigma \quad (1.2.30)$$

$$\psi^- > \psi \geq \psi^+, \quad \psi > S/\sigma \quad \text{при } \psi^- > S/\sigma \quad (1.2.31)$$

Лемма 1.2.1 [18]. Неравенства (1.2.30) и (1.2.31) имеют место при выполнении условий 1 и 2, а также неравенств:

$$\frac{\partial \psi^+(\psi, \psi^-)}{\partial \psi^-} \leq 0, \quad \frac{\partial \psi(\psi^-, S)}{\partial \psi^-} > 0. \quad (1.2.32)$$

Лемма 1.2.1 устанавливает удобный критерий выполнения неравенств (1.2.30) и (1.2.31).

Доказательство. В силу уравнения баланса (1.2.15) и предположения (1.2.32) $\psi = \psi(\psi^-, S)$ является возрастающей функцией своих аргументов. Действительно, дифференцируя уравнение (1.2.15) можно получить следующее неравенство:

$$\frac{\partial \psi}{\partial S} = \frac{\partial \psi}{\partial \psi^-} / \frac{\sigma}{h} \left(1 - \frac{\partial \psi^+}{\partial \psi^-} \right) > 0.$$

Рассмотрим, для определенности, случай $\psi^- < S/\sigma$. Выберем граничный поток $\tilde{\psi}^- = S/\sigma$. В этом случае в силу свойства 2) $\tilde{\psi} = S/\sigma$. Уменьшая $\tilde{\psi}^-$ до значения ψ^- при постоянном S из неравенства $(\partial \psi / \partial \psi^-)_{S=Const} > 0$ и свойства 1) получим, что $\psi < S/\sigma$. Аналогично доказывается первое неравенство в (1.2.30). Выберем источник \tilde{S} и граничный поток $\tilde{\psi}^-$ такими, что $\tilde{\psi}^- = \psi = \tilde{\psi}^+ = \tilde{S}/\sigma$. Уменьшая $\tilde{\psi}^-$ до значения ψ^- при постоянном ψ , получим, в силу неравенства $(\partial \psi^+ / \partial \psi^-)_{\psi=Const} \leq 0$, что $\psi^- < \psi \leq \psi^+$.

Определение 1.2.1. Разностная схема, удовлетворяющая уравнению баланса нулевого порядка (1.2.15), монотонна, если из невозрастания последовательности:

$$\psi_{1/2}, B_1^{(0)}, B_2^{(0)}, \dots, B_i^{(0)} \text{ при } \mu > 0 \quad (1.2.33)$$

и неубывания последовательности

$$\psi_{I+1/2}, B_I^{(0)}, B_{I-1}^{(0)}, \dots, B_1^{(0)} \text{ при } \mu < 0 \quad 21 \quad (1.2.34)$$

следует невозрастание разностного решения:

$$\psi_{1/2} \geq \psi_1^{(0)} \geq \psi_{3/2} \geq \psi_2^{(0)} \geq \dots \geq \psi_{I+1/2}, \quad (1.2.35)$$

а из неубывания последовательности (1.2.33) и невозрастания последовательности (1.2.34) следует их неубывание:

$$\psi_{1/2} \leq \psi_1^{(0)} \leq \psi_{3/2} \leq \psi_2^{(0)} \leq \dots \leq \psi_{I+1/2}. \quad (1.2.36)$$

Теорема 1.2.1 [18, 4]. Необходимым и достаточным условием монотонности разностной схемы, удовлетворяющей условиям 1)-3) является выполнение в каждой ячейке неравенства:

$$\left(\psi^- - \frac{S}{\sigma}\right)\left(\psi^+ - \frac{S}{\sigma}\right) \geq 0. \quad (1.2.37)$$

Достаточность. Предположим, например, что $\mu > 0$ и последовательность (1.2.33) не возрастает. Тогда условия $\psi_{1/2} \geq B_1^{(0)} \geq B_2^{(0)}$, согласно неравенствам (1.2.31) и (1.2.37) ведут к неравенствам: $\psi_{1/2} \geq \psi_1^{(0)} \geq \psi_{3/2} \geq B_1^{(0)} \geq B_2^{(0)}$, из которых, в свою очередь следуют аналогичные неравенства для $\psi_2^{(0)}$, $\psi_{5/2}$ и т. д. до $\psi_{I+1/2}$, т. е. цепочка неравенств (1.2.35) справедлива. Аналогичным образом проверяются остальные возможности, указанные в Определении 1.

Необходимость. Предположим далее, что схема монотонна. Пусть, например, $\mu > 0$, последовательность (1.2.33) не возрастает и выполняются неравенства (1.2.35). Пусть далее i номер первой ячейки в которой условие (1.2.37) не выполняется, т. е.:

$$\left(\psi_{i-1/2} - \frac{S_i}{\sigma_i}\right)\left(\psi_{i+1/2} - \frac{S_i}{\sigma_i}\right) < 0, \quad (1.2.38)$$

т. е., $\psi_{i-1/2} > B_i^{(0)}$, и, соответственно, $\psi_{i-1/2} > \psi_i^{(0)} \geq \psi_{i+1/2}$, но в силу неравенства (1.2.38)

$\psi_{i+1/2} < B_i^{(0)}$. Тогда при $B_i^{(0)} = B_{i+1}^{(0)}$ для $i+1$ -ой ячейки $\psi_{i+1/2} < B_{i+1}^{(0)}$ и, соответственно,

$\psi_{i+1/2} > \psi_{i+1}^{(0)} \geq \psi_{i+3/2}$. Эти неравенства не противоречат (1.2.35) только при $\psi_{i+1/2} = \psi_{i+1}^{(0)} = \psi_{i+3/2}$, но

тогда из соотношения баланса (1.2.15) следует, что $B_{i+1}^{(0)} = \psi_{i+1}^{(0)} = \psi_{i+1/2} = B_i^{(0)}$, что противоречит предположению (1.2.38). Аналогично рассматриваются и другие случаи.

Замечание. Согласно Определению 1 понятие монотонности является глобальным понятием, поскольку относится ко всем ячейкам из некоторого интервала изменения x . Тем не ме-

нее, в силу Теоремы 1.2.1 мы будем говорить и о монотонности схемы в i -ой ячейке, если для нее выполняется неравенство (1.2.37).

Полезным является следующий достаточный признак монотонности (немонотонности) схемы, вытекающий из Теоремы 1.2.1.

Следствие 1.2.1. Разностная схема, удовлетворяющая условиям 1)-3) монотонна (немонотонна) если выполняется следующее неравенство:

$$\frac{\partial \psi^+(S, \psi^-)}{\partial \psi^-} \geq 0 \quad \left(\frac{\partial \psi^+(S, \psi^-)}{\partial \psi^-} < 0 \right). \quad (1.2.39)$$

Доказательство этого следствия аналогично доказательству Леммы 1.

Следствие 1.2.2. Монотонная схема, удовлетворяющая условиям 1)-3) неотрицательна.

Это утверждение следует из неравенств (1.2.31) и (1.2.37).

WDD схема принадлежит к рассмотренному нами классу схем, удовлетворяющему условиям 1)-3). В частности, для нее выполняются условия (1.2.32):

$$\left(\frac{\partial \psi^+}{\partial \psi^-} \right)_{\psi=Const} = -P \leq 0, \quad \left(\frac{\partial \psi}{\partial \psi^-} \right)_{S=Const} = \frac{1+P}{1+P+h} > 0. \quad (1.2.40)$$

Из соотношения:

$$\left(\psi^+ - S/\sigma \right) = \frac{1+P-hP}{1+P+h} \left(\psi^- - S/\sigma \right) \quad (1.2.41)$$

и Теоремы 1.2.1 следует, что монотонность WDD схемы имеет место при

$$1+P-hP \geq 0. \quad (1.2.42)$$

Нелинейная положительная экспоненциальная (EM) схема [25], в которой вместо (1.2.17) используется дополнительное уравнение

$$\psi = \sqrt{\psi^- \psi^+}, \quad (1.2.43)$$

также принадлежит рассмотренному классу схем и, следовательно, для нее справедлива Теорема 1.2.1. Условия монотонности EM схемы были исследованы в [18, 4].

Для схем более высокого порядка точности, содержащих наряду с граничными значениями потока ψ^\pm и $\psi^{(0)}$ более высокие пространственные моменты решения $\psi^{(k)}$, $k=1, \dots, n$, определение положительности схемы [4, 32] основывается на выполнении для каждой неотрицательной на интервале $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ функции $\psi(x)$ неравенств:

$$\psi^{(0)} \geq |\psi^{(k)}| / (2k+1), \quad k=1, \dots, n, \quad (1.2.44)$$

следующих из неравенства $|p_k(x)| \leq p_0(x)$ для полиномов Лежандра $p_k(x)$, ортогональных на рассматриваемом интервале (1.2.6). Выполнение для моментов функции $\psi(x)$ неравенств

(1.2.44) означает, что по этим моментам может быть всегда восстановлена неотрицательная функция $\bar{\psi}(x)$ с моментами $\bar{\psi}^{(k)} = \psi^{(k)}$, $k = 0, \dots, n$.

1.2.2. Семейство WLB/QC-WLD схем в плоской геометрии.

Аналогом WDD схемы среди разностных схем для уравнения переноса (1.2.1), удовлетворяющим балансным уравнениям нулевого и первого порядка (1.2.15) и (1.2.16) является weighted linear best/quadratic continuous - weighted linear discontinuous (WLB/QC-WLD) схема, которая получается добавлением к указанным балансным уравнениям следующего дополнительного уравнения [27, 28, 32, 35, 36]:

$$\psi^+ = (1-P)\psi + (Q+P)s\psi^x + P\psi^-, \quad 0 \leq P \leq 1, \quad Q = 1 \text{ или } P = 0, \quad 1/3 \leq Q < \infty, \quad s = \text{sign}(\mu). \quad (1.2.45)$$

Здесь P и Q - весовые коэффициенты схемы. Для LB/QC схемы 4-ого порядка точности [26, 27] $P = Q = 1$. Эта схема для случая плоской геометрии была предложена Ларсеном (неопубликовано). Сходимость и аппроксимация этой схемы для случая плоской геометрии были исследована в работе [26]. Независимо, эта же схема была предложена и исследована для случая плоской и сферической одномерных геометрий в работах [27, 28], в которых для нее было использовано название linear moments (LM). Однако это же название было позднее использовано Ларсеном для обозначения M_2 схемы Вадьянатана [21]. Учитывая, что LM схема может быть интерпретирована либо как наилучшая (в L_2 норме) аппроксимация решения в ячейке линейным элементом [27, 28] (см. ниже Рис. 1.2.2), либо как аппроксимация решения непрерывным квадратичным элементом [41], в данной работе мы будем обозначать ее как LB/QC схема. Для LD схемы $P = 0$, $Q = 1$; для WLB схемы 3-ого порядка точности $0 \leq P < 1$, $Q = 1$; для WLD схемы 2-ого порядка точности $P = 0$, $1/3 \leq Q < \infty$. Мы будем использовать также термин WLD₋ схемы, для обозначения WLD схемы с $1/3 \leq Q < 1$, используемой для коррекции отрицательных потоков на убывающих (в направлении движения частицы) решениях, и WLD₊ схема для WLD схемы с $Q > 1$, используемой для обеспечения положительности схемы на растущих решениях.

Соотношение (1.2.45) - единственно возможное линейное соотношение между величинами ψ^- , ψ^+ , ψ и ψ^x , которое удовлетворяется на постоянном решении, при исключении величин ψ и ψ^x из системы уравнений (1.2.15), (1.2.16) и (1.2.45) приводит к значению коэффициента $a(h)$ перед ψ^- , совпадающему с рациональной аппроксимацией $\exp(-h)$ 2-4-ого порядка точности:

$$a(h) = \frac{6(Q+P) - (3Q+4P-1)h + Ph^2}{6(Q+P) + (3Q+2P+1)h + h^2} \approx e^{-h}, \quad (1.2.46)$$

обеспечивает выполнения неравенства $|a(h)| \leq 1$, необходимого для устойчивости схемы, и не зависит от h , что позволяет использовать его в неоднородной криволинейной геометрии. Для случая WLB схемы ($0 \leq P < 1$, $Q = 1$) соотношение (1.2.45) может быть получено из M_2 схемы при использовании в дополнительном уравнении (1.2.14) аппроксимации экспоненты (1.2.46) с $Q = 1$. Однако, для случая WLD схемы ($P = 0$, $1/3 \leq Q < \infty$) аппроксимация экспоненты (1.2.46) в дополнительном уравнении M_2 схемы приводит к дополнительному уравнению, которое зависит от h [40] и, в отличие от используемого нами дополнительного уравнения WLD схемы, не допускает простого обобщения на практически важный случай многомерной криволинейной геометрии.

Разлагая входящие в дополнительное уравнение (1.2.45) величины на решении уравнения переноса $\bar{\psi}(x)$ в ряд Тэйлора в точке x_i получим, что уравнение (1.2.45) удовлетворяется с ошибкой:

$$\begin{aligned} \delta_{PQ} &= \bar{\psi}^+ - (1-P)\bar{\psi}^{(0)} - (P+Q)s\bar{\psi}^{(1)} - P\bar{\psi}^- = \\ &= \frac{\Delta x}{2}(1-Q)\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{12}(1-P)\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{240}(5+2P-3Q)\frac{\partial^3 \bar{\psi}}{\partial x^3} \end{aligned} \quad (1.2.47)$$

Локальные ошибки при определении ψ^+ и ψ^- при заданной правой части S и входящем потоке $\bar{\psi}^- = \bar{\psi}^-$: $\varepsilon^+ = \psi^+ - \bar{\psi}^+$, $\varepsilon^{(k)} = \psi^{(k)} - \bar{\psi}^{(k)}$, $k = 0, 1$ с учетом того, что точное решение $\bar{\psi}(x)$ удовлетворяет уравнениям баланса (1.2.15) и (1.2.16), могут быть найдены из решения системы [32]:

$$\begin{aligned} \varepsilon^+ + h\varepsilon &= 0, \\ \varepsilon^+ - 2\varepsilon^{(0)} + hs\varepsilon^{(1)}/3 &= 0, \\ \varepsilon^+ - (1-P)\varepsilon^{(0)} - (P+Q)s\varepsilon^{(1)} &= -\delta_{PQ}. \end{aligned} \quad (1.2.48)$$

Это дает:

$$\begin{aligned} \varepsilon^+ = -h\varepsilon^{(0)} = h^2 O(\delta_{PQ}), \quad \varepsilon^{(0)} &= \frac{hs\varepsilon^{(1)}}{3(2+h)} = hO(\delta_{PQ}), \\ s\varepsilon^{(1)} &= \frac{\delta_{PQ}}{P+Q+h(1-P+h)/3(2+h)} = O(\delta_{PQ}). \end{aligned} \quad (1.2.49)$$

С учетом того, что количество разностных ячеек $I \sim 1/\Delta x$, глобальная ошибка в определении ψ^+ и $\psi^{(0)}$ имеет 4-ый порядок для LB/QC схемы, 3-ий порядок для WLB и LD схем и 2-ой порядок для WLD схемы. Ошибка в определении $\psi^{(1)}$ - на порядок больше. Таким образом, имеет

место эффект суперсходимости для величин ψ^+ и $\psi^{(0)}$, которые сходятся быстрее, чем величина $\psi^{(1)}$. Более подробно этот вопрос рассмотрен в [32, 26].

Как показывает теоретический анализ [32] и геометрическая интерпретация WLB/QC-WLD схемы [35], путем соответствующего выбора весовых коэффициентов в дополнительном уравнении (1.2.45) можно обеспечить положительность схемы, когда при неотрицательных входящем угловом потоке и источнике:

$$\psi^- \geq 0, S \geq 0, |S^x| \leq 3S, \quad (1.2.50)$$

полученное решение в ячейке также неотрицательно:

$$\psi^+ \geq 0, \psi \geq 0, |\psi^x| \leq 3\psi. \quad (1.2.51)$$

Это определение положительности, согласно (1.2.44), основывается на неравенстве:

$$|\psi^x| \leq 3|\psi|, \quad (1.2.52)$$

справедливым для любой интегрируемой функции $\psi(x)$, неотрицательной на интервале $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. Отметим, что точные равенства в уравнении (1.2.52) реализуются при $\psi(x) \sim \delta(x - x_{i\pm 1/2})$.

Подстановка дополнительного уравнения (1.2.45) в балансные соотношения (1.2.15) и (1.2.16) приводит к следующей системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ и ψ^x :

$$\begin{aligned} a_{11}\psi + a_{12}\psi^x &= b_1 \\ a_{21}\psi + a_{22}\psi^x &= b_2 \end{aligned}, \quad (1.2.53)$$

где элементы матриц A и B имеют вид:

$$\begin{aligned} a_{11} &= |\mu|(1-P) + \sigma V, & a_{12} &= \mu(Q+P), & a_{21} &= -\mu\Delta x(1+P)/2, & a_{22} &= |\mu|\Delta x(Q+P)/2 + \sigma V^x, \\ b_1 &= VS + (1-P)|\mu|\psi^-, & b_2 &= V^x S^x - \mu\Delta x(1+P)\psi^-/2. \end{aligned} \quad (1.2.54)$$

Решение системы (1.2.53) находится по формулам Крамера. Расчет ячейки с использованием WLB/QC-WLD схемы происходит аналогично случаю WDD схемы. Вначале из решения системы (1.2.53) находятся нулевой и первые пространственные моменты решения в ячейке, а затем по явной формуле (1.2.45) находится выходящий граничный поток ψ^+ .

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. 1.2.2) [27, 28, 35], который для случая $\mu > 0$ имеет вид:

$$\psi(x) = \psi^{(0)} + \frac{2(x-x_i)}{\Delta x} \psi^{(1)} = (\psi_{i-1/2}^- - \Delta_i^-) \frac{(x_{i+1/2} - x)}{\Delta x} + (\psi_{i+1/2}^+ - \Delta_i^+) \frac{(x - x_{i-1/2})}{\Delta x}. \quad (1.2.55)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_{i-1/2} &= \psi_{i-1/2}^+ + \Delta_i^-, & \psi_{i+1/2} &= \psi_{i+1/2}^- + \Delta_i^+, & \psi_{i-1/2}^+ &\equiv \psi(x_{i-1/2} + 0), & \psi_{i+1/2}^- &\equiv \psi(x_{i+1/2} - 0), \\ \Delta_i^+ &= \frac{2P}{(1+P)} \Delta, & \Delta_i^- &= \frac{2}{(1+P)} \Delta, & \Delta &= \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2} + \psi_{i-1/2}) - \psi^{(0)}. \end{aligned} \quad (1.2.56)$$

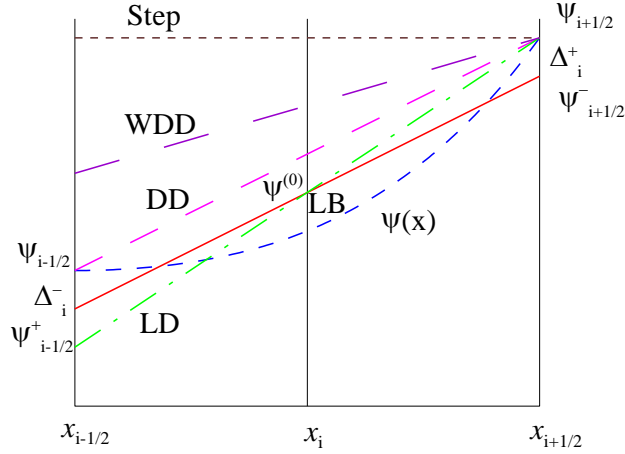


Рисунок 1.2.2. Геометрическая интерпретация Step, WDD, DD и LB схем

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, возможно, более подходящим названием для этой схемы было бы linear best (LB) схема. Возможна и иная интерпретация LB/QC схемы, основанная на аппроксимации потока $\psi(x)$ в ячейке посредством квадратичного полинома, непрерывного в граничных точках ячейки (отсюда альтернативное название quadratic continuous (QC) этой схемы) [41].

Линейная с разрывами на границах ячейки аппроксимация решения (1.2.55) становится неположительной для сильно меняющихся решений, когда $3\psi^{(0)} \geq |\psi^{(1)}| > \psi^{(0)}$. Для обеспечения положительности схемы на сильно убывающих в направлении скорости частицы решениях, для которых $-3\psi^{(0)} \leq s\psi^{(1)} < -\psi^{(0)}$ используется WLD₋ схема 2-ого порядка точности: $P = 0$, $1/3 \leq Q < 1$. При $\mu > 0$ эта схема может быть интерпретирована [35, 36] как аппроксимация $\psi(x)$ в ячейке посредством убывающего составного линейно-постоянного элемента (см. Рис. 1.2.3а) с разрывом Δ_i^- на левой границе ячейки и изломом во внутренней точке $x^* = x_{i+1/2} - \delta\Delta x$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \left[\left[(\psi_{i-1/2} - \Delta_i^-)(x^* - x) + \psi_{i+1/2}(x - x_{i-1/2}) \right] / [(1 - \delta)\Delta x], & x_{i-1/2} < x \leq x^* \\ \psi_{i+1/2}, & x^* \leq x \leq x_{i+1/2} \end{cases},$$

$$\frac{\Delta_i^-}{2} = \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2} + \psi_{i-1/2}) - \psi^{(0)} + \frac{\delta}{1 + \delta(1 - 2\delta)} \psi^{(1)}, \quad \Delta_i^+ = 0, \quad Q = \frac{1}{1 + 2\delta}, \quad \delta = \frac{1 - Q}{2Q}. \quad (1.2.57)$$

Для обеспечения положительности на сильно растущих в направлении скорости частицы решениях, когда $\psi^{(0)} < s\psi^{(1)} \leq 3\psi^{(0)}$, используется WLD_+ схема второго порядка точности с $P = 0$, $Q > 1$. В случае $\mu > 0$ эта схема может быть интерпретирована [35] как аппроксимация потока в ячейке посредством возрастающего составного линейно-постоянного элемента (см. Рис. 1.2.3b) с разрывом Δ_i^- на левой границе ячейки и изломом во внутренней точке

$$x^* = x_{i-1/2} + \delta\Delta x:$$

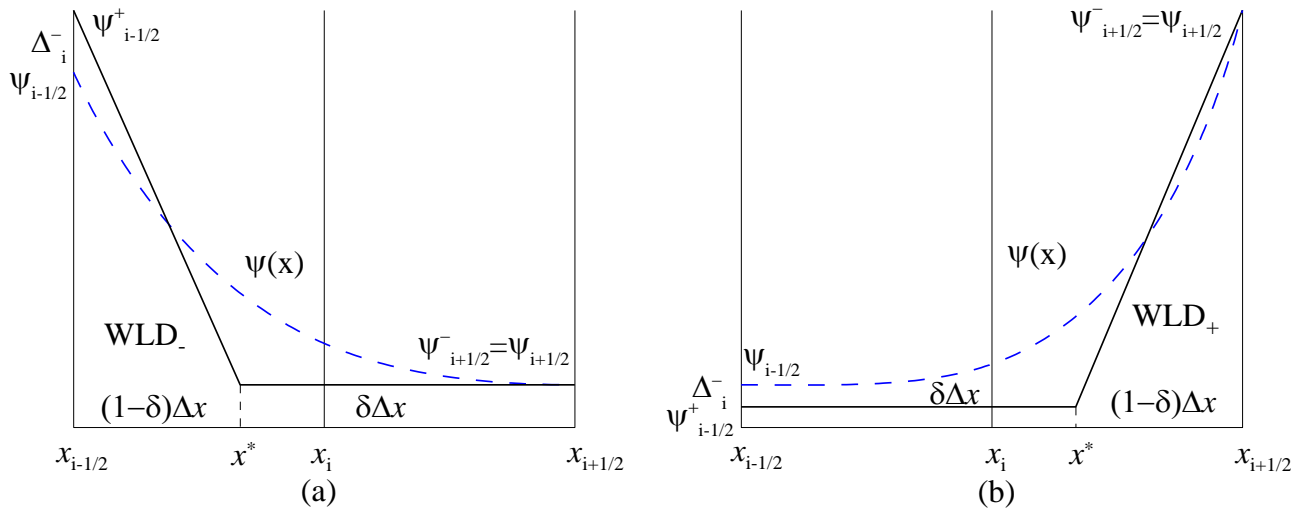


Рисунок 1.2.3. Геометрическая интерпретация: (a) WLD_- и (b) WLD_+ схем

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{i-1/2} - \Delta_i^-, & x_{i-1/2} < x \leq x^* \\ \left[(\psi_{i-1/2} - \Delta_i^-)(x_{i+1/2} - x) + \psi_{i+1/2} (x - x^*) \right] / [(1 - \delta)\Delta x], & x^* \leq x \leq x_{i+1/2} \end{cases},$$

$$\Delta_i^- = \psi_{i-1/2} - \psi^{(0)} + \frac{\psi^{(1)}}{1 + 2\delta}, \quad \Delta_i^+ = 0, \quad Q = \frac{1 + \delta}{(1 - \delta)(1 + 2\delta)}, \quad \delta = \frac{(Q - 1) + \sqrt{(Q - 1)(9Q - 1)}}{4Q}. \quad (1.2.58)$$

Важно отметить, что коэффициент $a(h)$ (1.2.46) при $P = 1$, $Q, h \geq 0$ удовлетворяет неравенству $|a(h)| \leq 1$, что обеспечивает устойчивость WLD схемы.

Проверим, следуя [32], возможность выполнения условий положительности (1.2.51) для $WLB/QC-WLD$ схемы путем выбора весов P и Q из диапазона (1.2.45). Величина $\psi^{(0)} \geq 0$ при всех допустимых значениях весов P и Q :

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{D} \left\{ [6(Q + P) + (1 - P)h] \psi^- + \frac{h^2}{2} \frac{S^+}{\sigma} + \left[3(Q + P)h + \frac{h^2}{2} \right] \frac{S^-}{\sigma} \right\}, \quad S^\pm = S^{(0)} \pm \frac{1}{3} s S^{(1)},$$

$$D = 6(Q + P) + (3Q + 2P + 1)h + h^2 \quad (1.2.59)$$

Справедливы также соотношения:

$$\begin{aligned} \psi^+ = \frac{1}{D} \left\{ \left[6(Q + P) - (3Q + 4P - 1)h + Ph^2 \right] \psi^- + \left[3(Q + P)h + (1 + 2P + 3Q) \frac{h^2}{2} \right] \frac{S^+}{\sigma} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} h \left[6(Q + P) - (3Q + 4P - 1)h \right] \frac{S^-}{\sigma} \right\}, \quad (1.2.60) \end{aligned}$$

$$\psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3} = \frac{1}{D} \left\{ \left[6(Q + P) - 2Ph \right] \psi^- + h(1 + h) \frac{S^+}{\sigma} + (3Q + 4P)h \frac{S^-}{\sigma} \right\}, \quad (1.2.61)$$

$$\psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3} = \frac{1}{D} \left\{ \left[6(Q + P) + 2h \right] \psi^- - h \frac{S^+}{\sigma} + (3Q + 2P + h)h \frac{S^-}{\sigma} \right\}. \quad (1.2.62)$$

Из соотношений (1.2.60) и (1.2.61) следует, что неравенства $\psi^+ \geq 0$ и $\psi^{(0)} + s\psi^{(1)}/3 \geq 0$, соблюдение которых актуально для убывающего решения и источника, выполняются при выполнении неравенства:

$$6(Q + P) - (3Q + 4P - 1)h \geq 0, \quad (1.2.63)$$

которое, в зависимости от значения параметра h , выполняется для следующих значений весов P и Q :

$$0 \leq P \leq \begin{cases} 1, & h \leq 2 \\ (3 - h)/(2h - 3), & 2 < h \leq 3 \end{cases}, \quad Q = 1; \quad \frac{1}{3} \leq Q \leq \begin{cases} 1, & h \leq 3 \\ h/3(h - 2), & h > 3 \end{cases}, \quad P = 0. \quad (1.2.64)$$

Отметим, что неравенство $\psi^{(0)} + s\psi^{(1)}/3 \geq 0$ соблюдается всегда для WLD схемы ($P = 0$).

На сильно растущих решениях и источниках существенно выполнение неравенства $\psi^{(0)} - s\psi^{(1)}/3 \geq 0$. Из соотношения (1.2.62) следует, что в рамках WLD₊ схемы ($P = 0$, $Q > 1$) при $|\psi^-| + |S^-/\sigma| > 0$ путем увеличения веса Q можно всегда добиться выполнения этого неравенства.

При определении понятия монотонности для разностных схем, использующих нулевой и первый пространственные моменты решения и источника следуя [4, 32] мы будем основываться на следующих неравенствах, имеющих место, к примеру, для невозрастающей на интервале $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ функции $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} \psi^{(0)} - \frac{\psi^{(1)}}{3} = \frac{1}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x) (1 - p_1(x)) dx \geq \psi(x_{i-1/2}) = \psi_{i-1/2}, \\ \psi^{(0)} + \frac{\psi^{(1)}}{3} = \frac{1}{\Delta} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x) (1 + p_1(x)) dx \leq \psi(x_{i+1/2}) = \psi_{i+1/2}. \quad (1.2.65) \end{aligned}$$

Следовательно, если функция $\psi(x)$ является невозрастающей на интервале $[x_{1/2}, x_{I+1/2}]$ имеет место следующая цепочка неравенств:

$$\psi_{1/2} \leq \psi_1^{(0)} - \frac{\psi_1^{(1)}}{3} \leq \psi_1^{(0)} \leq \psi_1^{(0)} + \frac{\psi_1^{(1)}}{3} \leq \psi_{3/2} \leq \dots \leq \psi_I^{(0)} + \frac{\psi_I^{(1)}}{3} \leq \psi_{I+1/2}. \quad (1.2.66)$$

В итоге, приходим к следующему обобщению Определения 1 монотонности схемы для рассматриваемого класса схем:

Определение 1.2.2. Разностная схема, удовлетворяющая уравнениям баланса нулевого и первого порядка (1.2.15) и (1.2.16), монотонна, если из невозрастания последовательности:

$$\psi_{1/2}, B_1^-, B_1^{(0)}, B_1^+, B_2^-, B_2^{(0)}, B_2^+ \dots, B_I^-, B_I^{(0)}, B_I^+ \text{ при } \mu > 0, \quad (1.2.67)$$

где $B_i^\pm \equiv B_i^{(0)} \pm B_i^{(1)}/3$ и неубывания последовательности

$$\psi_{I+1/2}, B_I^+, B_I^{(0)}, B_I^-, B_{I-1}^+, B_{I-1}^{(0)}, B_{I-1}^-, \dots, B_1^+, B_1^{(0)}, B_1^- \text{ при } \mu < 0 \quad (1.2.68)$$

следует невозрастание разностного решения:

$$\psi_{1/2}, \psi_1^{(0)} - \frac{\psi_1^{(1)}}{3}, \psi_1^{(0)}, \psi_1^{(0)} + \frac{\psi_1^{(1)}}{3}, \psi_{3/2}, \psi_2^{(0)} - \frac{\psi_2^{(1)}}{3}, \psi_2^{(0)}, \dots, \psi_I^{(0)}, \psi_I^{(0)} + \frac{\psi_I^{(1)}}{3}, \psi_{I+1/2}, \quad (1.2.69)$$

а из неубывания последовательности (1.2.67) при $\mu > 0$ и невозрастания последовательности (1.2.68) следует неубывание разностного решения, т. е. последовательности (1.2.69):

Справедлива следующая теорема, устанавливающая необходимые и достаточные условия монотонности рассматриваемого класса схем.

Теорема 1.2.2 [4, 32]. Необходимым и достаточным условием монотонности разностной схемы для уравнения переноса в плоской геометрии (1.2.1), использующей величины: ψ^\pm , $\psi^{(k)}$ и $B^{(k)} = S^{(k)}/\sigma$, $k = 0, 1$, является выполнение в каждой ячейке следующей последовательности неравенств

$$\psi^- \leq \psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3} \leq \psi^{(0)} \leq \psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3} \leq \psi^+ \leq B^{(0)} - \frac{sB^{(1)}}{3} \quad (1.2.70)$$

при:

$$\psi^- \leq B^{(0)} - \frac{sB^{(1)}}{3}, \quad sB^{(1)} \geq 0 \quad (1.2.71)$$

и альтернативной системы неравенств:

$$\psi^- \geq \psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3} \geq \psi^{(0)} \geq \psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3} \geq \psi^+ \geq B^{(0)} - \frac{sB^{(1)}}{3} \quad (1.2.72)$$

при:

$$\psi^- \geq B^{(0)} - \frac{sB^{(1)}}{3}, \quad sB^{(1)} \leq 0. \quad (1.2.73)$$

Доказательство этой теоремы приведено в [32]. Оно вполне аналогично доказательству теоремы 1.2.1. Воспользовавшись результатами этой теоремы, определим условия, при которых имеет место монотонность WLB/QC-WLD схемы.

Рассмотрим вначале случай убывающего в направлении скорости частицы решения, когда выполняются неравенства (1.2.73) и, согласно (1.2.72), определим значения весов схемы при которых имеет место неположительность величин:

$$s\psi^{(1)}, \left(\psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3}\right) - \psi^-, \psi^+ - \left(\psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3}\right), \left(B^{(0)} + \frac{sB^{(1)}}{3}\right) - \psi^+. \quad (1.2.74)$$

Вводя величину $\pi^- = (B^{(0)} - sB^{(1)}/3) - \psi^-$, получим, что:

$$s\psi^{(1)} = \frac{1}{D} \{3h(1+P)\pi^- + h(2+h)sB^{(1)}\}, \quad (1.2.75)$$

$$\left(\psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3}\right) - \psi^- = \frac{1}{D} \left\{h(3Q+2P-1+h)\pi^- - \frac{2h}{3}sB^{(1)}\right\}, \quad (1.2.76)$$

$$\psi^+ - \left(\psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3}\right) = \frac{1}{D} \left\{(3Q+2P-1-P)h\pi^- + \frac{h}{3}[6(Q+P)-2+(3Q+2P-1)h]sB^{(1)}\right\}, \quad (1.2.77)$$

$$\begin{aligned} \left(B^{(0)} + \frac{sB^{(1)}}{3}\right) - \psi^+ &= \frac{1}{D} \left\{[6(Q+P)-(3Q+4P-1)h+Ph^2]\pi^- + \right. \\ &\left. + [12(Q+P)+2(1-P)h-(3Q+2P-1)h^2]sB^{(1)}/3\right\}, \end{aligned} \quad (1.2.78)$$

Неотрицательность всех коэффициентов перед π^- и $sB^{(1)}$ в уравнениях (1.2.75) - (1.2.78), за исключением коэффициента перед $sB^{(1)}$ в уравнении (1.2.76), достигается при выполнении неравенства [4]:

$$12(Q+P)+2(1-P)h-(3Q+2P-1)h^2 \geq 0. \quad (1.2.79)$$

Для LB схемы это неравенство выполняется при $h \leq \sqrt{6} \cong 2.45$. Для WLD схемы неравенство (1.2.79) совпадает с условием (1.2.63) положительности схемы на убывающих вдоль направления скорости частицы решениях:

$$6Q - (3Q-1)h \geq 0. \quad (1.2.80)$$

Выполнение же неравенства:

$$\left(\psi^{(0)} - s\psi^{(1)}/3\right) - \psi^- \geq 0 \quad (1.2.81)$$

на сильно убывающих решениях путем перехода на WLD. схему ($P=0$, $1/3 \leq Q \leq 1$) и соответствующего уменьшения веса Q , вообще говоря, не гарантируется. Причина этого эффекта связана с возможной немонотонностью функции, аппроксимирующей решение, которая состоит из последовательности аппроксимирующих элементов, обеспечивающих положительность схемы,

но содержащих разрывы на границах ячеек сетки, в которых возможно нарушение монотонности.

Рассмотрим далее случай возрастающего в направлении скорости частицы решения, когда выполняются неравенства (1.2.71) и, согласно (1.2.70), требуется определить значения весов схемы, обеспечивающих неотрицательность величин (1.2.74) при $\pi^- \geq 0$ и $sB^{(1)} \geq 0$. В сущности, эти условия идентичны вышеприведенным для убывающих решений. Однако, поскольку для обеспечения условия положительности схемы в данном случае может использоваться WLD_+ схема с $Q > 1$, выполнение условия (1.2.80), обеспечивающего неотрицательность коэффициентов перед π^- и $sB^{(1)}$ в уравнении (1.2.78) может стать невозможным.

Таким образом, $WLB/QC-WLD$ схема, так же, как и WDD схема при соответствующем выборе весов P и Q позволяет добиться положительности разностного решения, но, в отличие от последней, вообще говоря, не гарантирует монотонности разностного решения в смысле Определения 2.

1.3. Адаптивная WDD и MDS_N схемы для уравнения переноса в плоской геометрии

Алмазная схема не является положительной и монотонной. В гетерогенных задачах на грубых сетках при сильно меняющемся источнике это может приводить к появлению грубых ошибок аппроксимации, проявляющихся в появлении отрицательных потоков и немонотонности разностного решения. Практическим вариантом решения этой проблемы, позволяющим снять указанные дефекты разностного решения, является введение в схему нелинейного элемента - алгоритма коррекции потоков. Существует несколько вариантов алгоритма коррекции потоков для DD схемы.

Одним из первых был предложен так называемый "set to zero fix-up" [22]. В этом алгоритме при расчете ячейки осуществляется проверка положительности экстраполированного потока ψ^+ (1.2.17). Если оказалось, что $\psi^+ < 0$, то ячейка пересчитывается с использованием уравнения $\psi^+ = 0$ в качестве дополнительного уравнения, что соответствует выбору веса $P = \psi^{(0)} / (\psi^- - \psi^{(0)})$ в дополнительном уравнении (1.2.17). В этом случае из уравнения баланса следует, что:

$$\psi^{(0)} = \frac{S^{(0)}}{\sigma} + \frac{\psi^-}{h} \geq 0. \quad (1.3.1)$$

Недостатком этого алгоритма является то, что без коррекции могут остаться ячейки с сильными градиентами решения, в которых имеет место грубая ошибка аппроксимации, одна-

ко, экстраполированный поток ψ^+ остается положительным. Кроме того, в данном алгоритме отсутствует достаточно плавный переход от алмазной к взвешенной схеме, что может повлечь за собой возникновение автоколебательного режима, препятствующего сходимости итераций по интегралу рассеяния. Поэтому в практических расчетах используются более эффективные алгоритмы коррекции: AWDD схема [6, 10, 4, 12, 11, 14, 17], θ -WDD схема [43, 44], Directional θ -WDD (DTW) схема [45, 46].

На наш взгляд, наилучшие результаты дает использование AWDD схемы, поскольку она обеспечивает положительность и приемлемый (регулируемый) уровень монотонности разностного решения, позволяет сохранить второй порядок сходимости интегральных величин, таких, например, как k_{eff} [12], не препятствует сходимости внутренних итераций.

AWDD схема для случая плоской геометрии была предложена Б. Карлсоном [6]. Обобщение этого алгоритма на случай многомерной криволинейной геометрии предложено в работах [10, 4, 11, 14, 17]. Здесь мы изложим обобщенный вариант AWDD схемы, позволяющий осуществлять коррекцию также и взвешенной схемы. Уравнение баланса (1.2.8) может быть переписано в виде:

$$\psi^+ - \psi^- + h'\psi^{(0)} = 0, \quad (1.3.2)$$

где

$$h' = h \left(1 - \frac{S^{(0)}}{\sigma\psi^{(0)}} \right) \quad (1.3.3)$$

это величина, которой можно придать смысл [6] эффективной оптической толщины ячейки, определяющей степень изменения потока в ячейке. Существенно, что по абсолютной величине h' (1.3.3), как правило, меньше, чем h . Значение h' может быть оценено из расчета ячейки по алмазной схеме (в общем случае, по взвешенной алмазной схеме с весом $0 < P_0 \leq 1$):

$$h' \cong h'_{P_0} = (1 + P_0) \left(\frac{\psi^- - \psi_{P_0}^{(0)}}{\psi_{P_0}^{(0)}} \right) \equiv (1 + P_0) u. \quad (1.3.4)$$

Справедливы следующие утверждения.

Теорема 1.3.1. Пусть $\psi^-, S^{(0)} \geq 0$. Тогда, если $P = P_0$ при $u \leq 1/P_0$ и удовлетворяет неравенству $0 \leq P \leq 1/[(1 + P_0)u - 1]$ при $u \geq 1/P_0$, то $\psi^+, \psi^{(0)} \geq 0$.

Действительно, представим выражение (1.2.21) для ψ^+ для WDD схемы в виде:

$$\psi^+ = \frac{(1 + P - h'P)\psi^- - (h - h')P\psi^- + (1 + P)h(S^{(0)}/\sigma)}{1 + P + h}. \quad (1.3.5)$$

Так-как из уравнений (1.3.2) и (1.3.4) следует, что:

$$\left[h - (1 + P_0)u \right] \psi_{P_0}^{(0)} = (h - h') \psi_{P_0}^{(0)} = hS^{(0)}/\sigma, \quad \psi^- = (1 + u) \psi_{P_0}^{(0)},$$

уравнение (1.3.5) может быть переписано в виде:

$$\psi^+ = \frac{(1 + P - (1 + P_0)uP) \psi^- + (1 - Pu)h(S^{(0)}/\sigma)}{1 + P + h}. \quad (1.3.6)$$

Из (1.3.6) следует, что при выполнении условий теоремы $\psi^+ \geq 0$. Положительность величины $\psi^{(0)}$ следует из уравнения (1.2.26).

Можно предложить и другое доказательство этой теоремы. Дополнительное уравнение WDD схемы (1.2.17) можно переписать в виде:

$$\psi^+ = \psi^{(0)}(1 - Pu), \quad u = \frac{\psi^- - \psi^{(0)}}{\psi^{(0)}} \sim -\frac{\partial \psi / \partial x}{\psi}. \quad (1.3.7)$$

При $u > 0$, $P \leq P_0$ имеет место оценка:

$$u(P) = \frac{h(\psi^- - S^{(0)}/\sigma)}{1 + P + h} \leq \frac{1 + P_0}{1 + P} u(P_0). \quad (1.3.8)$$

Соответственно, при $u(P_0) \geq 1/P_0$ выполнение неравенств:

$$1 - Pu \geq 1 - \frac{1 + P_0}{1 + P} Pu(P_0) \geq 0, \quad \text{при } P \leq \frac{1}{(1 + P_0)u(P_0) - 1} \quad (1.3.9)$$

гарантирует выполнение неравенства $\psi^+ \geq 0$.

Теорема 1.3.2. Пусть $\psi^-, S^{(0)} \geq 0$, а b - параметр, $b \geq 1$. Тогда если вес $P = P_0$, $0 < P_0 \leq 1$, при $(1 + P_0)bu \leq 1/P_0$ и удовлетворяет неравенству $P \leq 1/[(1 + P_0)b|u|] = u_0/u'$ где $u_0 \equiv 1/(1 + P_0) \geq 0.5$, $u' \equiv b|u|$, при $(1 + P_0)bu > 1/P_0$, то имеют место следующие оценки для величины ψ^+ :

$$\psi^+ > \left[1 - \frac{1}{(1 + P_0)b} \right] \frac{S^{(0)}}{\sigma} \quad \text{при } \psi^- > \frac{S^{(0)}}{\sigma}, \quad \psi^+ < \left[1 + \frac{1}{(1 + P_0)b} \right] \frac{S^{(0)}}{\sigma} \quad \text{при } \psi^- < \frac{S^{(0)}}{\sigma}. \quad (1.3.10)$$

Действительно, пусть, например, $\psi^- > S^{(0)}/\sigma$ и решение в ячейке убывает. В этом случае:

$$u = (\psi^- - \psi_{P_0}^{(0)})/\psi_{P_0}^{(0)} > 0, \quad \psi^- = (1 + u)\psi_{P_0}^{(0)} > (1 + u)S^{(0)}/\sigma \quad (1.3.11)$$

и из (1.3.6) получаем, что:

$$\psi^+ > \frac{1 + P + h + u - uP \left[(1 + P + h) - (P + (1 - P_0)) + u(1 + P_0) \right]}{1 + P + h} \frac{S^{(0)}}{\sigma}, \quad (1.3.12)$$

а так как $P \leq 1/[(1 + P_0)bu]$, то

$$\psi^+ > \left\{ \left[1 - \frac{1}{(1+P_0)b} \right] + \frac{u \left(1 - \frac{1}{b} \right) + \frac{P+(1-P_0)}{(1+P_0)b}}{1+P+h} \right\} \frac{S^{(0)}}{\sigma} > \left[1 - \frac{1}{(1+P_0)b} \right] \frac{S^{(0)}}{\sigma}. \quad (1.3.13)$$

Аналогично рассматривается случай возрастающего решения, когда $\psi^- < S^{(0)}/\sigma$ и вместо неравенств (1.3.11), (1.3.12) имеют место обратные неравенства, а так как в этом случае

$$P \leq -1/\left[(1+P_0)bu \right], \text{ то}$$

$$\psi^+ < \left\{ \left[1 + \frac{1}{(1+P_0)b} \right] + \frac{u \left(1 + \frac{1}{b} \right) - \frac{P+(1-P_0)}{(1+P_0)b}}{1+P+h} \right\} \frac{S^{(0)}}{\sigma} < \left[1 + \frac{1}{(1+P_0)b} \right] \frac{S^{(0)}}{\sigma}. \quad (1.3.14)$$

Данная теорема устанавливает максимальную возможную величину "выброса" - нарушения монотонности схемы - в зависимости от параметра алгоритма b . Из сравнения уравнений (1.2.38) и (1.3.10) можно сделать вывод, что увеличивая значение параметра b можно улучшить свойства монотонности схемы.

В соответствии с Теоремой 1.3.1, вес P в AWDD схеме вычисляется по следующей формуле:

$$P = \begin{cases} P_0, & |u| \leq u_0, \\ P(|u|), & |u| > u_0, \end{cases} \quad (1.3.15)$$

где u_0 - параметр, $0 < u_0 < 1/P_0$; $P(u)$ - корректирующая ("fix-up") функция, которая выбирается из предположения, что коррекция является «мягкой»:

$$P(u = u_0) = P_0, \quad P'(u = u_0) = 0, \quad (1.3.16)$$

и обеспечивается положительность экстраполяции:

$$0 \leq P(u) \leq 1/\left[(1+P_0)u - 1 \right]. \quad (1.3.17)$$

Теорема 1.3.2 устанавливает дополнительное ограничение на выбор корректирующей функции $P(u)$, а именно, функция $P(u)$ должна удовлетворять неравенствам:

$$0 \leq P(u) \leq \frac{1}{u(1+P_0)} \text{ для } uP_0 > 1/(1+P_0). \quad (1.3.18)$$

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

$$P(u) = \frac{u/(1+P_0) + \beta}{u^2 + \gamma u + \alpha}, \quad \gamma = \frac{1}{P_0(1+P_0)} - 2u_0, \quad \beta = \frac{\gamma}{1+P_0}, \quad \alpha = \frac{\beta}{P_0} + u_0^2, \quad 0 < u_0 \leq \frac{1}{P_0(1+P_0)}. \quad (1.3.19)$$

Два частных случая этой формулы имеют практический интерес:

$$u_0 = \frac{1}{P_0(1+P_0)}, \quad \alpha = 0, \quad \beta = -P_0 u_0^2, \quad \gamma = \beta(1+P_0), \quad P(u) = \frac{1}{u(1+P_0)} = P_0 \frac{u_0}{u} \quad (1.3.20)$$

и

$$u_0 = \frac{1}{2P_0(1+P_0)}, \quad \alpha = u_0^2, \quad \beta = \gamma = 0, \quad P(u) = \frac{1}{(1+P_0)[u + u_0^2/u]}. \quad (1.3.21)$$

Формула (1.3.20) для корректирующей функции наиболее арифметически проста, однако в этом случае требование непрерывности первой производной в точке $u = u_0$ (1.3.16) не соблюдается.

Формула (1.3.21) обеспечивает более «мягкий» алгоритм коррекции. С учетом Теоремы 1.3.2 алгоритм определения веса P (1.3.15) заменяется на следующий:

$$P = \begin{cases} P_0, & U \leq u_0, \\ P(U), & U > u_0, \end{cases} \quad U = b|u|, \quad u = \frac{\psi^- - \psi}{\psi}, \quad (1.3.22)$$

где $b \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной x , $P(U)$ - корректирующая функция.

Реально, в плоской геометрии используется AWDD схема с $P_0 = 1$. В частности, в программе РОЗ-6.6 реализована корректирующая формула (1.3.20) с $P_0 = 1$, $b = 1$, $u_0 = 0.5$. Рассмотренный более общий случай $0 < P_0 \leq 1$ может быть использован для итерационного уточнения выбора веса P , а также нашел применение в 3D r, ϑ, z и x, y, z геометриях.

Для случая $P_0 = 1$ приведем еще один вариант корректирующей функции [10], удовлетворяющей условию положительности экстраполяции (1.3.17):

$$P(u) = \frac{u/(1+P_0) + \beta}{u^2 + \gamma u + \alpha}, \quad \gamma = \frac{1}{P_0(1+P_0)} - 2u_0, \quad \beta = \frac{1 - 2P_0 u_0}{P_0(1+P_0)}, \quad \alpha = \frac{\beta}{P_0} + u_0^2, \quad 0 < u_0 < 1/P_0. \quad (1.3.23)$$

Корректирующая функция (1.3.23) обеспечивает положительность решения и неплохую точность расчета интегральных величин типа k_{eff} , но обладает более слабым монотонизирующим эффектом, чем корректирующая функция (1.3.19), удовлетворяющая неравенству (1.3.18). Частный случай формулы (1.3.23) с $P_0 = 1$, $u_0 = 0.5$:

$$P(u) = \frac{1}{2u - 1 + 0.5/u} \quad (1.3.24)$$

реализован в программе РОЗ-6.6 [56].

AWDD схема, использующая корректирующую функцию $P(u)$, удовлетворяющую условиям Теоремы 1.3.2, обеспечивает монотонизирующий эффект, зависящий от значения параметра b в уравнении (1.3.22), определяющего, в соответствии с уравнением (1.3.10) максимально возможную величину выброса (нарушения монотонности схемы) однако, не обеспечивает полной монотонности схемы.

Необходимое и достаточное условие монотонности схемы (1.2.37), справедливое, в том числе, и для WDD схемы, при наличии информации о местоположении особенностей решения может быть использовано для построения эффективного алгоритма монотонизации - MDS_N схемы [18, 4, 10], который практически снимает возможные нарушения монотонности разностного решения. В этом алгоритме расчет "особых" ячеек, находящихся на входе в зону с существенно изменившимися сечениями/источником (т. е., в ячейках, расположенных непосредственно после пересечения частицей особенности) производится по формуле:

$$\psi^+ = \begin{cases} 2\psi^{(0)} - \psi^-, & (\psi^- - S^{(0)}/\sigma)(\psi^+ - S^{(0)}/\sigma) \geq 0 \\ S^{(0)}/\sigma, & (\psi^- - S^{(0)}/\sigma)(\psi^+ - S^{(0)}/\sigma) < 0 \end{cases}. \quad (1.3.25)$$

Отметим, что для WDD схемы использование дополнительного уравнения $\psi^+ = S^{(0)}/\sigma$ в уравнении (1.3.25) соответствует, с учетом соотношения (1.2.41), переходу к взвешенной схеме с весом $P = 1/(h-1)$. Для обеспечения положительности решения в остальных ячейках используется AWDD схема (например, вариант схемы, использующий корректирующую функцию (1.3.24)).

К сожалению, MDS_N схема является неоднородной, а местоположение существенных особенностей, при пересечении которых целесообразно использовать алгоритм монотонизации, не всегда может быть легко определено.

1.4. Адаптивная WLB/QC-WLD схема для уравнения переноса в плоской геометрии

Прежде всего, отметим, что для обеспечения положительности LB/QC и LD схем может быть предложен алгоритм [4], обобщающий "set to zero fix-up" для DD схемы [22, 4]. После предварительного расчета ячейки по LB/QC схемы проводится последовательная проверка неравенств:

$$\psi^+ \geq 0, \quad 3\psi^{(0)} + s\psi^{(1)} \geq 0, \quad 3\psi^{(0)} - s\psi^{(1)} \geq 0. \quad (1.4.1)$$

Если, например, первое из этих неравенств не выполняется, то ячейка пересчитывается по схеме, в которой уравнение $\psi^+ = 0$ используется в качестве дополнительного уравнения вместо (1.2.45). Аналогично, при нарушении 2-ого неравенства в (1.4.1) пересчет ячейки происходит с использованием дополнительного уравнения $3\psi^{(0)} + s\psi^{(1)} = 0$ и т. д. Существенно, что любой из перечисленных пересчетов обеспечивает положительность решения.

Действительно, предположим, что выполнены условия (1.2.50) и пусть при расчете ячейки по LB/QC схеме оказалось, что $\psi^+ < 0$. Согласно соотношению (1.2.60), это может произойти только если $h > 2$, $sS^{(1)} < 0$. Полагая $\psi^+ = 0$ и $B^{(k)} = S^{(k)}/\sigma$, $k = 0, 1$, получим:

$$\begin{aligned} \psi^{(0)} = B^{(0)} + \frac{\psi^-}{h} \geq 0, \quad \psi^{(0)} + \frac{s\psi^{(1)}}{3} = B^+ + \frac{2B^{(0)}}{h} + \frac{2\psi^-}{h^2} \geq 0, \\ \psi^{(0)} - \frac{s\psi^{(1)}}{3} = B^- - \frac{2B^{(0)}}{h} + \frac{2\psi^-}{h} \left(1 - \frac{1}{h}\right) \geq 0, \quad B^\pm = B^{(0)} \pm \frac{1}{3}sB^{(1)}. \end{aligned} \quad (1.4.2)$$

Пусть далее оказалось, что $\psi^+ \geq 0$, но $3\psi^{(0)} + s\psi^{(1)} < 0$. Полагая в этом случае $s\psi^{(1)} = -3\psi^{(0)}$, получим, что

$$\psi^{(0)} = \frac{\psi^- + hB^-/2}{1+h} \geq 0, \quad \psi^+ = \frac{\psi^- + h(B^{(0)} + hB^+/2)}{1+h} \geq 0. \quad (1.4.3)$$

Наконец, пусть реализовался случай, когда расчет по LB/QC схеме дал $\psi^+ \geq 0$, $3\psi^{(0)} + s\psi^{(1)} \geq 0$, но $3\psi^{(0)} - s\psi^{(1)} < 0$. Согласно (1.2.62) в этом случае:

$$2(6+h)\psi^- + h((5+h)B^- - B^+) < 0. \quad (1.4.4)$$

Используя в качестве дополнительного уравнения $s\psi^{(1)} = 3\psi^{(0)}$ с учетом (1.4.4) получим, что:

$$\psi^{(0)} = \psi^- + hB^-/2 > 0, \quad \psi^+ = \psi^- + h(B^{(0)} - \psi^-) - h^2B^-/2 > 7\psi^- + h(B^{(0)} - B^+/2 + 5B^-/2) > 0.$$

Аналогично рассматривается "set to zero fix-up" алгоритм и для LD схемы. Прежде всего отметим, что для WLD схемы 2-ое из неравенств в (1.4.1) всегда выполняется. Пусть при расчете ячейки по LD схеме оказалось, что $\psi^+ < 0$. Согласно соотношению (1.2.60), это может произойти только если $h > 3$, $sS^{(1)} < 0$. Полагая $\psi^+ = 0$ (такой выбор соответствует значению веса $Q = -\psi^{(0)}/s\psi^{(1)} \geq 1/3$ - получим, что неравенства $\psi^{(0)} \geq 0$ и $3\psi^{(0)} - s\psi^{(1)} \geq 0$, согласно (1.4.2), также соблюдается.

Пусть далее реализовался случай, когда расчет по LD схеме дал $\psi^+ \geq 0$, $3\psi^{(0)} + s\psi^{(1)} \geq 0$, но $3\psi^{(0)} - s\psi^{(1)} < 0$. Согласно (1.2.62) в этом случае:

$$2(3+h)\psi^- + h[(3+h)B^- - B^+] < 0. \quad (1.4.5)$$

Используя в качестве дополнительного уравнения $s\psi^{(1)} = 3\psi^{(0)}$, что соответствует значению $Q = (\psi^+ - \psi^{(0)})/3\psi^{(0)}$, с учетом (1.4.5) получим, что:

$$\psi^{(0)} = \psi^- + hB^-/2 > 0, \quad \psi^+ = \psi^- + h(B^{(0)} - \psi^-) - h^2B^-/2 > 4\psi^- + h(B^{(0)} - B^+/2 + 3B^-/2) > 0.$$

Недостатком этого алгоритма является то, что без коррекции могут остаться ячейки с сильными градиентами решения, в которых имеет место грубая ошибка аппроксимации, однако, условия положительности схемы (1.2.51) оказываются выполненными. Кроме того, в данном алгоритме отсутствует постепенный (т. е. достаточно плавный) переход от LB/QC или LD схемы к взвешенной схеме по мере увеличения первой и второй производных решения, что мо-

жет повлечь за собой возникновение автоколебательного режима, препятствующего сходимости итераций по интегралу рассеяния.

Следуя [32], перепишем дополнительное уравнение WLB/QC-WLD схемы (1.2.45) в виде, аналогичном (1.3.7):

$$\psi^+ = \psi^{(0)}(1 - Qu_1 - Pu_2), \quad (1.4.6)$$

где

$$u_1 = -\frac{s\psi^{(1)}}{\psi^{(0)}} \sim -\frac{\partial\psi/\partial x}{\psi}, \quad u_2 = \frac{\psi^{(0)} - \psi^- - s\psi^{(1)}}{\psi^{(0)}} \sim \frac{\partial^2\psi/\partial x^2}{\psi}. \quad (1.4.7)$$

Аналогично [6] величины u_1 и u_2 в уравнении (1.4.6) могут быть интерпретированы, как эффективные параметры, определяющие степень изменения решения в ячейке. Уравнения баланса нулевого и первого порядка (1.2.8) и (1.2.9) могут быть переписаны в виде:

$$\frac{\psi^+ - \psi^-}{\psi^{(0)}} = -(1+Q)u_1 + (1-P)u_2 = -h\left(1 - \frac{S^{(0)}/\sigma}{\psi^{(0)}}\right) = -2u_1^{LB}, \quad (1.4.8)$$

$$3\frac{\psi^+ + \psi^- - 2\psi^{(0)}}{\psi^{(0)}} = 3[(1-Q)u_1 - (1+P)u_2] = -sh\left(\psi^{(1)} - \frac{S^{(1)}}{\sigma}\right)/\psi^{(0)} = -6u_2^{LB}. \quad (1.4.9)$$

Для протяженных диффузионных областей параметры u_1 и u_2 обычно много меньше, чем оптическая толщина ячейки h . Из уравнений (1.4.6) и (1.4.7) можно сделать вывод, что условие положительности схемы, используя введенные величины u_1 и u_2 , можно записать в виде:

$$Qu_1 + Pu_2 \leq 1, \quad |u_1| \leq 3. \quad (1.4.10)$$

Значение параметров $u_1(P, Q)$ и $u_2(P, Q)$ может быть оценено в результате предварительного расчета ячейки по LB/QC схеме. Как следует из геометрической интерпретации WLB/QC-WLD схемы, решения с $|u_1| > 1$ не могут быть аппроксимированы положительными элементами в рамках WLB/QC схемы и в этом случае естественен переход к WLD схеме. Однако, при $|u_1| < 1$ можно добиться положительности схемы путем соответствующего выбора веса P в рамках WLB/QC схемы. Для этой схемы зависимость величин u_1 и u_2 от веса P имеет вид:

$$\begin{aligned} u_1(P) &= -\frac{1}{C} \left\{ 3h(1+P) \left[\left(\frac{S^{(0)}}{\sigma} - \frac{sS^{(1)}}{3\sigma} \right) - \psi^- \right] + h(2+h) \frac{sS^{(1)}}{\sigma} \right\}, \\ u_2(P) &= \frac{1}{C} \left\{ h^2 \left[\left(\frac{S^{(0)}}{\sigma} - \frac{sS^{(1)}}{3\sigma} \right) - \psi^- \right] - \frac{2}{3} h(3+h) \frac{sS^{(1)}}{\sigma} \right\}, \\ C &= [6(1+P) + (1-P)h] \psi^- + 3h(1+P) \left(\frac{S^{(0)}}{\sigma} - \frac{sS^{(1)}}{3\sigma} \right) + h^2 \frac{S^{(0)}}{\sigma}. \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

При $|u_1| < 1$ зависимость величин u_1 и u_2 от веса P может быть оценена следующим образом:

$$u_1(P) \cong u_1^{LB}, \quad |u_2(P)| \leq \frac{2}{1+P} |u_2^{LB}| \leq 2 |u_2^{LB}|. \quad (1.4.12)$$

Исходя из неравенств (1.4.10) и (1.4.12) вес P при $|u_1^{LB}| < 1$ может быть выбран из неравенства:

$$|u_1^{LB} + P b u_2^{LB}| \leq 1, \quad (1.4.13)$$

где $b \geq 2$ - параметр алгоритма коррекции (рекомендуемое значение $b = 3$), которое может быть переписано в виде [32]:

$$P b |u_2^{LB}| \leq 1 - s_{1,2} |u_1^{LB}|, \quad s_{1,2} = \text{sign}(u_1^{LB} u_2^{LB}). \quad (1.4.14)$$

Таким образом, для расчета веса P получаем следующую формулу, корректирующую как сильно убывающие, так и сильно возрастающие решения в рамках WLB схемы:

$$P = \begin{cases} 1, & b |u_2^{LB}| \leq f_p(u_1^{LB}) \\ f_p(u_1^{LB}) / b |u_2^{LB}|, & b |u_2^{LB}| > f_p(u_1^{LB}), \\ 0, & |u_1^{LB}| \geq 1 \end{cases} \quad (1.4.15)$$

где

$$f_p(u_1^{LB}) = 1 - s_{1,2} |u_1^{LB}| + g(u_1^{LB}). \quad (1.4.16)$$

Здесь $g(u_1^{LB})$ - функция, обеспечивающая плавный переход $f_p(u_1^{LB}) \rightarrow 0$ при $|u_1^{LB}| \rightarrow 1$. В качестве $g(u_1^{LB})$ может быть, в частности, использована функция:

$$g(u_1^{LB}) = \begin{cases} 0, & s_{1,2} > 0 \\ -2 |u_1^{LB}|^2, & s_{1,2} < 0 \end{cases}. \quad (1.4.17)$$

Следует отметить, что вышеописанный алгоритм коррекции в рамках WLB схемы, в силу приближенности оценки $u_1(P) \cong u_1^{LB}$, вообще говоря, не гарантирует строгой положительности схемы на грубых сетках и может потребоваться дополнительная коррекция [32] если оказалось, что одно из неравенств:

$$|u_1^{WLB}| \leq 1, \quad |u_1^{WLB} + P u_2^{WLB}| \leq 1$$

для выбранного в результате коррекции значения веса P не выполняется. Такая коррекция может быть проведена, например, путем перехода к коррекции в рамках WLD схемы. В приводимых ниже численных примерах для 1D геометрий такая дополнительная коррекция не используется, так-как ее влияние на получаемый результат незначительно.

При $|u_1^{LB}| \geq 1$ ячейка пересчитывается по LD схеме и оценивается значение параметра $u_1^{LD} = u_1(P = 0, Q = 1)$. Для WLD схемы справедливо соотношение:

$$u_1(Q) = - \frac{3h \left[\left(\frac{S^{(0)}}{\sigma} - \frac{sS^{(1)}}{3\sigma} \right) - \psi^- \right] + h(2+h) \frac{sS^{(1)}}{\sigma}}{[6Q+h]\psi^- + 3hQ \left(\frac{S^{(0)}}{\sigma} - \frac{sS^{(1)}}{3\sigma} \right) + h^2 \frac{S^{(0)}}{\sigma}}. \quad (1.4.18)$$

Используя неравенство $u_1(Q) \leq 3$ при $u_1^{LD} \geq 0$ при $0 \leq Q \leq 1$, из уравнения (1.4.18) можно получить следующую оценку для величины $u_1(Q)$ на указанном интервале:

$$u_1(Q) \leq \frac{3u_1^{LD}}{(1-Q)u_1^{LD} + 3Q}. \quad (1.4.19)$$

Справедлива следующая теорема [32].

Теорема 1.5.1. Предположим, что входящий поток и источник для ячейки неотрицательны:

$\psi^- \geq 0$, $S^{(0)} \geq 0$, $|S^{(1)}| \leq 3S^{(0)}$. Тогда если $Q = 1$ для $u_1^{LD} \leq 1$ и $0 < Q \leq u_1^{LD} / (4u_1^{LD} - 3)$ для $u_1^{LD} > 1$, имеют место неравенства: $\psi^+ \geq 0$, $-s\psi^{(1)} < 3\psi^{(0)}$.

Действительно, из уравнений (1.4.6) и (1.4.19) следует, что неравенство $\psi^+ \geq 0$ выполняется при:

$$\frac{\psi^+}{\psi^{(0)}} = 1 - Qu_1 \geq 1 - Q \frac{3u_1^{LD}}{(1-Q)u_1^{LD} + 3Q} \geq 0, \quad (1.4.20)$$

откуда следует, что при $u_1^{LD} > 1$ для выполнения условия $\psi^+ \geq 0$ вес Q должен удовлетворять неравенству: $0 < Q \leq u_1^{LD} / (4u_1^{LD} - 3)$. Неравенство же $-s\psi^{(1)} < 3\psi^{(0)}$, согласно уравнению (1.2.61), всегда выполняется для WLD схемы.

Таким образом, на убывающих в направлении движения частиц решениях, когда $u_1^{LD} > 0$ можно предложить следующий алгоритм определения веса Q , гарантирующий положительность решения:

$$Q = \begin{cases} 1 & , \quad 0 < u_1^{LD} \leq u_0^{LD} \\ f^Q(u_1^{LD}) & , \quad u_1^{LD} > u_0^{LD} \end{cases}, \quad (1.4.21)$$

где u_0^{LD} - параметр, определяющий границу начала перехода на WLD. схему путем коррекции значения веса Q , $0 < u_0^{LD} \leq 1$; $f^Q(u)$ - корректирующая функция, которая предполагается монотонно-убывающей на интервале $u_0^{LD} < u < 3$ и удовлетворяющей условиям:

$$\frac{1}{3} \leq f^Q(u) \leq \frac{u}{4u-3}, \quad f^Q(u_0^{LD}) = 1. \quad (1.4.22)$$

Следующий вариант функции $f^Q(u)$ [32] удовлетворяет данным условиям:

$$f^Q(u) = \frac{u}{\left(\frac{9-u_0^{LD}}{3-u_0^{LD}}\right)u - \frac{6u_0^{LD}}{3-u_0^{LD}}}, \quad 0 < u_0^{LD} \leq 1. \quad (1.4.23)$$

Обычно используется значение $u_0^{LD} = 0.8$.

Для коррекции LD схемы в случае сильно возрастающих решений $u_1^{LD} < -1$ используется WLD₊ схема. Выбор веса $Q > 1$ для этой схемы может быть произведен с использованием геометрической интерпретации WLD₊ схемы (см. Рис. 1.2.2б). Если мы предположим, что в уравнении (1.2.58) $\psi_{i-1/2}^+ = 0$ (такой аппроксимирующий элемент соответствует границе положительности аппроксимации), то между величинами $u_1(\psi_{i-1/2}^+ = 0) \equiv u_1^+$, δ (см. Рис. 1.2.2б) и весом Q возникают следующие соотношения: [35, 36]

$$\delta = -\frac{1+u_1^+}{2}, \quad Q = \frac{1+\delta}{(1-\delta)(1+2\delta)}. \quad (1.4.24)$$

Остается предложить формулу для расчета величины u_1^+ в зависимости от величины u_1^{LD} $u_1^+ = f(u_1^{LD})$ со следующими свойствами: $f(-1) = -1$, $f(-\infty) = -3$, $f'(t) \leq 0$ при $t \in (-\infty, -1]$.

Учитывая, что согласно (1.4.18) $\partial|u_1(Q)|/\partial Q < 0$, можно положить [36]:

$$u_1^+ = \begin{cases} u_1^{LD}, & u_1^{LD} > -2.8 \\ -2.8, & u_1^{LD} \leq -2.8 \end{cases}, \quad (1.4.25)$$

что ограничивает δ в уравнении (1.4.24) величиной 0.9 при $u_1^{LD} \leq -2.8$. Корректирующая функция (1.4.25) обеспечивает положительность схемы на растущих вдоль направления скорости частицы решениях, если $u_1^{LD} > -2.8$. Другой возможный вид функции $f(t)$ следующий [35]:

$$f(t) = -\frac{1-3dt}{(1+2d)-dt}, \quad (1.4.26)$$

где $d > 0$ - параметр (обычно используемое значение $d = 1$).

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

В данном разделе мы приведем численные результаты, демонстрирующие сравнительную точность DD, AWDD (варианты с корректирующей функцией (1.3.24) - AWDD₁ и (1.3.20) с $b = 1$ - AWDD₂), LD, LB/QC, AWLB (вариант с корректирующей функцией (1.4.15) с $b = 3$, $g(u)$, задаваемой по формуле (1.4.21) и с корректирующими функциями (1.4.23) и (1.4.25) для

расчета веса Q) и AWLD (с корректирующими функциями (1.4.23) и (1.4.25) для расчета веса Q), а также LB схемы с "set-to zero fix-up" (LB/QC₊ схемы) в плоской геометрии. В качестве тестовой задачи рассмотрим одногрупповую 4-х зонную задачу с изотропным рассеянием [47], изображенную на Рис. 1.5.1.

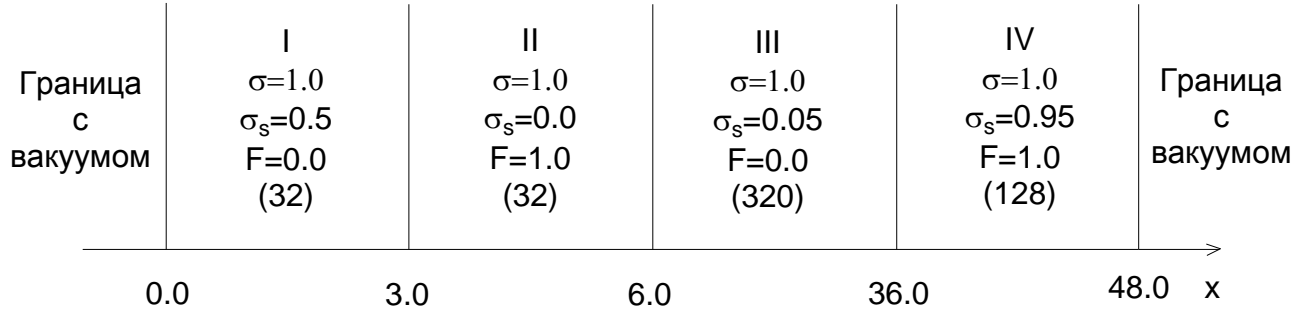


Рисунок 1.5.1. Модельная задача в плоской геометрии [47]. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , внутренний изотропный источник F и число шагов мелкой пространственной сетки по зонам

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} . Использовалась квадратура ES_8 [6]. Для ускорения внутренних итераций использовалась согласованная с WLB-WLD схемой KP_1 схема ускорения итераций [48, 49], что позволило уменьшить число внутренних итераций в рассматриваемой задаче с примерно 296 до 13.

В Табл. 1.5.1 и 1.5.2 (см. также Рис. 1.5.2) показаны относительные ошибки $\delta_{average}$ и δ_{sum} в расчете нулевого пространственного момента скалярного потока $\Phi_i^{(0)}$ и полного числа частиц $\sum_i \Phi_i^{(0)} \Delta x_i$:

$$\delta_{average} = \max_{i \in K_j} \frac{\Phi_i^{(0)} - \Phi_i^{(0)ex}}{\Phi_i^{(0)ex}}, \quad \delta_{sum} = \frac{\sum_i \Phi_i^{(0)} \Delta x_i - \int_0^X \Phi^{ex}(x) dx}{\int_0^X \Phi^{ex}(x) dx}. \quad (1.5.1)$$

В уравнении (1.5.1) $\Phi^{ex}(x)$ - "точное" решение, K_j - j -ая пространственная зона, $j = 1, \dots, 4$, пространственной области, изображенной на Рис. 1.5.1.

Таблица 1.5.1. Относительная ошибка аппроксимации $\delta_{average}$ при решении модельной задачи [47] (Рис. 1.5.1) в плоской геометрии, %

Шаг Δx	Зона	Схема							
		DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB	LB/QC ₊
3	1	97.	35.0	21.0	-19.0	8.9	-18.0	-5.3	-18.0
	2	-6.3	-5.6	-3.9	-1.5	-1.4	2.1	1.2	2.1
	3	-1.9E+7	-77.	1.0E+3	2.1E+3	-40.	8.5E+5	-44.	9.5E+3
	4	-5.2	-3.6	-6.6	-3.3	-3.2	0.39	0.12	0.39
3/2	1	-75.	-13.0	7.6	-13.0	-5.5	8.8	-5.0	8.8
	2	1.3	1.0	-0.98	-0.19	-0.19	0.28	6.9E-2	0.28
	3	9.7E+5	-93.0	-31.	-49.0	-49.0	57.0	-9.3	25.0
	4	-4.0	-3.0	-5.2	-1.5	-1.5	0.27	-0.11	0.27
3/4	1	14.	-8.5	-6.8	-2.1	-2.1	1.2	-2.2	1.2
	2	-3.4	1.6	-1.2	-0.65	-0.64	0.37	0.25	0.37
	3	-57.	-57.0	-57	-8.5	-8.5	3.6	0.86	3.6
	4	-2.5	-1.9	-3.4	-0.67	-0.67	0.12	9.4E-2	0.12
3/8	1	3.3	3.0	-2.5	0.51	0.51	8.9E-2	8.9E-2	8.9E-2
	2	-2.5	-1.7	1.6	-0.39	-0.39	9.7E-2	7.7E-2	9.7E-2
	3	-18.	-18.0	-18.	-1.2	-1.2	2.7E-1	-0.52	2.7E-1
	4	-1.4	-1.2	2.5	-0.25	-0.25	2.9E-2	2.7E-2	2.9E-2
3/16	1	1.1	1.1	1.1	1.2E-1	1.2E-1	-9.1E-3	-9.1E-3	-9.1E-3
	2	-1.3	-0.92	2.2	-1.3E-1	-1.3E-1	1.4E-2	1.4E-2	1.4E-2
	3	-4.8	-4.8	-4.8	2.0E-1	2.0E-1	-2.1E-2	-2.1E-2	-2.1E-2
	4	-0.6	1.2	2.4	-6.9E-2	-6.9E-2	3.7E-3	3.6E-3	3.7E-3

Таблица 1.5.2. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи [47] (Рис. 1.5.1) в плоской геометрии, %

Шаг Δx	Схема							
	DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB	LB/QC ₊
3	4.3E-2	-3.6	-5.5	-1.0	-1.0	-7.1E-3	-7.2E-2	-1.1E-2
3/2	-9.3E-2	1.5	-2.3	-2.1E-1	-2.1E-1	-1.6E-3	-1.5E-2	-2.1E-3

3/4	-2.1E-2	-0.5	-0.8	-4.0E-2	-3.9E-2	-9.5E-7	-1.0E-3	-9.5E-7
3/8	-5.3E-3	-1.5E-1	-2.5E-1	-6.6E-3	-6.6E-3	8.7E-8	3.8E-5	8.7E-8
3/16	-1.3E-3	-4.1E-2	-7.0E-2	-9.7E-4	-9.7E-4	6.3E-9	8.8E-6	6.3E-9

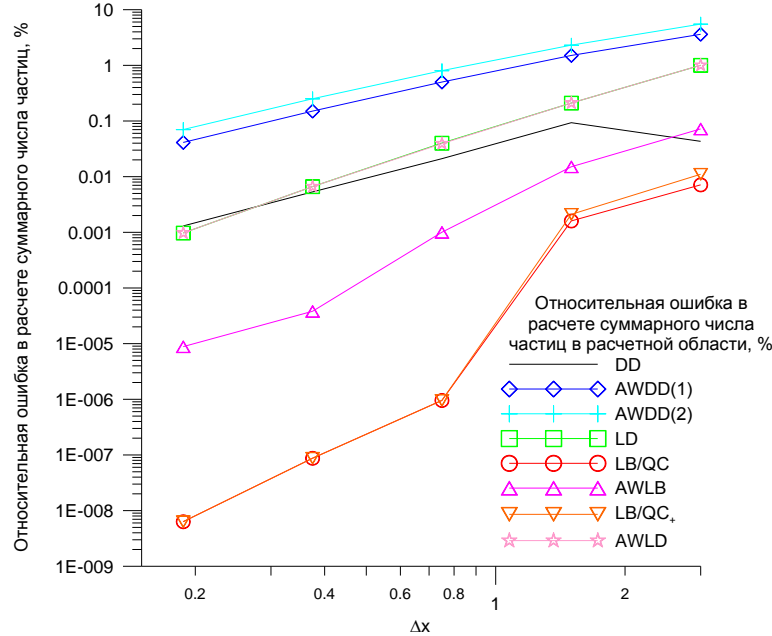


Рисунок 1.5.2. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи [47] (Рис. 1.5.1) в плоской геометрии, %

Как показывают результаты сравнения расчета задачи с использованием DD и AWDD₂, LB/QC и AWLB схем, используемый адаптивный алгоритм коррекции позволяет снять грубые ошибки аппроксимации на редких сетках ценой некоторой потери точности расчета интегральных величин; с уменьшением шага сетки коррекция отключается. "Set-to zero fix-up" (LB/QC₊ схема) обеспечивает положительность схемы, но не устраняет большие ошибки аппроксимации на грубых сетках.

В целом, точность решения задачи с использованием LB/QC схемы и связанного с ней семейства взвешенных нодальных схем существенно выше, чем точность решения задачи на основе DD схемы и связанного с ней семейства WDD схем.

Приведем далее результаты расчета критической пластины с отражателем, изображенной на Рис. 1.5.3. Параметры пластины получены в P_{25} приближении метода сферических гармоник (что соответствует S_{26} приближению при использовании квадратуры Гаусса) в работе [51]. В наших расчетах, результаты которых приведены в Табл. 1.5.3, и на Рис. 1.5.4 использовалось более высокое приближение - квадратура Гаусса порядка $N = 64$ (S_{64} приближение).

Через MDS_N в Табл. 1.5.3 обозначена DD схема с монотонизацией при входе в зону по формуле (1.3.25) и использованием варианта $AWDD_1$ схемы (с корректирующей функцией (1.3.24)) в остальных ячейках.

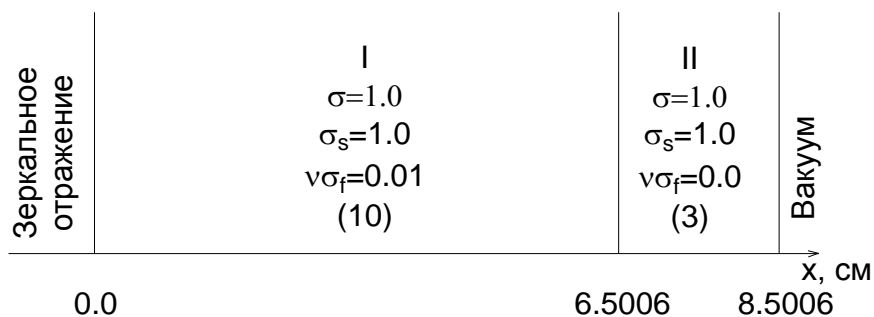


Рисунок 1.5.3. Критическая пластина с отражателем [51]. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , $\nu\sigma_f$ и число шагов пространственной сетки по зонам (в скобках)

Таблица 1.5.3. Ошибка в расчете k_{eff} при расчете критической пластины с отражателем (см.

Рис. 1.5.3) [51] в S_{64} приближении при точности сходимости итераций 10^{-8} , %.

Сетка по зонам	Схема							
	DD	MDS_N	$AWDD_1$	$AWDD_2$	LD	AWLD	LB/QC	AWLB
10+3	0.16	0.55	0.82	1.2	0.021	0.021	0.0030	0.0025
20+6	0.042	0.074	0.22	0.33	0.0057	0.0057	0.0026	0.0025
40+12	0.013	0.016	0.059	0.090	0.0031	0.0031	0.0026	0.0026
80+24	0.0050	0.057	0.017	0.025	0.0027	0.0027	0.0026	0.0026

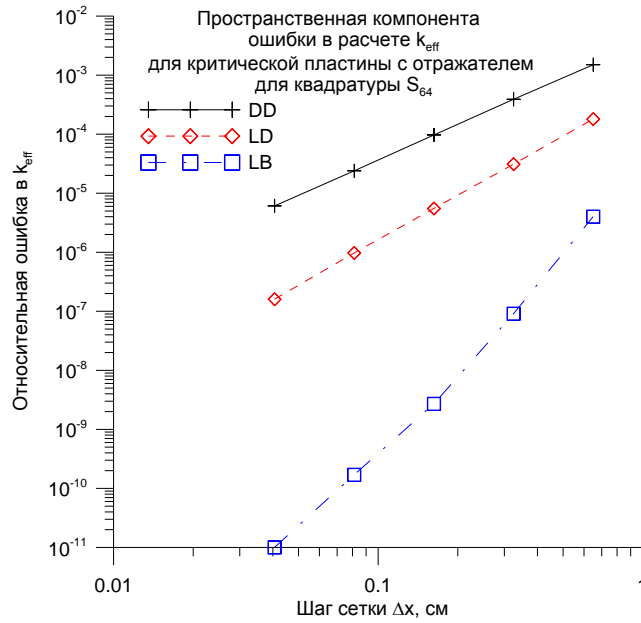


Рисунок 1.5.4. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете критической пластины с отражателем (см. Рис. 1.5.3) [51] с фиксированной квадратурой S_{64} . В качестве точного решения использовалось решение, полученное по LB схеме на сетке 320+96 с точностью сходимости 10^{-12}

Из Табл. 1.5.3 следует, что использование AWDD схемы несколько ухудшает точность расчета k_{eff} в данной задаче по сравнению с DD схемой, но остается на приемлемом уровне. MDS_N схема в данной задаче обеспечивает более высокую точность расчета k_{eff} , чем оба варианта AWDD схемы. Использование LB/QC схемы и связанного с ней семейства взвешенных нодальных схем позволяет получить существенно более высокую точность в данной задаче, чем использование DD схемы и связанного с ней семейства WDD схем.

Свойства монотонности рассматриваемых схем можно проиллюстрировать на примере решения тестовой гетерогенной задачи Рида [53] в плоской геометрии (см. Рис. 1.5.5). Результаты расчета скалярного потока для этой задачи на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta x = 0.2$ см и квадратурой ES_8 представлены на Рис. 1.5.6. Как следует из этого рисунка, AWDD схема с корректирующей функцией (1.3.20) и значением монотонизирующего параметра $b = 1$ обладает улучшенными свойствами монотонности по сравнению с DD схемой. MDS_N , LB/QC и LD схемы решают данную задачу без видимых нарушений монотонности скалярного потока, хотя и не являются строго монотонными.

Зеркальное отражение	I	II	III	IV	V	Вакуум
	$\sigma=50.0$ $\sigma_s=0.0$ $F=50.0$ (10)	$\sigma=5.0$ $\sigma_s=0.0$ $F=0.0$ (5)	$\sigma=0.0$ $\sigma_s=0.0$ $F=0.0$ (10)	$\sigma=1.0$ $\sigma_s=0.9$ $F=1.0$ (5)	$\sigma=1.0$ $\sigma_s=0.9$ $F=0.0$ (10)	
	0	2	3	5	6	8

Рисунок 1.5.5. Тестовая гетерогенная задача Рида [53] в плоской геометрии. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , внутренний изотропный источник F и число шагов пространственной сетки по зонам

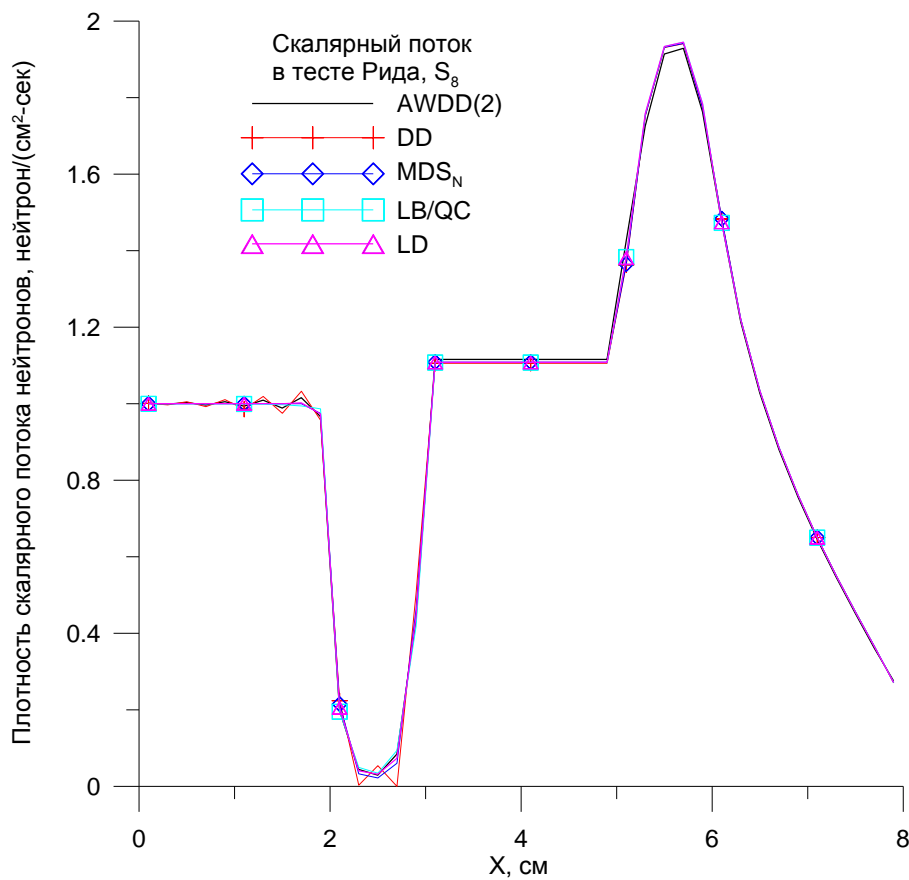


Рисунок 1.5.6. Результаты расчета скалярного потока нейтронов в тестовой гетерогенной задаче Рида [53] в плоской геометрии с использованием AWDD₂, DD, MDS_N, LB/QC и LD схем

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

Перейдем к построению и исследованию свойств разностных схем, использующих дополнительные уравнения WDD схемы и WLB/QC-WLD схемы, в одномерных криволинейных геометриях. Основное рассмотрение проведем на примере одномерной сферической геометрии. Видоизменение алгоритма для случая одномерной цилиндрической геометрии также будет рассмотрено.

В одномерной сферической геометрии уравнение переноса имеет вид [4, 2, 3]:

$$\mu \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \psi) + r \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^2) \psi] + \sigma r^2 \psi(r, \mu) = r^2 S(r, \mu), \quad (1.6.1)$$

где $\mu = \text{Cos}\theta = (\vec{\Omega} \vec{n}_r)$, $\vec{n}_r = \vec{r}/r$, $\vec{\Omega}$ - направляющий вектор скорости частицы, $-1 \leq \mu \leq 1$; пространственная переменная r изменяются в пределах: $0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{out}}$. Правая часть $S(r, \mu)$ уравнения (1.6.1) имеет вид, аналогичный (1.2.2) с заменой $x \rightarrow r$.

Для граничного направления $\mu = -1$, используемого для расчета граничных ячеек в одномерной сферической геометрии, дивергентная форма уравнения (1.6.1) имеет вид:

$$\mu \left[\frac{\partial}{\partial r}(r^2 \psi) - 2r\psi \right] + \sigma r^2 \psi(r, \mu) = r^2 S(r, \mu). \quad (1.6.2)$$

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (1.6.1) по разностной ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\mu_{m-1/2}, \mu_{m+1/2})$, $i = 1, \dots, I$, $m = 1, \dots, M$ ($r_{1/2} = r_{\text{int}}$, $r_{I+1/2} = r_{\text{ext}}$, $\mu_{1/2} = -1$, $\mu_{M+1/2} = 1$; ниже мы опускаем целые индексы, в том числе, номер группы, в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$|\mu| (A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) + \sigma V \psi = VS, \quad (1.6.3)$$

где коэффициенты $\alpha_{m\pm 1/2}$ находятся из рекуррентного соотношения:

$$\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} = -w_m \mu_m, \quad \alpha_{1/2} = \alpha_{M+1/2} = 0, \quad m = 1, \dots, M, \quad (1.6.4)$$

а остальные величины равны:

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

$$\psi^\pm = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, m}, \mu_m > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, m}, \mu_m < 0 \end{cases}, \quad A^\pm = \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, \mu_m > 0 \\ A_{i\mp 1/2}, \mu_m < 0 \end{cases},$$

$$\psi_{i, m\pm 1/2} = \frac{1}{V_i^c} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{m\pm 1/2}) r dr, \quad V_i^c = \frac{1}{2}(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2),$$

$$\psi \equiv \psi_{i, m}^{(0)} = \frac{1}{V_i w_m} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} \psi(r, \mu) r^2 dr d\mu, \quad S \equiv S_{i, m}^{(0)} = \frac{1}{V_i w_m} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} S(r, \mu) r^2 dr d\mu. \quad (1.6.5)$$

1.6.1. Семейство WDD схем в 1D криволинейных геометриях

Для получения взвешенной алмазной (WDD) схемы к уравнению баланса (1.6.3) следует добавить два дополнительных уравнения:

$$\psi^+ = (1 + P_r)\psi - P_r\psi^-, \quad \psi_{m+1/2} = (1 + P_\mu)\psi - P_\mu\psi_{m-1/2}, \quad 0 \leq P_r, P_\mu \leq 1. \quad (1.6.6)$$

Исключая посредством уравнений (1.6.6) выходящие потоки на гранях разностной ячейки в уравнении баланса (1.6.3), получим следующее значение для среднего значения потока в ячейке:

$$\psi = \frac{|\mu|(A^- + P_r A^+)\psi^- + \frac{C}{W}(\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2})\psi_{m-1/2} + VS}{|\mu|A^+(1 + P_r) + \frac{C}{W}\alpha_{m+1/2}(1 + P_\mu) + \sigma V}. \quad (1.6.7)$$

Для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\mu_{1/2} = -1$), используемых в криволинейной геометрии для нахождения граничных значений потока $\psi_{i,1/2}$ по угловой переменной μ , уравнение баланса, которое получается путем интегрирования уравнения (1.6.2) по граничной ячейке, имеет вид:

$$|\mu|[(A^+\psi^+ - A^-\psi^-) + (A^- - A^+)\psi_{i,1/2}] + \sigma V\psi_i^{(0)} = VS_i^{(0)}, \quad (1.6.8)$$

где

$$\psi_{i,1/2} = \frac{1}{V_i^c} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{1/2}) r dr, \quad \psi \equiv \psi_i^{(0)} = \frac{1}{V_i} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{1/2}) r^2 dr, \quad S \equiv S_i^{(0)} = \dots$$

Для расчета граничных ячеек уравнение (1.6.8) дополняется предположением, что:

$$\psi_{i,1/2} \approx \psi_i^{(0)} \quad (1.6.9)$$

и дополнительным WDD уравнением по пространственной переменной:

$$\psi^+ = (1 + P_r)\psi - P_r\psi^-, \quad 0 \leq P_r \leq 1. \quad (1.6.10)$$

Среднее значение потока для граничных ячеек имеет вид:

$$\psi = \frac{|\mu|(A^- + P_r A^+)\psi^- + VS}{|\mu|(A^- + P_r A^+) + \sigma V}. \quad (1.6.11)$$

Наряду с аппроксимацией и устойчивостью, важным свойством разностной схемы, аппроксимирующей уравнение (1.6.1), является монотонность. Уточним это понятие для класса схем, удовлетворяющих уравнению баланса (1.6.3), и следующим требованиям:

1) Величины ψ^+ , $\psi_{m+1/2}$ и ψ однозначно определяются по заданным значениям ψ^- , $\psi_{m-1/2}$ и S :

$$\psi^+ = \psi^+(\psi, \psi^-), \quad \psi_{m+1/2} = \psi_{m+1/2}(\psi, \psi_{m-1/2}), \quad \psi = \psi(\psi^-, \psi_{m-1/2}, S). \quad (1.6.12)$$

2) Для каждой разностной ячейки (i, m) существуют такие величины $g_\mu = g_\mu(\psi^-, S)$ и $g_r = g_r(\psi_{m-1/2}, S)$, являющиеся возрастающими функциями своих аргументов, что:

$$\text{при } \psi^- = g_r, \quad \psi = \psi^+ = g_r, \quad (1.6.13)$$

$$\text{при } \psi_{m-1/2} = g_\mu, \quad \psi = \psi_{m+1/2} = g_\mu. \quad (1.6.14)$$

3) В каждой ячейке выполняются неравенства:

$$\psi^- < \psi \leq \psi^+, \quad \psi < g_r \quad \text{при } \psi^- < g_r, \quad (1.6.15)$$

$$\psi^- > \psi \geq \psi^+, \quad \psi > g_r \quad \text{при } \psi^- > g_r. \quad (1.6.16)$$

$$\psi_{m-1/2} < \psi \leq \psi_{m+1/2}, \quad \psi < g_\mu \quad \text{при } \psi_{m-1/2} < g_\mu, \quad (1.6.17)$$

$$\psi_{m-1/2} > \psi \geq \psi_{m+1/2}, \quad \psi > g_\mu \quad \text{при } \psi_{m-1/2} > g_\mu, \quad (1.6.18)$$

Рассмотрим некоторые следствия, вытекающие из предположений 1) и 2). Согласно (1.6.12) - (1.6.14) для внутренних ячеек величины g_μ и g_r , существование которых предполагается в 2), являются решениями уравнений:

$$g_\mu [\sigma V + C(\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2})/w] = VS - |\mu| [A^+ \psi^+(g_\mu, \psi^-) - A^- \psi^-], \quad (1.6.19)$$

$$g_r [\sigma V + |\mu|(A^+ - A^-)] = VS - C [\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}(g_r, \psi_{m-1/2}) - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}] / w. \quad (1.6.20)$$

Для граничных ячеек из уравнения (1.6.8) следует, что $g_r = S/\sigma$. Отметим, что величины g_μ и g_r являются конечно-разностной аппроксимацией величин:

$$\tilde{g}_\mu = \frac{1}{\sigma} \left(S - \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} \right), \quad \tilde{g}_r = \frac{1}{\sigma} \left[S - \frac{(1 - \mu^2)}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] \quad (1.6.21)$$

с помощью которых уравнение (1.6.1) может быть записано в виде:

$$\frac{(1 - \mu^2)}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} + \sigma \psi = \sigma \tilde{g}_\mu, \quad \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} + \sigma \psi = \sigma \tilde{g}_r. \quad (1.6.22)$$

Лемма 1.6.1 [19]. Неравенства (1.6.15) - (1.6.18) имеют место при выполнении условий 1) и 2), а также неравенств:

$$\frac{\partial \psi^+(\psi, \psi^-)}{\partial \psi^-} \leq 0, \quad \frac{\partial \psi_{m+1/2}(\psi, \psi_{m-1/2})}{\partial \psi_{m-1/2}} \leq 0, \quad \frac{\partial \psi(\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi^-} > 0, \quad \frac{\partial \psi(\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi_{m-1/2}} > 0. \quad (1.6.23)$$

Лемма 1.6.1 устанавливает удобный критерий выполнения неравенств (1.6.15) - (1.6.18).

Согласно условиям Леммы 1.6.1 функция $\psi = \psi(\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)$ является возрастающей функцией первых 2-х своих аргументов. Кроме того, справедливо неравенство:

$$\frac{\partial \psi(\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial S} > 0, \quad (1.6.24)$$

которое является следствием уравнения баланса (1.6.3) и неравенств (1.6.23). Действительно, дифференцируя уравнение баланса (1.6.3) с учетом (1.6.23) получим:

$$D \frac{\partial \psi}{\partial \psi^-} = |\mu| \left(-A^+ \frac{\partial \psi^+}{\partial \psi^-} + A^- \right) > 0, \quad D \frac{\partial \psi}{\partial \psi_{m-1/2}} = \frac{C}{w} \left(-\alpha_{m+1/2} \frac{\partial \psi_{m+1/2}}{\partial \psi_{m-1/2}} + \alpha_{m-1/2} \right) > 0, \quad D \frac{\partial \psi}{\partial S} = V, \\ D = \sigma V + |\mu| A^+ \frac{\partial \psi^+}{\partial \psi} + \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} \frac{\partial \psi_{m+1/2}}{\partial \psi} > 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial S} = V/D > 0. \quad (1.6.25)$$

Дальнейшее доказательство Леммы 1.6.1 аналогично доказательству Леммы 1.2.1. Рассмотрим, для определенности, случай $\psi^- < g_r$. Выберем граничный поток $\tilde{\psi}^- = g_r$. В этом случае в силу свойства 2) $\tilde{\psi} = g_r$. Уменьшая $\tilde{\psi}^-$ до значения ψ^- при постоянном g_r из неравенства $\partial \psi / \partial \psi^- > 0$ и свойства 1) получим, что $\psi < g_r$. Аналогично доказывается первое неравенство в (1.6.15). Выберем граничный поток $\tilde{\psi}^-$ таким, что $\tilde{\psi}^- = \psi = \tilde{\psi}^+ = g_r$. Уменьшая $\tilde{\psi}^-$ до значения ψ^- при постоянном ψ за счет увеличения источника S и (или) граничного потока $\psi_{m-1/2}$, получим, в силу неравенства $\partial \psi^+ / \partial \psi^- \leq 0$, что $\psi^- < \psi \leq \psi^+$.

Лемма 1.6.2 [19]. Если величины ψ^- , $\psi_{m-1/2}$ и S/σ ограничены снизу (сверху) некоторой константой $\gamma > 0$: $\psi^-, \psi_{m-1/2}, S/\sigma \geq \gamma$ ($\leq \gamma$), то и $\psi, g_\mu, g_r \geq \gamma$ ($\leq \gamma$).

Доказательство этой леммы приведено в [19].

Определение 1.6.1a [19]. Разностная схема, аппроксимирующая уравнение (1.6.1) и удовлетворяющая уравнениям баланса (1.6.3) и (1.6.8) для центральных и граничных ячеек, монотонна на слое m , $m = 1/2, 1, 2, \dots, M$, по переменной r , если из невозрастания (неубывания) последовательности $\psi_{1/2,m}, g_{r,1,m}, g_{r,2,m}, \dots, g_{r,I,m}$ при $\mu_m > 0$ и неубывания (невозрастания) последовательности $\psi_{1+1/2,m}, g_{r,I,m}, g_{r,I-1,m}, \dots, g_{r,1,m}$ при $\mu_m < 0$ следует невозрастание (неубывание) разностного решения на указанном слое: $\psi_{1/2,m}, \psi_{1,m}, \psi_{2,m}, \dots, \psi_{I,m}, \psi_{I+1/2,m}$.

Аналогично вводится понятие монотонности по угловой переменной μ .

Определение 1.6.1b [19]. Разностная схема, аппроксимирующая уравнение (1.6.1) и удовлетворяющая уравнениям баланса (1.6.3) и (1.6.8), монотонна на слое i по переменной μ если из невозрастания (неубывания) последовательности $\psi_{i,1/2}, g_{\mu,i,1}, g_{\mu,i,2}, \dots, g_{\mu,i,M}$ следует невозрастание (неубывание) разностного решения на указанном слое: $\psi_{i,1/2}, \psi_{i,1}, \psi_{i,2}, \dots, \psi_{i,M}, \psi_{i,M+1/2}$.

Определение 1.6.1с [19]. Разностная схема, аппроксимирующая уравнение (1.6.1) и удовлетворяющая уравнениям баланса (1.6.3) и (1.6.8), монотонна в некоторой области, если она монотонна на каждом слое разностной сетки, покрывающей эту область.

Из уравнений (1.6.21) и (1.6.22) следует, что точное решение уравнения переноса обладает свойством монотонности по переменным r и μ . Естественно потребовать, чтобы это свойство, наряду со свойством положительности, соблюдалось и для разностной схемы, аппроксимирующей уравнение переноса. Определения 1.6.1а-1.6.1с являются обобщением понятия монотонности, используемого в плоской геометрии.

Справедливы следующие утверждения.

Теорема 1.6.1 [19]. Необходимым и достаточным условием монотонности разностной схемы, удовлетворяющей условиям (1.6.12) - (1.6.18) на слое m по переменной r (на слое i по переменной μ) является выполнение в каждой ячейке этого слоя неравенства:

$$(\psi^- - g_r)(\psi^+ - g_r) \geq 0 \quad (1.6.26)$$

$$((\psi_{m-1/2}^- - g_\mu)(\psi_{m+1/2}^- - g_\mu) \geq 0). \quad (1.6.27)$$

Доказательство Теоремы 1.6.1 аналогично доказательству Теоремы 1.2.1 для плоской геометрии.

Следствие 1.6.1. Разностная схема, удовлетворяющая условиям (1.6.12) - (1.6.18) монотонна (немонотонна) на слое m по переменной r если выполняется следующее неравенство:

$$\frac{\partial \psi^+ (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi^-} \geq 0 \quad \left(\frac{\partial \psi^+ (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi^-} < 0 \right). \quad (1.6.28)$$

Следствие 1.6.2. Разностная схема, удовлетворяющая условиям (1.6.12) - (1.6.18) монотонна (немонотонна) на слое i по переменной μ если выполняется следующее неравенство:

$$\frac{\partial \psi^+ (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi_{m-1/2}} \geq 0 \quad \left(\frac{\partial \psi^+ (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi_{m-1/2}} < 0 \right). \quad (1.6.29)$$

Определение 1.6.2. Разностная схема, удовлетворяющая условиям (1.6.12) - (1.6.18), неотрицательна, если из неотрицательности правой части S и падающих на границу ячейки потоков ψ^- и $\psi_{m-1/2}$ следует неотрицательность разностного решения: ψ , ψ^+ и $\psi_{m+1/2}$.

Так-как при $\psi^-, \psi_{m-1/2}, S/\sigma \geq 0$ для монотонной схемы, согласно Леммы 3, выполняются неравенства $\psi, g_\mu, g_r \geq 0$, справедливо следующее утверждение.

Следствие 1.6.3. Монотонная разностная схема, удовлетворяющая условиям (1.6.12) - (1.6.18), неотрицательна.

Обратное утверждение, как показывает пример экспоненциальной (EM) схемы [19], вообще говоря, неверно.

WDD схема (1.6.3)-(1.6.11) принадлежит к семейству схем, удовлетворяющему условиям (1.6.12) - (1.6.18), поскольку, в частности, для нее выполняются неравенства (1.6.23), гарантирующие выполнение неравенств (1.6.15)-(1.6.18) :

$$\frac{\partial \psi^+ (\psi, \psi^-)}{\partial \psi^-} = -P_r \leq 0, \quad \frac{\partial \psi_{m+1/2} (\psi, \psi_{m-1/2})}{\partial \psi_{m-1/2}} = -P_\mu \leq 0, \quad \frac{\partial \psi (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi^-} = \frac{|\mu| (A^- + P_r A^+)}{D} > 0,$$

$$\frac{\partial \psi (\psi^-, \psi_{m-1/2}, S)}{\partial \psi_{m-1/2}} = \frac{C (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2})}{wD} > 0, \quad D = |\mu| A^+ (1 + P_r) + \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu) + \sigma V. \quad (1.6.30)$$

Для граничных ячеек также выполняется необходимое неравенство:

$$\frac{\partial \psi (\psi^-, S)}{\partial \psi^-} = \frac{|\mu| (A^- + P_r A^+)}{|\mu| (A^- + P_r A^+) + \sigma V} > 0. \quad (1.6.31)$$

Для внутренних ячеек справедливы следующие соотношения:

$$(\psi^+ - g_r) = \frac{|\mu| (A^- + P_r A^+) - P_r \sigma_r V}{|\mu| (A^- + P_r A^+) + \sigma_r V} (\psi^- - g_r), \quad (1.6.32)$$

где

$$g_r = \frac{S_r}{\sigma_r}, \quad \sigma_r V = \sigma V + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}), \quad VS_r = VS + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}, \quad (1.6.33)$$

а также

$$(\psi_{m+1/2} - g_\mu) = \frac{C (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) / w - P_\mu \sigma_\mu V}{C (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) / w + \sigma_\mu V} (\psi_{m-1/2} - g_\mu), \quad (1.6.34)$$

где

$$g_\mu = \frac{S_\mu}{\sigma_\mu}, \quad \sigma_\mu V = \sigma V + |\mu| (A^- + P_r A^+), \quad VS_\mu = VS + |\mu| (A^- + P_r A^+) \psi^-. \quad (1.6.35)$$

Величины σ_r и S_r могут быть интерпретированы (ср. (1.6.11)) как "сечение и источник" для экстраполяции по переменной r , так как уравнение баланса (1.6.3) с помощью этих величин может быть переписано в "квазиодномерном" виде, идентичном уравнению баланса для граничных ячеек (1.6.8):

$$|\mu| [(A^+ \psi_r^+ - A^- \psi_r^-) + (A^- - A^+) \psi] + \sigma_r V \psi = VS_r, \quad \psi_r^+ = (1 + P_r) \psi - P_r \psi_r^-. \quad (1.6.36)$$

Аналогично, величины σ_μ и S_μ могут быть интерпретированы как "сечение и источник" для экстраполяции по переменной μ , так как уравнение баланса (1.6.3) с помощью этих величин может быть переписано в "квазиодномерном" виде:

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

$$\psi_{m+1/2} = (1 + P_{\mu}) \psi - P_{\mu} \psi_{m-1/2}. \quad (1.6.37)$$

Для граничных ячеек из уравнений (1.6.8) и (1.6.10) получаем, что:

$$\left(\psi^+ - \frac{S}{\sigma} \right) = \frac{|\mu| (A^- + P_r A^+) - P_r \sigma V}{|\mu| (A^- + P_r A^+) + \sigma V} \left(\psi^- - \frac{S}{\sigma} \right). \quad (1.6.38)$$

Из уравнений (1.6.32), (1.6.34) и (1.6.38) можно заключить, что условия применимости Теоремы 1.6.1 для рассматриваемой схемы выполнены и можно прийти к выводу, что условие монотонности WDD схемы по переменной r имеет вид :

$$|\mu| (A^- + P_r A^+) - P_r \sigma_r V \geq 0, \quad (1.6.39)$$

а по переменной μ :

$$C (\alpha_{m-1/2} + P_{\mu} \alpha_{m+1/2}) / w - P_{\mu} \sigma_{\mu} V \geq 0. \quad (1.6.40)$$

Условие монотонности схемы для граничных ячеек с $m = 1/2$ имеет вид:

$$|\mu| (A^- + P_r A^+) - P_r \sigma V \geq 0. \quad (1.6.41)$$

Отметим, что для алмазной схемы ($P_r = P_{\mu} = 1$) условия (1.6.39) и (1.6.40) не могут быть соблюдены одновременно на любой сетке, а для шаговой схемы ($P_r = P_{\mu} = 0$) выполняются тождественно. Отмеченное свойство WDD схемы является отражением общего результата С. К. Годунова [54] (см. также [55], гл. 10) о невозможности построения двухслойной линейной монотонной схемы порядка точности выше первого для уравнения $\partial \psi / \partial t + c \partial \psi / \partial x = 0$.

Теорема 1.6.1 позволяет исследовать монотонность и других схем в криволинейной геометрии, удовлетворяющих условиям (1.6.12) - (1.6.18), в частности, нелинейной EM схемы. Соответствующий анализ приведен в [19]. Кроме того, она допускает обобщение на случай многомерной криволинейной геометрии.

В *одномерной цилиндрической геометрии* отсутствует зависимость от азимутальной и аксиальной пространственных переменных и уравнение (1.1.6) приобретает вид:

$$\xi \frac{\partial}{\partial r} (r \psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi} (\eta \psi) + \sigma r \psi (r, \mu, \varphi) = r S (r, \mu, \varphi), \quad (1.6.42)$$

где ξ , η и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы (1.1.7), который с учетом имеющейся в данной геометрии симметрии:

$$\psi (r, \mu, \varphi) = \psi (r, -\mu, \varphi) = \psi (r, \mu, 2\pi - \varphi) \text{ изменяется в пределах двух октантов: } -1 \leq \xi \leq 1,$$

$$0 \leq \mu, \eta \leq 1, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi; \text{ пространственная переменная } r \text{ изменяются в пределах: } 0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{out}};$$

правая часть имеет вид:

$$S(r, z, \mu, \varphi) = \sum_{\substack{l=0 \\ l+m=2n}}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} \sum_{m=0}^l Y_l^m(\mu, \varphi) \Phi_l^m(r, z) + f(r, z, \mu, \varphi). \quad (1.6.43)$$

Для граничного направления $\varphi = \pi$, используемого для расчета граничных ячеек в одномерной цилиндрической геометрии, дивергентная форма уравнения (1.6.42) имеет вид:

$$\xi \left[\frac{\partial}{\partial r} (r\psi) - \psi \right] + \sigma r \psi(r, \mu, \varphi) = rS(r, \mu, \varphi). \quad (1.6.44)$$

В цилиндрической геометрии для аппроксимации интеграла рассеяния вводится квадратура, которая разбивает рассматриваемые 2 октанта: $-1 \leq \xi \leq 1$, $0 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \theta \leq \pi/2$, $0 \leq \varphi \leq \pi$ на L полос по переменной μ веса w_l , $\sum_l w_l = \pi$, а каждая полоса l , $l = 1, \dots, L$, дополнительно еще разбивается на M_l секторов веса $w_{l,m}$, где индекс m на l -ом слое пробегает значения: $m = 1, \dots, M_l$. M_l^- этих секторов приходится на значения направляющего косинуса $\xi_{l,m} < 0$, а M_l^+ - на значения $\xi_{l,m} > 0$, $M_l^- + M_l^+ = M_l$. Направление $\xi_{l,1/2}$ входит в квадратуру с нулевым весом. Нумерация узлов по φ на l -ом слое соответствует возрастанию $\xi_{l,m}$ (убыванию $\varphi_{l,m}$). Уравнение баланса для цилиндрической геометрии получается из уравнения (1.6.3) после замены:

$\mu_m \rightarrow \xi_{l,m}$, $\alpha_{m\pm 1/2} \rightarrow \alpha_{l,m\pm 1/2}$, $w_m \rightarrow w_{l,m}$, а также подстановки:

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad V_i = (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2)/2, \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}. \quad (1.6.45)$$

Коэффициенты $\alpha_{l,m\pm 1/2}$ находятся из рекуррентных соотношений:

$$\alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} = -w_{l,m} \xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_{l+1/2}} = 0, \quad m = 1, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L. \quad (1.6.46)$$

После вышеуказанных замен алгоритм WDD схемы для одномерной цилиндрической геометрии оказывается идентичным случаю одномерной сферической геометрии.

1.6.2. Семейство WLB/QC-WLD схем в 1D криволинейных геометриях

Рассмотрим далее построение WLB/QC-WLD схемы для случая 1D сферической геометрии [34]. Наряду с уравнением баланса нулевого порядка (1.6.3), для построения этой схемы потребуется также и уравнение баланса первого порядка, которое в этой геометрии получается путем интегрирования уравнения (1.6.1) по разностной ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\mu_{m-1/2}, \mu_{m+1/2})$, $i = 1, \dots, I$, $m = 1, \dots, M$ с весом $(r - r_i - \delta_i^s)$, где δ_i^s - малое отклонение от центра ячейки r_i , выбираемое из условия обращения в нуль на постоянном решении первого пространственного момента решения $\psi_{i,m}^r$:

$$\psi_{i,m}^r = \frac{1}{V_i^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_m(r) (r - r_i - \delta_i^s) r^2 dr, \quad \delta_i^s = \frac{(\Delta r)^3 r_i}{6V_i}, \quad \psi_{i,m}^r \Big|_{\psi_m(r)=Const} = 0. \quad (1.6.47)$$

Нормировочный коэффициент V_i^r в определении $\psi_{i,m}^r$ (1.6.47) выбирается из условия точного выполнения дополнительного уравнения LB/QC схемы: $\psi_{i+1/2} = 2\psi^r + \psi_{i-1/2}$ на решениях вида: $\psi(r) = a + br$. Это дает:

$$V_i^r = \frac{2}{\Delta r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (r - r_i - \delta_i^s)^2 r^2 dr = \frac{(\Delta r)^2}{15} \left(r_{i+1/2}^2 + r_{i-1/2}^2 + \frac{1}{2} r_{i-1/2} r_{i+1/2} - 5r_i \delta_i^s \right). \quad (1.6.48)$$

В итоге получим:

$$\mu \left[\frac{\Delta r}{2} (A^+ \psi^+ + A^- \psi^-) - V \psi \right] + \frac{C^r}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}^r - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}^r) + \Lambda + \sigma V^r \psi^r = V^r S^r, \quad (1.6.49)$$

где Λ - малый дополнительный член:

$$\Lambda = -\delta^s |\mu| (A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) - (\delta^s - \delta^c) \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}), \quad (1.6.50)$$

$\psi_{m\pm 1/2}^r$ - первые радиальные моменты на гранях ячейки $\mu = \mu_{m\pm 1/2}$:

$$\psi_{i,m\pm 1/2}^r = \frac{1}{V_{c,i}^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{m\pm 1/2}) (r - r_i - \delta_i^c) r dr, \quad \delta_i^c = \frac{(\Delta r_i)^2}{12r_i}, \quad \psi_{i,m\pm 1/2}^r (\psi(r, \mu_{m\pm 1/2}) = Const) = 0. \quad (1.6.51)$$

Нормировочный коэффициент $V_{c,i}^r$ в определении $\psi_{i,m\pm 1/2}^r$ находится из условия точного выполнения дополнительного уравнения WDD схемы: $\psi_{m+1/2}^r = (1 + P_\mu^r) \psi^r - P_\mu^r \psi_{m-1/2}^r$ на решениях вида: $\psi(r) = a + br$. Это дает:

$$V_{c,i}^r = \frac{2}{\Delta r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (r - r_i - \delta_i^c)^2 r dr = \frac{(\Delta r_i)^2}{6} (r_i - \delta_i^c), \quad C^r = 2V_c^r. \quad (1.6.52)$$

Используя уравнение баланса (1.6.3), выражение для Λ можно представить также в форме:

$$\Lambda = \delta^s (\sigma V \psi - VS) + \delta^c \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}). \quad (1.6.53)$$

Для получения разностной схемы дополним уравнения баланса (1.6.3) и (1.6.49) дополнительным уравнением WLB/QC-WLD схемы по пространственной переменной r (что обеспечивает 2-4-ый порядок аппроксимации по этой переменной) и дополнительными уравнениями WDD схемы по угловой переменной μ (1-2-ой порядок аппроксимации схемы по μ) [36]:

$$\psi^+ = (1 - P_r) \psi + (Q_r + P_r) s \psi^r + P_r \psi^-, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad Q_r = 1 \text{ или } P_r = 0, \quad 1/E^- \leq Q_r < \infty, \\ s = \text{sign}(\mu), \quad E^- = V \left(\frac{\Delta r}{2} + s \delta^s \right) / V^r, \quad (1.6.54)$$

$$\psi_{m+1/2} = (1 + P_\mu) \left[\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right] - P_\mu \psi_{m-1/2}, \quad \psi_{m+1/2}^r = (1 + P_\mu^r) \psi^r - P_\mu^r \psi_{m-1/2}^r, \quad 0 \leq P_\mu, P_\mu^r \leq 1. \quad (1.6.55)$$

В уравнении (1.6.54) P_r и Q_r - весовые коэффициенты, которые изменяются в тех же пределах, что и в случае плоской геометрии. Дополнительное уравнение WDD схемы, связывающее входящие и выходящие радиальные пространственные моменты нулевого порядка $\psi_{m\pm 1/2}$ на гранях $\mu_{m\pm 1/2}$ разностной ячейки, включает член $\sim \psi^r$, позволяющий учесть различие в пространственном весовом множителе в определении ψ и $\psi_{m\pm 1/2}$. Отметим, что дополнительные уравнения (1.6.55) выполняются точно на постоянных по углу и линейных по пространственной переменной r решениях:

$$\psi(r, \mu) = \psi + \frac{2}{\Delta r} (r - r_i - \delta_i^s) \psi^r.$$

Учитывая, что величина ψ^r входит в экстраполяционные соотношения для $\psi_{m+1/2}$ и $\psi_{m+1/2}^r$ (1.6.55), естественно ограничить выбор веса P_μ^r условием:

$$P_\mu^r = P_\mu. \quad (1.6.56)$$

Основная цель введения поправочного члена Λ (1.6.50), (1.6.53), сдвигов δ_i^s и δ_i^c (см. Рис. 1.6.1a) в определении радиальных пространственных моментов и поправки в экстраполяционное соотношение для $\psi_{m+1/2}$ (1.6.55) - это улучшение аппроксимации схемы в окрестности $r = 0$ при сохранении дополнительного уравнения WLB/QC-WLD схемы (1.6.54) для этой геометрии в виде, идентичном случаю плоской геометрии (1.2.45).

Несколько иной, но также эффективный способ построения LD схемы в криволинейной геометрии на примере 2D r, z геометрии предложен в [42]. В этой работе явный вид линейного аппроксимирующего элемента LD схемы используется при получении балансных уравнений (что, вообще говоря, делает эти уравнения приближенными). В нашем подходе балансные соотношения предполагаются точными, а аппроксимация вносится путем использования приближенных дополнительных уравнений. Такой подход, на наш взгляд, является более общим, так как применим для более широкого класса дополнительных уравнений.

Аппроксимация (1.6.54), (1.6.55) допускает простую геометрическую интерпретацию, согласно которой по радиальной переменной используется аппроксимирующий элемент WLB-WLD схемы (см. Рис. 1.2.2 и 1.2.3), а по угловой переменной - WDD схемы (см. Рис. 1.2.1). Из этой геометрической интерпретации, в частности, следует возможность построения положительной аппроксимации решения в ячейке путем соответствующего выбора весовых коэффициентов схемы.

Подстановка дополнительных уравнений (1.6.54) и (1.6.55) в балансные соотношения (1.6.3) и (1.6.49) приводит к системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ и ψ^r вида (1.2.53), где:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= |\mu| A^+ (1 - P_r) + \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu) + \sigma V, \quad a_{12} = \mu A^+ (Q_r + P_r) - \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu) \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c), \\
a_{21} &= -\mu \left[V - \frac{1}{2} A^+ \Delta r (1 - P_r) \right] + \delta^s \sigma V + \delta^c \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu), \\
a_{22} &= |\mu| \Delta r \frac{A^+}{2} (Q_r + P_r) + \frac{C^r}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu^r) + \sigma V^r - \delta^c \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\mu) \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c), \\
b_1 &= VS + |\mu| (A^- - A^+ P_r) \psi^- + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} P_\mu + \alpha_{m-1/2}) \psi_{m-1/2}, \\
b_2 &= V^r S^r - \mu \Delta r \frac{1}{2} (A^+ P_r + A^-) \psi^- + \frac{C^r}{w} (\alpha_{m+1/2} P_\mu^r + \alpha_{m-1/2}) \psi_{m-1/2}^r + \\
&+ \delta^s VS + \delta^c \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} P_\mu + \alpha_{m-1/2}) \psi_{m-1/2}
\end{aligned} \tag{1.6.57}$$

Разностная схема для граничных ячеек $\mu = \pm 1$ состоит из уравнения баланса нулевого порядка (1.6.8), в котором вместо (1.6.9) используется более точное соотношение:

$$\psi_{i,1/2} \approx \psi_i^{(0)} - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi_i^r, \tag{1.6.58}$$

учитывающее линейную аппроксимацию решения в ячейке, уравнения баланса первого порядка, которое получается интегрированием уравнения (1.6.2) с весом $(r - r_i - \delta_i^s)$, а также дополнительного уравнения WLB-WLD схемы по радиальной переменной (1.6.54):

$$|\mu| \left[(A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + (A^- - A^+) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right) \right] + \sigma V \psi = VS, \tag{1.6.59}$$

$$\mu \left[\frac{\Delta r}{2} (A^+ \psi^+ + A^- \psi^-) - V \psi - C^r \psi_{i,1/2}^r \right] + \Lambda + \sigma V^r \psi_i^r = V^r S^r, \tag{1.6.60}$$

$$\psi^+ = (1 - P_r) \psi + (Q_r + P_r) s \psi^r + P_r \psi^-, \quad s = \text{sign}(\mu), \tag{1.6.61}$$

где

$$\psi_{i,1/2}^r = \frac{1}{V_{c,i}^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{1/2}) (r - r_i - \delta_i^c) r dr, \quad \psi_i^r \equiv \psi_i^{(1)} = \frac{1}{V_i^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi(r, \mu_{1/2}) (r - r_i - \delta_i^s) r^2 dr,$$

$$S_i^r \equiv S_i^{(1)} = \dots,$$

$$\Lambda = \delta^s (\sigma V \psi - VS) + \delta^c |\mu| (A^- - A^+) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right). \tag{1.6.62}$$

Дополнительно будем предполагать, что

$$\psi_{i,1/2}^r \approx \psi_i^r. \quad (1.6.63)$$

Подстановка дополнительного уравнения (1.6.61) в балансные соотношения (1.6.59) и (1.6.60) приводит к системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ и ψ^r вида (1.2.53), где:

$$\begin{aligned} a_{11} &= |\mu|(A^- - A^+ P_r) + \sigma V, \quad a_{12} = \mu A^+ (Q_r + P_r) + \mu C \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c), \\ a_{21} &= \mu \left[\frac{1}{2} \Delta r A^+ (1 - P_r) - V \right] + \delta^s \sigma V - \delta^c \mu C, \\ a_{22} &= |\mu| \Delta r \frac{A^+}{2} (Q_r + P_r) - \mu C^r + \sigma V^r + \delta^c \mu C \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c), \\ b_1 &= VS + |\mu|(A^- - A^+ P_r) \psi^-, \quad b_2 = V^r S^r - \mu \Delta r \frac{1}{2} (A^+ P_r + A^-) \psi^- + \delta^s VS. \end{aligned} \quad (1.6.64)$$

Определение положительности для WLB/QC-WLD схемы в сферической геометрии основывается на следующих неравенствах, имеющих место для любой неотрицательной интегрируемой функции $\psi(r, \mu)$ в ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\mu_{m-1/2}, \mu_{m+1/2})$:

$$-\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^s\right) \frac{V}{V^r} \psi \leq \psi^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^s\right) \frac{V}{V^r} \psi, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m\pm 1/2} \leq \psi_{m\pm 1/2}^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m\pm 1/2}. \quad (1.6.65)$$

Границы положительности для отношения первого и нулевого радиальных пространственных моментов изображены на Рис. 1.6.1б. Отметим, что точные равенства в (1.6.65) реализуются при $\psi(r) \sim \delta(r - r_{i\pm 1/2})$. Положительная схема из данного семейства должна при неотрицательных входящих в ячейку потоках и источнике:

$$\begin{aligned} \psi^- \geq 0, \quad \psi_{m-1/2} \geq 0, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m-1/2} \leq \psi_{m-1/2}^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m-1/2}, \\ S \geq 0, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^s\right) \frac{V}{V^r} S \leq S^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^s\right) \frac{V}{V^r} S \end{aligned} \quad (1.6.66)$$

обеспечивать неотрицательные значения потока в ячейке:

$$\begin{aligned} \psi^+ \geq 0, \quad \psi_{m+1/2} \geq 0, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m+1/2} \leq \psi_{m+1/2}^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{C}{C^r} \psi_{m+1/2}, \\ \psi \geq 0, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^s\right) \frac{V}{V^r} \psi \leq \psi^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^s\right) \frac{V}{V^r} \psi. \end{aligned} \quad (1.6.67)$$

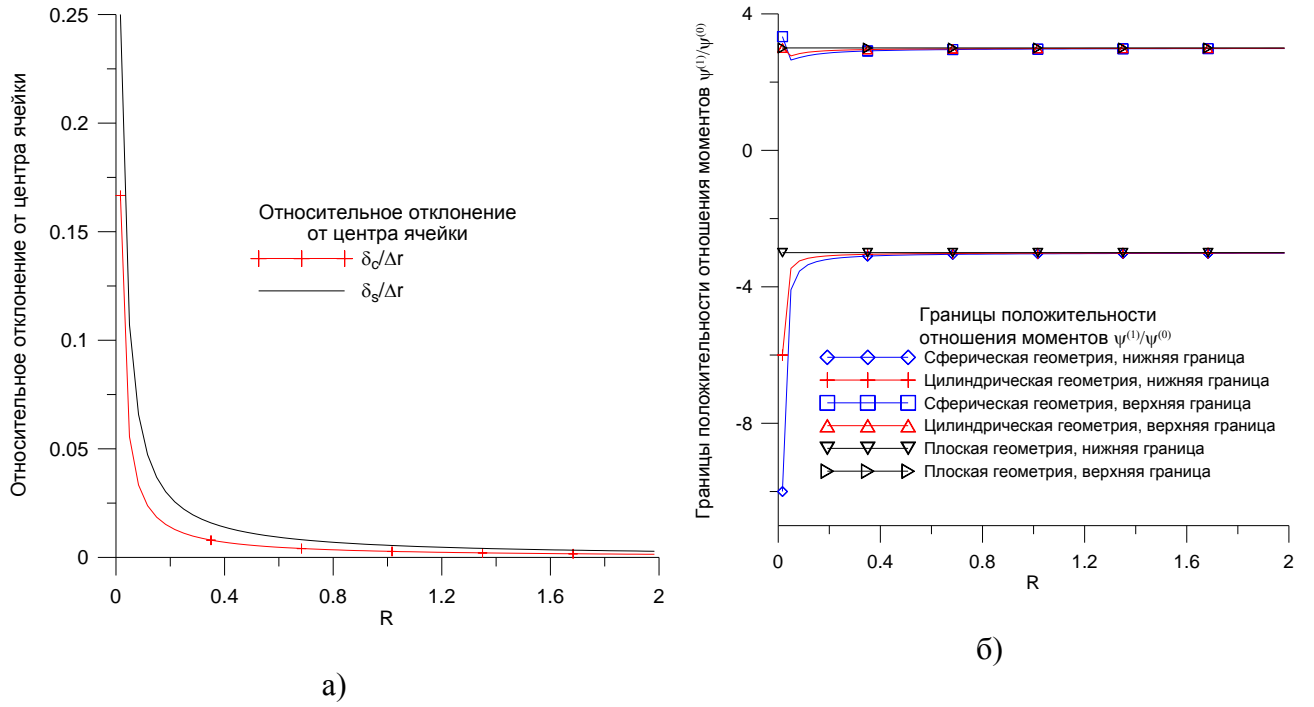


Рисунок 1.6.1. Относительная величина сдвигов δ_i^s и δ_i^c в определении радиальных пространственных моментов (а) и границы положительности для отношения $\psi^{(1)}/\psi^{(0)}$ (б) в окрестности $r = 0$

Расчетные формулы WLB/QC-WLD схемы в 1D цилиндрической геометрии получаются из соответствующих формул для сферической геометрии после замены:

$\mu_m \rightarrow \xi_{l,m}$, $\alpha_{m\pm 1/2} \rightarrow \alpha_{l,m\pm 1/2}$ (где коэффициенты $\alpha_{m\pm 1/2}$ находятся из рекуррентных соотношений (1.6.46)), $w_m \rightarrow w_{l,m}$, $\delta^s \rightarrow \delta^c$, $\delta^c \rightarrow 0$ и подстановки:

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad V_i = \frac{1}{2}(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad V_i^r = V_{c,i}^r = \frac{(\Delta r_i)^2}{6}(r_i - \delta_i^c), \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}, \quad C_i^r = \frac{(\Delta r)^2}{6},$$

$$\psi_{i,l,m}^r = \frac{1}{V_i^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_{l,m}(r)(r - r_i - \delta_i^c)r dr, \quad \psi_{i,l,m\pm 1/2}^r = \frac{6}{(\Delta r)^2} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_{l,m\pm 1/2}(r)(r - r_i)dr. \quad (1.6.68)$$

Формулы, позволяющие проанализировать условия положительности WLB/QC-WLD схемы в одномерной сферической геометрии, существенно более громоздки, чем в случае плоской геометрии и поэтому мы приведем здесь только результаты их анализа [34].

1. Системы уравнений для центральных и граничных ячеек, получающиеся после подстановки дополнительных уравнений в балансные соотношения являются однозначно разрешимыми, так как соответствующие определители отличны от нуля.

2. Значение $\psi^{(0)}$ при неотрицательных входных граничных потоках и источниках всегда положительно для рассматриваемого диапазона изменения весов (1.6.54), (1.6.55).

3. Для WLD схемы ($P_r = 0, 1/E^- \leq Q_r < \infty$) при дополнительном условии $P_\mu^r \leq P_\mu$ выполняется неравенство:

$$E^- \psi^{(0)} + s\psi^{(1)} \geq 0, \quad E^- = V \left(\frac{\Delta r}{2} + s\delta_s \right) / V^r. \quad (1.6.69)$$

На убывающих вдоль направления движения частицы для WLD. схемы $\psi^+ \geq 0$ всегда при:

$$Q_r \leq 1/E^-, \quad P_\mu^r \leq P_\mu. \quad (1.6.70)$$

4. На растущих вдоль направления движения частицы решениях выполнения неравенства

$$E^+ \psi^{(0)} - s\psi^{(1)} \geq 0, \quad E^+ = V \left(\frac{\Delta r}{2} - s\delta_s \right) / V^r \quad (1.6.71)$$

можно добиться в рамках WLD₊ схемы ($Q_r > 1$) путем увеличения веса Q_r .

1.7. Адаптивная WDD и MDS_N схемы для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях

Построение AWDD схемы для случая плоской геометрии [6] рассмотрено выше в разделе 1.3. Ее обобщение на случай криволинейной неодномерной геометрии было предложено в работах [10, 4, 11], а первые численные результаты для 3D геометрии получены в [12]. Вышеуказанное обобщение основывается на возможности "квазиодномерного" представления по каждой из переменных уравнения баланса для центральных ячеек. Например, в одномерной сферической геометрии уравнение баланса (1.6.3) может быть записано в "квазиодномерном" виде, идентичном уравнению баланса для граничных ячеек (1.6.8), как по радиальной (1.6.36), так и по угловой (1.6.37) переменным r и μ . К системам (1.6.8), (1.6.36) и (1.6.37) может быть применен алгоритм выбора весов P_r и P_μ , аналогичный предложенному в работе [6] для случая плоской геометрии. Рассмотрим его на примере системы (1.6.36) для радиальной переменной r .

Из уравнения баланса (1.6.36) следует, что при $\psi_r^- = \psi_r^+ = \psi$ поток в ячейке постоянен и равен S_r / σ_r . Согласно [6, 4], реальное изменение потока в ячейке по r определяется эффективной оптической толщиной ячейки по r , которая для случая WDD схемы по r ($0 \leq P_r \leq 1$) имеет вид:

$$h'_r = h_r \left(1 - \frac{S_r}{\sigma_r \psi} \right) = (1 + P_r) \left(\frac{\psi^- - \psi}{\psi} \right) \equiv (1 + P_r) u_r, \quad h_r = \frac{(1 + P_r) \sigma_r v}{|\xi| (A^- + A^+ P_r)} \xrightarrow{P_r=1} \frac{\sigma_r \Delta r}{|\xi|}. \quad (1.7.1)$$

Здесь величина h_r имеет смысл оптической толщины ячейки по r . По абсолютной величине величина h'_r , как правило, меньше, а в случае слабо меняющегося вдоль r решения – значительно меньше, чем h_r . Справедливы следующие теоремы [14, 17], обобщающие теоремы, приведенные в [6, 10, 4, 11], а также теоремы 1.3.1 и 1.3.2 в разделе 1.3 данной работы:

Теорема 1.7.1. Пусть $\psi_r^-, S_r \geq 0$. Тогда если $P_r = P_r^0$ при $u_r \leq 1/P_r^0$ и $0 \leq P_r \leq (1 - \delta_r P_r^0)/(u_r - \delta_r)$ при $u_r > 1/P_r^0$, где $\delta_r = A^+/(A^- + A^+ P_r^0)$, то $\psi_r^+, \psi \geq 0$.

Теорема 1.7.2. Пусть $\psi_r^-, S_r \geq 0$, а $b \geq 1$ - параметр. Тогда если вес $P_r = P_r^0$ при $P_r^0 b |u_r| \leq 1 - \delta_r P_r^0$ и удовлетворяет неравенству $P_r < (1 - \delta_r P_r^0)/b |u_r|$ при $P_r^0 b |u_r| > 1 - \delta_r P_r^0$, то имеют место следующие оценки для ψ^+ :

$$\text{при } \psi^- < \frac{S_r}{\sigma_r} \quad \psi^+ < \left(1 + \frac{1 - \delta_r P_r^0}{b}\right) \frac{S_r}{\sigma_r}; \quad \text{при } \psi^- > \frac{S_r}{\sigma_r} \quad \psi^+ > \left(1 - \frac{1 - \delta_r P_r^0}{b}\right) \frac{S_r}{\sigma_r}. \quad (1.7.2)$$

Доказательство теорем 1.7.1 и 1.7.2 аналогично доказательству теорем 1.3.1 и 1.3.2 и мы его здесь не приводим.

Теорема 1.7.1 устанавливает условие положительности для AWDD схемы при экстраполяции по радиальной переменной. В соответствии с этой теоремой вес P_r в AWDD схеме вычисляется по следующей формуле:

$$P_r = \begin{cases} P_r^0, & |u_r| \leq u_0^r, \\ P_r(|u_r|), & |u_r| > u_0^r, \end{cases} \quad (1.7.3)$$

где u_0^r - параметр, $0 < u_0^r < 1/P_r^0$; $P_r(u)$ - корректирующая ("fix-up") функция, которая выбирается из предположения что коррекция является «мягкой»:

$$P_r(u = u_0^r) = P_0, \quad P_r'(u = u_0^r) = 0, \quad (1.7.4)$$

и обеспечивается положительность экстраполяции:

$$0 \leq P_r(u, \delta_r) \leq (1 - \delta_r P_r^0)/(u - \delta_r). \quad (1.7.5)$$

Теорема 1.7.2 устанавливает пределы возможного нарушения монотонности схемы в зависимости от выбора параметра b . Из сравнения уравнений (1.6.26), где $g_r = S_r/\sigma_r$, и (1.7.2) можно сделать вывод, что увеличивая значение параметра b можно улучшить свойства монотонности схемы. В приложении к AWDD схеме Теорема 1.7.2 устанавливает дополнительное ограничение на выбор корректирующей функции $P_r(u, \delta_r)$, а именно, функция $P_r(u, \delta_r)$ (ниже мы опускаем индекс r) должна удовлетворять неравенствам:

$$0 \leq P(u, \delta) \leq \frac{1 - \delta P^0}{u} \quad \text{для } u P^0 > 1 - \delta P^0. \quad (1.7.6)$$

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

$$P(u, \delta) = \frac{(1 - \delta P^0)u + \beta}{u^2 + \gamma u + \alpha}, \quad \gamma P^0 = 1 - \delta P^0 - 2P^0 u_0, \quad \beta = (1 - \delta P^0)\gamma, \quad \alpha P^0 = \beta + P^0 u_0^2, \quad (1.7.7)$$

где параметр u_0 удовлетворяет неравенству:

$$0 < u_0 \leq (1 - \delta P^0)/P^0. \quad (1.7.8)$$

Три частных случая этой формулы имеют практический интерес:

$$u_0 = \frac{1 - \delta P^0}{P^0}, \quad \alpha = 0, \quad \beta = -P^0 u_0^2, \quad \gamma = -u_0, \quad P(u, \delta) = \frac{1 - \delta P^0}{u} = P^0 \frac{u_0}{u} \quad (1.7.9)$$

$$u_0 = \frac{1 - \delta P^0}{2P^0}, \quad \alpha = u_0^2, \quad \beta = \gamma = 0, \quad P(u, \delta) = \frac{(1 - \delta P^0)u}{u^2 + u_0^2}. \quad (1.7.10)$$

$$u_0 = \frac{1 - \delta P^0}{4P^0}, \quad \alpha = 9u_0^2, \quad \gamma = 2u_0, \quad \beta = 8P^0 u_0^2, \quad P(u, \delta) = \frac{4P^0 u_0 u + \beta}{u^2 + \gamma u + \alpha}. \quad (1.7.11)$$

Формула (1.7.9) для корректирующей функции наиболее арифметически проста, однако в этом случае требование непрерывности первой производной в точке $u = u_0$ (1.7.4) не соблюдается.

Формулы (1.7.10) и (1.7.11) обеспечивают более «мягкий» алгоритм коррекции и численный эксперимент показал, что выбор этих корректирующих функции предпочтителен при решении задач в 3D геометрии с большим количеством разностных ячеек.

Приведем еще один вид дробно-рационального выражения для $P(u, \delta)$, которое удовлетворяет неравенству (1.7.5), обеспечивающему положительность экстраполяции (однако более слабому, чем (1.7.6), что не позволяет воспользоваться Теоремой 1.7.2 для оценки максимально возможного "выброса" в разностном решении):

$$P(u, \delta) = \frac{(1 - \delta P^0)u + \beta}{u^2 + \gamma u + \alpha}, \quad \gamma P^0 = 1 - \delta P^0 - 2P^0 u_0, \quad \beta P^0 = (1 - \delta P^0)(1 - 2P^0 u_0), \quad \alpha P^0 = \beta + P^0 u_0^2, \quad (1.7.12)$$

где параметр u_0 удовлетворяет неравенству:

$$0 < u_0 < 1/P^0. \quad (1.7.13)$$

Частным случаем формулы (1.7.12), имеющим практический интерес, является:

$$u_0 = \frac{1}{2}, \quad P^0 = 1, \quad P(u, \delta) = \frac{1 - \delta}{u - \delta + 0.25/u}. \quad (1.7.14)$$

В программе PO3-6.6 [56] для случая одномерной сферической геометрии реализованы следующий вариант AWDD схемы. Вначале ячейка рассчитывается по DD схеме. Затем по формуле

$$P_r = \begin{cases} 1, & U_r \leq U_r^0 \\ P_r(U_r), & U_r > U_r^0 \end{cases}, \quad U_r = b_r |u_r|, \quad u_r = \frac{\psi^- - \psi}{\psi}, \quad (1.7.15)$$

где $b_r \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной r , вычисляется вес P_r . Выбор параметра U_r^0 и функции $P_r(U_r)$ должен обеспечивать положительность схемы и необходимую «мягкость» коррекции, т. е. достаточно плавное изменение веса P_r в зависимости от значения параметра U_r , и требуемый монотонизирующий эффект. Реализовано два варианта такого выбора:
Вариант А (соответствует использованию корректирующей функции (1.7.14)):

$$U_r^0 = \frac{1}{2}, \quad P_r(U_r) = \frac{1 - \delta_r}{U_r - \delta_r + 0.25/U_r}, \quad \delta_r = \frac{A^+}{A^- + A^+}. \quad (1.7.16)$$

Вариант В (соответствует использованию корректирующей функции (1.7.9)):

$$U_r^0 = \frac{A^-}{A^- + A^+} = 1 - \delta_r, \quad P_r(U_r) = U_r^0 / U_r. \quad (1.7.17)$$

Вариант (1.7.16) обеспечивает несколько более «мягкий» алгоритм коррекции и в меньшей степени монотонизирует решение. При $P_r < 1$ ячейка пересчитывается с весом P_r по переменной r . Затем по формуле

$$P_\mu = \begin{cases} 1, & U_\mu \leq U_\mu^0 \\ P_\mu(U_\mu), & U_\mu > U_\mu^0 \end{cases}, \quad U_\mu = b_\mu |u_\mu|, \quad u_\mu = \frac{\psi_{m-1/2}^- - \psi}{\psi}, \quad (1.7.18)$$

где $b_\mu \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной μ ,

$$U_\mu^0 = \frac{1}{2}, \quad P_\mu(U_\mu) = \frac{1 - \delta_\mu}{U_\mu - \delta_\mu + 0.25/U_\mu}, \quad \delta_\mu = \frac{\alpha_{m+1/2}}{\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}} \quad (1.7.19)$$

вычисляется вес P_μ . При $P_\mu < 1$ ячейка пересчитывается с весами P_r и P_μ по переменным r и μ . В РОЗ-6.6 параметры монотонизации выбраны следующим образом: $b_r = b_\mu = 1$.

Как и в плоской геометрии, необходимые и достаточные условия монотонности схемы (1.6.26) и (1.6.27) могут быть использованы для построения эффективного алгоритма монотонизации разностного решения - MDS_N схемы, который практически снимает возможные нарушения монотонности разностного решения. В этом алгоритме расчет веса P_r в "особых" ячейках, находящихся на входе в зону с существенно изменившимися сечениями/источником производится по формуле:

$$P_r = \begin{cases} 1, & |\mu|(A^- + A^+) - \sigma_r V \geq 0 \\ |\mu|A^- / (\sigma_r V - |\mu|A^+), & |\mu|(A^- + A^+) - \sigma_r V < 0 \end{cases}. \quad (1.7.20)$$

Для повышения качества угловых распределений решения может производиться также монотонизация и по угловой переменной μ при пересечении особых характеристик [4]: вес P_μ для разностных ячеек, расположенных сразу после пересечения частицей особой характеристики, вычисляется по формуле:

$$P_\mu = \begin{cases} 1, & (C/w)(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}) - \sigma_\mu V \geq 0 \\ (C/w)\alpha_{m-1/2} / [\sigma_\mu V - (C/w)\alpha_{m+1/2}], & (C/w)(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}) - \sigma_\mu V < 0 \end{cases}. \quad (1.7.21)$$

Для обеспечения положительности решения в остальных ячейках используется AWDD схема (например, вариант схемы, использующий по переменным r и μ корректирующие функции (1.7.16) и (1.7.19)). Как уже отмечалось выше, основным недостатком MDS_N схемы является ее неоднородность, порождающая алгоритмические сложности на этапе идентификации местоположения особенностей.

1.8. Адаптивная WLB/QC-WLD схема для уравнения переноса в одномерных криволинейных геометриях

Адаптивная WLB/QC-WLD схема в одномерной сферической геометрии опирается на возможность одномеризации алгоритма коррекции по радиальной и угловой переменным. По радиальной переменной WLB/QC-WLD схема может быть записана в "квазиодномерной форме", близкой по виду со схемой для углового направления $\mu = -1$ (1.6.59)-(1.6.61) [36]:

$$\begin{aligned} |\mu| \left[(A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + (A^- - A^+) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right) \right] - \Gamma \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r + \sigma_r V \psi = V S_r, \\ \mu \left[\frac{\Delta r}{2} (A^+ \psi^+ + A^- \psi^-) - V \psi - C^r \psi^r \right] + \Lambda_r + \sigma_r^r V^r \psi^r = V^r S_r^r, \end{aligned} \quad (1.8.1)$$

$$\psi^+ = (1 - P_r) \psi + (Q_r + P_r) s \psi^r + P_r \psi^-, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad Q_r = 1 \text{ или } P_r = 0, \quad 1/E^- \leq Q_r < \infty, \quad (1.8.2)$$

где

$$\sigma_r V = \sigma V + \Gamma, \quad V S_r = V S + \Gamma \psi_{m-1/2}, \quad \Gamma \equiv \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2})$$

$$\sigma_r^r V^r = \sigma V^r + \frac{C^r}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu^r \alpha_{m+1/2}),$$

$$\Lambda_r = \delta^s (\sigma V \psi - V S) + \delta^c \left[|\mu| (A^- - A^+) + \Gamma \right] \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right),$$

$$V^r S_r^r = V^r S^r + \frac{C^r}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu^r \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}^r + \delta^c \Gamma \psi_{m-1/2}.$$

Эффективный источник по радиальной переменной является положительным в смысле определения (1.6.66):

$$S_r \geq 0, \quad -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^s\right)VS_r \leq V^r S_r^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^s\right)VS_r \quad (1.8.3)$$

при условии, что исходный источник и входящий поток излучения на грани ячейки $m - 1/2$ положительны. Перепишем дополнительное уравнение (1.8.2) в виде, аналогичном (1.4.6):

$$\psi_r^+ = \psi^{(0)} (1 - Q_r u_1 - P_r u_2), \quad (1.8.4)$$

где

$$u_1 = -\frac{s\psi^r}{\psi} \sim -\frac{\partial\psi/\partial r}{\psi}, \quad u_2 = \frac{\psi - \psi_r^- - s\psi^r}{\psi} \sim \frac{\partial^2\psi/\partial r^2}{\psi}. \quad (1.8.5)$$

Первый этап коррекции - выбор веса P_r в рамках WLB/QC схемы - может быть проведен по алгоритму, используемому в плоской геометрии (см. Раздел 1.4).

Второй этап коррекции - выбор веса Q_r в рамках WLD схемы - нуждается в модификации, так как оценка (1.4.19) зависимости параметра $u_1(Q_r)$ от веса Q_r при $u_1^{LD} \geq 0$, где u_1^{LD} - оценка параметра u_1 по LD схеме с $Q_r = 1$, с учетом неравенства (1.6.69), которое может быть переписано в виде $u_1(Q_r) \leq E^-$, меняется на следующую:

$$u_1(Q_r) \leq \frac{E^- u_1^{LD}}{(1 - Q_r)u_1^{LD} + E^- Q_r}, \quad E^- = V \left(\frac{\Delta r}{2} + s\delta_s \right) / V^r \quad (1.8.6)$$

Соответственно меняется формулировка Теоремы 1.5.1 и вид корректирующей функции $f^Q(u)$ в уравнении (1.4.21) для расчета веса Q , которая в случае одномерной криволинейной геометрии предполагается монотонно-убывающей на интервале $u_0^{LD} < u < E^-$, где $0 < u_0^{LD} \leq 1$, и удовлетворяющей условиям:

$$\frac{1}{E^-} \leq f^Q(u) \leq \frac{u}{(1 + E^-)u - E^-}, \quad f^Q(u_0^{LD}) = 1. \quad (1.8.7)$$

Следующий вариант функции $f^Q(u)$ удовлетворяет данным условиям:

$$f^Q(u) = \frac{u}{\left(\frac{(E^-)^2 - u_0^{LD}}{E^- - u_0^{LD}} \right) u - \frac{u_0^{LD} E^- (E^- - 1)}{E^- - u_0^{LD}}}, \quad 0 < u_0^{LD} \leq 1. \quad (1.8.8)$$

Обычно используется значение $u_0^{LD} = 0.8$.

Для коррекции LD схемы в случае сильно возрастающих решений $u_1^{LD} < -1$ используется WLD₊ схема. Выбор веса $Q > 1$ для этой схемы может быть произведен с использованием гео-

метрической интерпретации WLD₊ схемы в одномерной криволинейной геометрии. Это приводит к замене соотношения (1.4.24) для определения веса Q на:

$$\delta = -\frac{1+3u_1/E^+}{2}, \quad E^+ = V \left(\frac{\Delta r}{2} - s\delta^s \right) / V^r, \quad Q = \frac{1+\delta}{(1-\delta)(1+2\delta)}. \quad (1.8.9)$$

По угловой переменной WLB/QC-WLD схема может быть записана в следующей "квази-одномерной форме":

$$\frac{C}{w} [(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}) + (\alpha_{m-1/2} - \alpha_{m+1/2})\psi] + \sigma_\mu V \psi + |\mu| A^+ (Q_r + P_r) s \psi^r = V S_\mu, \quad (1.8.10)$$

$$\psi_{m+1/2} = (1 + P_\mu) \left[\psi - \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c) \psi^r \right] - P_\mu \psi_{m-1/2}, \quad 0 \leq P_\mu \leq 1,$$

$$\frac{C^r}{w} [(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2}^r - \alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}^r) + (\alpha_{m-1/2} - \alpha_{m+1/2})\psi^r] + \sigma_\mu^r V^r \psi^r + \left\{ \mu \left[\frac{\Delta r}{2} A^+ (1 - P_r) - V \right] - (\delta^s - \delta^c) \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) \right\} \psi = V^r S_\mu^r$$

$$\psi_{m+1/2}^r = (1 + P_\mu^r) \psi^r - P_\mu^r \psi_{m-1/2}^r, \quad 0 \leq P_\mu^r \leq 1, \quad (1.8.11)$$

где

$$\sigma_\mu V = \sigma V + |\mu| (A^- - P_r A^+), \quad V S_\mu = V S + |\mu| (A^- - P_r A^+) \psi^-,$$

$$\sigma_\mu^r V^r = \sigma V^r + |\mu| A^+ (Q_r + P_r) \left(\frac{\Delta r}{2} - s\delta^s \right) - \mu C^r,$$

$$V^r S_\mu^r = V^r S^r - \mu \left[A^+ P_r \left(\frac{\Delta r}{2} - s\delta^s \right) + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s\delta^s \right) \right] \psi^- + (\delta^s - \delta^c) \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}, \quad (1.8.12)$$

Прежде всего отметим, что при условии положительности экстраполяции по радиальной переменной r при использовании в экстраполяционных уравнениях (1.8.10) и (1.8.11) по угловой переменной μ шаговой схемы: $P_\mu = P_\mu^r = 0$ имеет место также положительность экстраполяции по μ , так как в этом случае $\psi_{m+1/2} = \psi - 2(\delta^s - \delta^c) \psi^r / \Delta r \approx \psi$, $\psi_{m+1/2}^r = \psi^r$. Таким образом, путем уменьшения весов P_μ и P_μ^r всегда можно добиться положительности экстраполяции по μ если выбор весов P_r и Q_r в уравнении (1.8.2) обеспечивает положительность экстраполяции по r .

Полагая $P_\mu^r = P_\mu$ и исключая из системы уравнений (1.8.10)-(1.8.11) величины $\psi_{m+1/2}^r$ и ψ^r , можно получить для величин ψ and $\psi_{m+1/2}$ систему, которая аналогична системе (1.6.37) для экстраполяции по угловой переменной μ в случае использования WDD схемы. Таким образом, алгоритм определения веса P_μ , основывающийся на оценке градиентов потока в ячейке по

угловой переменной μ , может быть применен и в данном случае. В итоге, вес P_μ вычисляется согласно формулам (1.7.18) и (1.7.19), а вес P_μ^r полагается равным P_μ : $P_\mu^r = P_\mu$. Стандартный выбор параметра монотонизации в уравнении (1.7.18): $b_\mu = 1$.

1.9. Численные результаты использования AWDD и AWLB/QC-WLD схем в одномерных криволинейных геометриях

В данном разделе мы приведем численные результаты для одномерных сферической и цилиндрической геометрий, демонстрирующие сравнительную точность DD, AWDD (варианты с корректирующей функцией (1.7.16) - AWDD₁ и (1.7.17) с $b = 1$ - AWDD₂), LD, LB/QC, AWLB/QC-WLD (сокращенно AWLB схема) (вариант с корректирующей функцией (1.4.15) с $b = 3$ и $g(u)$ (1.4.17) для расчета веса P WLB схемы, и с корректирующими функциями (1.8.8) с $u_0^{LD} = 0.85$ и (1.8.9) для расчета веса Q WLD схемы) и AWLD (с набором корректирующих функций для расчета веса Q WLD схемы, используемым в AWLB схеме). В качестве тестовой задачи рассмотрим обобщение одногрупповой 4-х зонной задачи с изотропным рассеянием в плоской геометрии [47], изображенной на Рис. 1.5.1, на случай одномерных сферической и цилиндрической геометрий, получаемое заменой пространственной переменной x на радиальную переменную r .

В качестве точного решения этой задачи в одномерной сферической геометрии использовалось решение задачи, полученное с использованием LB/QC схемы 4-ого порядка точности на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta x = 3/64$ (число пространственных интервалов по зонам составило: 64+64+640+256) и с квадратурой ES_{128} [6]. Точность сходимости итераций составляет 10^{-10} . Для ускорения внутренних итераций использовалась согласованная с WLB-WLD схемой KP_1 схема ускорения итераций [48, 49], что позволило уменьшить число внутренних итераций в рассматриваемой задаче с примерно 296 до 13.

В Табл. 1.9.1 и 1.9.2 показаны относительные ошибки $\delta_{average}$ и δ_{sum} в расчете нулевого пространственного момента скалярного потока $\Phi_i^{(0)}$ и полного числа частиц $\sum_i \Phi_i^{(0)} V_i$:

$$\delta_{average} = \max_{i \in K_j} \frac{\Phi_i^{(0)} - \Phi_i^{(0)ex}}{\Phi_i^{(0)ex}}, \quad \delta_{sum} = \frac{\sum_i \Phi_i^{(0)} V_i - \int_0^R \Phi^{ex}(r) dV}{\int_0^R \Phi^{ex}(r) dV}. \quad (1.9.1)$$

В уравнении (1.9.1) $\Phi^{ex}(r)$ - "точное" решение, K_j - j -ая пространственная зона, $j = 1, \dots, 4$, пространственной области, изображенной на Рис. 1.5.1.

Таблица 1.9.1. Относительная ошибка аппроксимации $\delta_{average}$ при решении модельной задачи (Рис. 1.5.1) в одномерной сферической геометрии, %. Для 1-ой зоны указаны ошибка в 1-ой ячейке зоны и (в скобках) максимальная ошибка по остальным ячейкам зоны

Шаг Δr	Квад- ратура	Зона	Схема						
			DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB
3	ES_{16}	1	25.	26.	30.	8.4	8.3	-7.6	-5.1
		2	-4.3	-5.7	-2.6	-0.98	-0.94	2.2	1.5
		3	-2.8E+7	3.9E+2	2.3E+3	-3.0E+3	41.	1.7E+6	40.
		4	-6.4	-5.7	-6.6	-3.6	-3.6	0.44	8.6E-2
3/2	ES_{16}	1	-9.5 (-3.6)	-7.6 (-2.2)	-17. (1.4)	-3.6 (1.0)	-3.6 (1.0)	1.9 (-1.3)	-2.0 (-0.74)
		2	1.7	2.2	-0.37	0.4	0.4	0.24	0.35
		3	-3.2E+6	-92.	72.	-52.	-51.	3.4E+4	-29.
		4	-4.5	-3.0	-5.1	-1.7	-1.6	0.26	-8.5E-2
3/4	ES_{16}	1	2.2 (-6.0)	2.7 (-6.0)	-2.1 (-6.3)	1.6 (-1.2)	1.6 (-1.2)	0.58 (0.69)	0.62 (0.71)
		2	-2.6	-2.8	-1.6	-0.64	-0.64	0.39	0.36
		3	4.3E+4	-61.	-57.	-10.	-11.	4.3	4.3
		4	-2.8	-1.8	-3.2	-0.81	-0.71	0.13	0.18
3/8	ES_{16}	1	5.9 (-2.4)	3.1 (-2.3)	0.44 (-2.4)	1.4 (-0.47)	1.4 (-0.47)	0.51 (0.3)	0.51 (0.3)
		2	-2.0	-2.0	-1.8	-0.51	-0.51	0.27	0.17
		3	-21.	-22.	-21.	-3.3	-3.9	3.6	3.5
		4	-1.8	-0.9	2.0	-0.61	-0.6	-0.15	-0.19
3/16	ES_{32}	1	4.4 (-0.85)	1.7 (-0.8)	-0.58 (-0.85)	0.56 (0.2)	0.56 (0.2)	0.14 (-0.11)	0.14 (-0.11)
		2	-1.4	-1.1	1.6	-0.31	-0.31	0.15	0.11
		3	-5.7	-5.7	-5.7	-0.7	-0.74	0.84	0.84
		4	-0.98	-0.82	1.9	-0.29	-0.29	-3.7E-2	-6.3E-2

Таблица 1.9.2. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи (Рис. 1.5.1) в одномерной сферической геометрии, %

Шаг Δr	Квад- ратура	Схема						
		DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB
3	ES_{16}	-0.14	-3.7	-5.6	-1.0	-1.0	4.5E-2	-5.3E-2
3/2	ES_{16}	-7.7E-2	-1.5	-2.3	-0.22	-0.22	-2.7E-3	-2.1E-2
3/4	ES_{16}	-3.0E-2	-0.51	-0.81	-5.1E-2	-4.4E-2	-3.9E-3	6.7E-6
3/8	ES_{16}	-1.2E-2	-0.16	-0.26	-1.5E-2	-1.3E-2	-4.0E-3	-4.6E-3
3/16	ES_{32}	-1.7E-3	-4.3E-2	-7.2E-2	-2.6E-3	-1.8E-3	6.9E-5	3.5E-6
3/32	ES_{64}	-1.3E-4	-1.1E-2	-1.9E-2	-5.1E-4	-2.5E-4	2.4E-4	2.4E-4
3/32	ES_{128}	-3.5E-4			-2.1E-4		4.6E-7	
3/64	ES_{128}	-9.1E-5						

Результаты решения одногрупповой 4-х зонной задачи, изображенной на Рис. 1.5.1, в одномерной цилиндрической геометрии представлены в Табл. 1.9.3 и 1.9.4. В качестве точного решения этой задачи использовалось решение, полученное с использованием LB/QC схемы 4-ого порядка точности на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta x = 3/32$ (число пространственных интервалов по зонам составило: 32+32+320+128) и с квадратурой ES_{64} [6]. Точность сходимости итераций составляла 10^{-10} .

Таблица 1.9.3. Относительная ошибка аппроксимации $\delta_{average}$ (1.9.1) при решении модельной задачи (Рис. 1.5.1) в одномерной цилиндрической геометрии, %. Для 1-ой зоны указаны ошибка в 1-ой ячейке зоны и (в скобках) максимальная ошибка по остальным ячейкам зоны

Шаг Δr	Квад- ратура	Зона	Схема						
			DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB
3	ES_{16}	1	15.	31.	28.	9.0	9.0	-12.0	-5.5
		2	-3.1	-5.5	-3.4	-1.22	-1.2	2.1	1.3
		3	-2.6E+7	1.2E+2	2.0E+3	-2.3E+3	27.	1.4E+6	-26.
		4	-5.7	-5.3	-6.6	-3.4	-3.4	0.4	-9.1E-2
3/2	ES_{16}	1	-33. (-0.45)	-19. (0.86)	-19. (3.2)	-8.3 (2.2)	-7.5 (2.1)	4.9 (-1.9)	-0.47 (-0.27)
		2	0.68	1.7	-0.7	-0.33	-0.33	0.24	0.23

		3	4.1E+6	-93.	31.	-49.	-49.	1.9E+4	16.
		4	-4.1	-3.0	-5.2	-1.6	-1.6	0.23	-9.3E-2
3/4	ES_{16}	1	-4.7 (-8.4)	-7.2 (-6.5)	-9.6 (-5.5)	-0.32 (-1.5)	-0.32 (-1.5)	0.7 (0.99)	0.32 (0.26)
		2	-2.5	-2.4	-1.8	-0.66	-0.66	0.37	0.32
		3	1.4E+4	-59.	-58.	-8.8	-9.1	4.0	2.2
		4	-2.6	-1.9	-3.3	-0.79	-0.74	-0.10	-7.5E-2
3/8	ES_{16}	1	5.3 (-3.3)	-1.8 (-2.3)	-4.0 (2.0)	0.26 (0.64)	0.26 (0.63)	0.20 (0.17)	0.20 (0.11)
		2	-2.4	-2.0	-1.6	-0.62	-0.62	0.12	0.12
		3	-19.	-19.	-19.	-1.8	-2.2	1.5	1.4
		4	-1.8	-0.9	2.0	-0.65	-0.65	-0.22	-0.26
3/16	ES_{32}	1	3.9 (-1.2)	-0.14 (1.1)	-1.4 (1.1)	0.13 (0.29)	0.13 (0.29)	4.1E-2 (6.4E-2)	4.1E-2 (-5.8E-2)
		2	-1.6	-1.1	1.6	-0.36	-0.36	6.3E-2	5.7E-2
		3	-5.0	-5.0	-5.0	0.64	0.42	0.28	-0.3
		4	-1.0	-0.8	1.9	-0.31	-0.31	-7.5E-2	-0.1

Таблица 1.9.4. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} (1.9.1) при решении модельной задачи (Рис. 1.5.1) в одномерной цилиндрической геометрии, %

Шаг Δr	Квад- ратура	Схема						
		DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB/QC	AWLB
3	ES_{16}	-0.15	-3.7	-5.6	-1.0	-1.0	3.5E-2	-5.9E-2
3/2	ES_{16}	-8.2E-2	-1.5	-2.3	-0.23	-0.22	-7.9E-3	-2.6E-2
3/4	ES_{16}	-3.2E-2	-0.5	-0.81	-5.3E-2	-5.0E-2	-8.8E-3	-9.0E-3
3/8	ES_{16}	-1.5E-2	-0.16	-0.26	-1.8E-2	-1.7E-2	-8.8E-3	-9.3E-3
3/16	ES_{32}	-2.9E-3	-4.3E-2	-7.2E-2	-3.5E-3	-3.1E-3	-1.4E-3	-1.6E-3

Как следует из приведенных в Табл. 1.9.1-1.9.4 результатов, в одномерных криволинейных геометриях, как и в случае плоской геометрии, введение коррекции позволяет до определенной степени убрать грубые ошибки аппроксимации на редких сетках при сохранении, достаточно высокой точности расчета интегральных величин. Несмотря на увеличение (примерно, в

1.5-2 раза) числа операций и используемой памяти на ячейку сетки, за счет более высокой точности использование AWLB схемы обеспечивает значительный вычислительный выигрыш по сравнению с AWDD схемой. Так, расчет по AWLB схеме на сетке с шагом $\Delta r = 3/4$ с квадратурой ES_{16} имеет более высокую или сопоставимую точность с расчетом по AWDD схеме на сетке с шагом $\Delta r = 3/16$ с квадратурой ES_{32} .

В криволинейной геометрии DD, LD и LB схемы имеют, соответственно, 2-ой, 3-ий и 4-ый порядок точности по радиальной переменной, однако, вообще говоря, только в пространственных ячейках, для которых $\Delta r \ll r$. Хорошо известно, что в случае DD схемы имеет место понижение точности аппроксимации для нескольких пространственных ячеек в окрестности центра сферы или цилиндра (когда $\Delta r \sim r_i$) при наличии там поглощающей области. На грубых сетках аналогичный эффект (как следует из Табл. 1.9.1 и 1.9.3) наблюдается и для LD и LB схем, однако, с уменьшением шага сетки указанный дефект практически пропадает.

Приведем далее результаты расчета прохождения излучения, падающего изотропно на внутреннюю поверхность однородного сферического слоя толщиной 10 см с внутренним радиусом $R_0 = 1$ см и $R_0 = 10$ см, в предположении что центральная часть сферической области занята поглотителем (см. Рис. 1.9.1). В Табл. 1.9.5 представлена максимальная ошибка в определении скалярного потока в области сферического слоя толщиной 1 см, расположенного на внешней границе сферической области в зависимости от выбранной разностной сетки и схемы. В качестве точного решения задачи принято решение, полученное на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta r = 1/16$ и квадратурой Гаусса S_{128} с использованием LB схемы при точности сходимости итераций 10^{-9} . Через MDS_N в Табл. 1.9.5 и ниже обозначена DD схема с монотонизацией по радиальной переменной при входе в зону по формуле (1.7.20), по угловой переменной при пересечении особой характеристики по формуле (1.7.21) и использованием варианта $AWDD_1$ схемы (с корректирующими функциями (1.7.16) и (1.7.19)) в остальных ячейках.

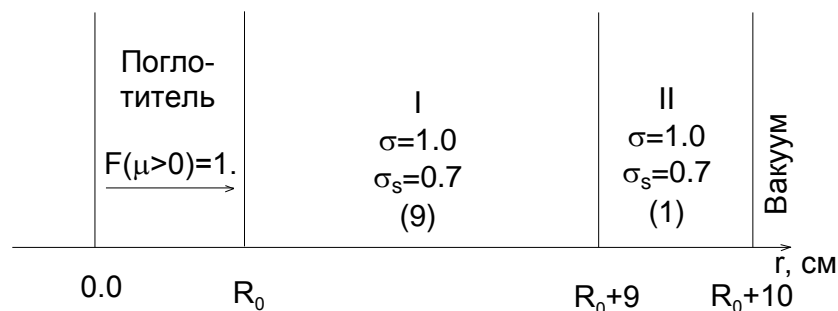


Рисунок 1.9.1. Однородный сферический слой с внутренним радиусом R_0 . Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s и число шагов пространственной сетки по зонам (в скобках)

Таблица 1.9.5. Максимальная ошибка в расчете скалярного потока в зоне 2 толщиной $\Delta r = 1$ см при расчете прохождения излучения через однородный сферический слой, на внутреннюю границу $r = R_0$ которого изотропно падает поток излучения (см. Рис. 1.9.1), при точности сходимости итераций 10^{-9} , %

Сетка по зонам	Квадратура	Схема							
		DD	MDS _N	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
		$R_0 = 1$ см							
9+1	S_8	-1.1E+4	-53.0	-59.0	-13.0	-14.0	-13.0	-0.4	-5.9
18+2	S_{16}	-1.3E+3	-18.0	-21.0	-18.0	-3.0	-2.9	-1.8	-1.8
36+4	S_{32}	-1.2E+2	-5.0	-6.1	-6.0	-0.71	-0.71	-0.53	-0.49
72+8	S_{64}	-14.0	-1.5	-1.6	-1.7	-0.18	-0.18	-0.12	-0.11
		$R_0 = 10$ см							
9+1	S_8	-1.9E+2	-37.0	-39.0	-37.0	-7.2	-7.2	-1.2	-1.2
18+2	S_{16}	-16.0	-13.0	-12.0	-12.0	-1.4	-1.4	-0.47	-0.47
36+4	S_{32}	-3.8	-3.6	-3.5	-3.7	-0.34	-0.36	-0.15	-0.14
72+8	S_{64}	-1.1	-1.2	-0.96	-1.1	-0.11	-0.11	-0.042	-0.036

Приведенные в Табл. 1.9.5 результаты позволяют сделать вывод, что использование AWLB схемы имеет преимущество в данной задаче по сравнению с остальными рассмотренными вариантами схем.

Приведем далее результаты расчета с точностью сходимости итераций 10^{-8} критической сферы с отражателем, изображенной на Рис. 1.9.2. Параметры сферы получены в P_{25} приближении метода сферических гармоник (что соответствует S_{26} приближению при использовании квадратуры Гаусса) в работе [51]. В наших расчетах, результаты которых приведены в Табл. 1.9.6, в зависимости от выбранной пространственной сетки, использовались квадратуры Гаусса порядка N (S_N приближение), $N = 8, 16, \dots, 128$. Зависимость результата расчета k_{eff} от про-

странственной сетки для фиксированной квадратуры S_{64} приведены в Табл. 1.9.7 и на Рис. 1.9.3.

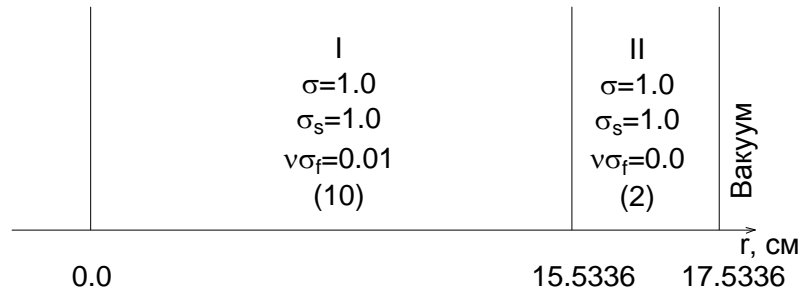


Рисунок 1.9.2. Критическая сфера с отражателем [51]. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , $\nu\sigma_f$ и число шагов пространственной сетки по зонам (в скобках)

Таблица 1.9.6. Ошибка в расчете k_{eff} при расчете критической сферы с отражателем (см. Рис. 1.9.2) [51], %

Сетка по зонам	Квадратура	Схема							
		DD	MDS _N	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
10+2	S_8	0.059	-4.3	-0.76	-1.17	0.0058	0.0060	0.019	0.018
20+4	S_{16}	0.0075	-0.6	-0.20	-0.32	0.0025	0.0025	0.0067	0.0064
40+8	S_{32}	0.0027	-0.11	-0.052	-0.086	0.00075	0.00075	0.0021	0.0019
80+16	S_{64}	0.0008	-0.024	-0.014	-0.023	0.00019	0.00019	0.00059	0.00054
160+32	S_{128}	0.0002	-0.006	-0.0037	-0.0062	0.000042	0.000042	0.00016	0.00015

Таблица 1.9.7. Зависимость от пространственной сетки ошибки в расчете k_{eff} с квадратурой S_{64} для критической сферы с отражателем (см. Рис. 1.9.2) [51], %

Сетка по зонам	Схема		
	DD	LD	LB
10+2	-0.00023	-0.0087	-0.00025
20+4	0.0026	-0.0021	0.00056
40+8	0.0012	-0.00042	0.00059

80+16	0.00077	0.000042	0.00059
160+32	0.00063	0.00043	0.00059

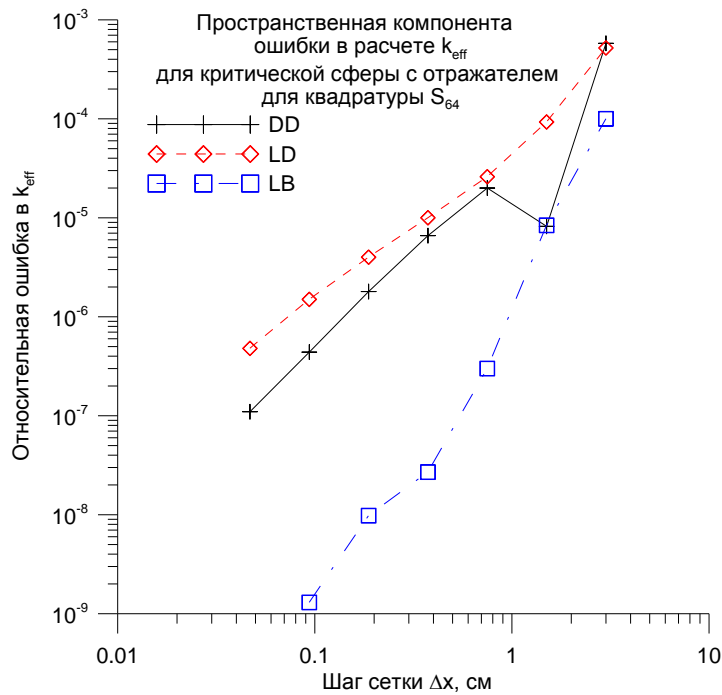


Рисунок 1.9.3. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете критической сферы с отражателем (см. Рис. 1.9.2) [51] с фиксированной квадратурой S_{64} . В качестве точного решения использовалось решение, полученное по LB схеме на сетке 320+64 с точностью сходимости 10^{-12}

Приведем далее результаты расчета с точностью сходимости итераций 10^{-9} критического цилиндра с отражателем, изображенного на Рис. 1.9.4. Параметры цилиндра получены с использованием метода Кейса в работе [52]. В расчетах, результаты которых приведены в Табл. 1.9.8, в зависимости от выбранной пространственной сетки, использовались ES_N квадратуры [6] порядка от $N = 4$ (ES_4 приближение) до порядка $N = 64$. Зависимость результата расчета k_{eff} от пространственной сетки для фиксированной квадратуры ES_{64} приведены в Табл. 1.9.9 и н Рис. 1.9.5.

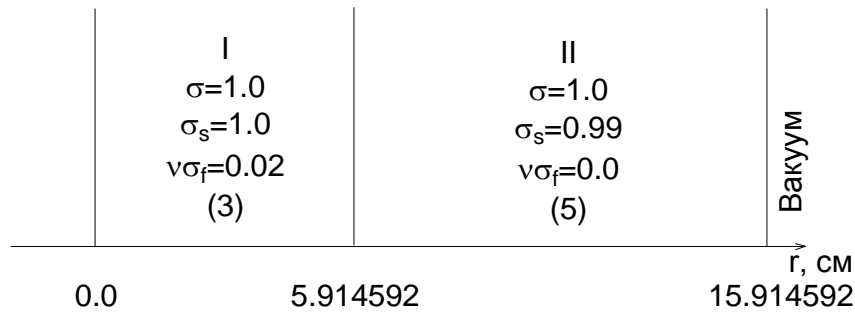


Рисунок 1.9.4. Критический цилиндр с отражателем [52]. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , $\nu\sigma_f$ и число шагов пространственной сетки по зонам (в скобках)

Таблица 1.9.8. Ошибка в расчете k_{eff} при расчете критического цилиндра с отражателем (см.

Рис. 1.9.4) [52], %

Сетка по зонам	Квадратура	Схема							
		DD	MDS _N	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
3+5	ES_4	0.53	-12.0	0.58	0.28	-0.067	-0.066	0.38	0.38
6+10	ES_8	0.14	-1.5	0.095	0.060	0.011	0.011	0.081	0.081
12+20	ES_{16}	0.037	-0.2	0.021	0.011	0.0082	0.0082	0.019	0.019
24+40	ES_{32}	0.0098	-0.032	0.0050	0.0020	0.0032	0.0032	0.0047	0.0047
48+80	ES_{64}	0.0026	-0.0065	0.0012	0.0004	0.00098	0.00098	0.0012	0.0012

Таблица 1.9.9. Зависимость от пространственной сетки ошибки в расчете k_{eff} с квадратурой

ES_{64} критического цилиндра с отражателем (см. Рис. 1.9.4) [52], %

Сетка по зонам	Схема		
	DD	LD	LB
3+5	0.33	-0.42	0.00045
6+10	0.085	-0.07	0.0012
12+20	0.022	-0.009	0.0012
24+40	0.0065	-0.0003	0.0012
48+80	0.0026	0.00098	0.0012
96+120	0.0020	0.0011	0.0012

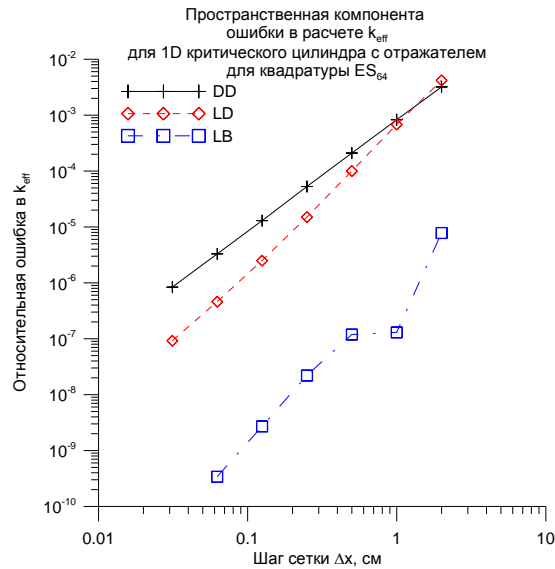


Рисунок 1.9.5. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете критического цилиндра отражателем (см. Рис. 1.9.4) [52] с фиксированной квадратурой ES_{64} . В качестве точного решения использовалось решение, полученное по LB схеме на сетке 192+320 с точностью сходимости 10^{-12}

Точность расчета k_{eff} в вышерассмотренных задачах для двухзонных критических сферы и цилиндра зависит как от пространственной сетки, так и от квадратуры. По результатам расчетов, представленных в Табл. 1.9.6 и 1.9.8, предпочтительными выглядят результаты, полученные по LD схеме. Однако из Табл. 1.9.7 и 1.9.9 и Рис. 1.9.3 и 1.9.5 следует, что асимптотическое значение k_{eff} , соответствующее фиксированной квадратуре, при сгущении пространственной сетки достигается быстрее всего для LB схемы.

Свойства монотонности рассматриваемых схем в криволинейной геометрии можно проиллюстрировать на примере решения аналога тестовой гетерогенной задачи Рида [53] для одномерной сферической геометрии, отличающейся от задачи в плоской геометрии (см. Рис. 1.5.5) меньшей величиной источника $F = 0.7$ в зоне IV. Результаты расчета скалярного потока для этой задачи на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta r = 0.2$ см и квадратурой ES_8 представлены на Рис. 1.9.6. Как следует из этого рисунка, AWDD схема с корректирующей функцией (1.7.17) по радиальной переменной и значением монотонизирующего параметра $b = 1$ обладает улучшенными свойствами монотонности по сравнению с DD схемой. MDS_N , LB/QC и LD схемы решают данную задачу без видимых нарушений монотонности скалярного потока, хотя и не являются строго монотонными.

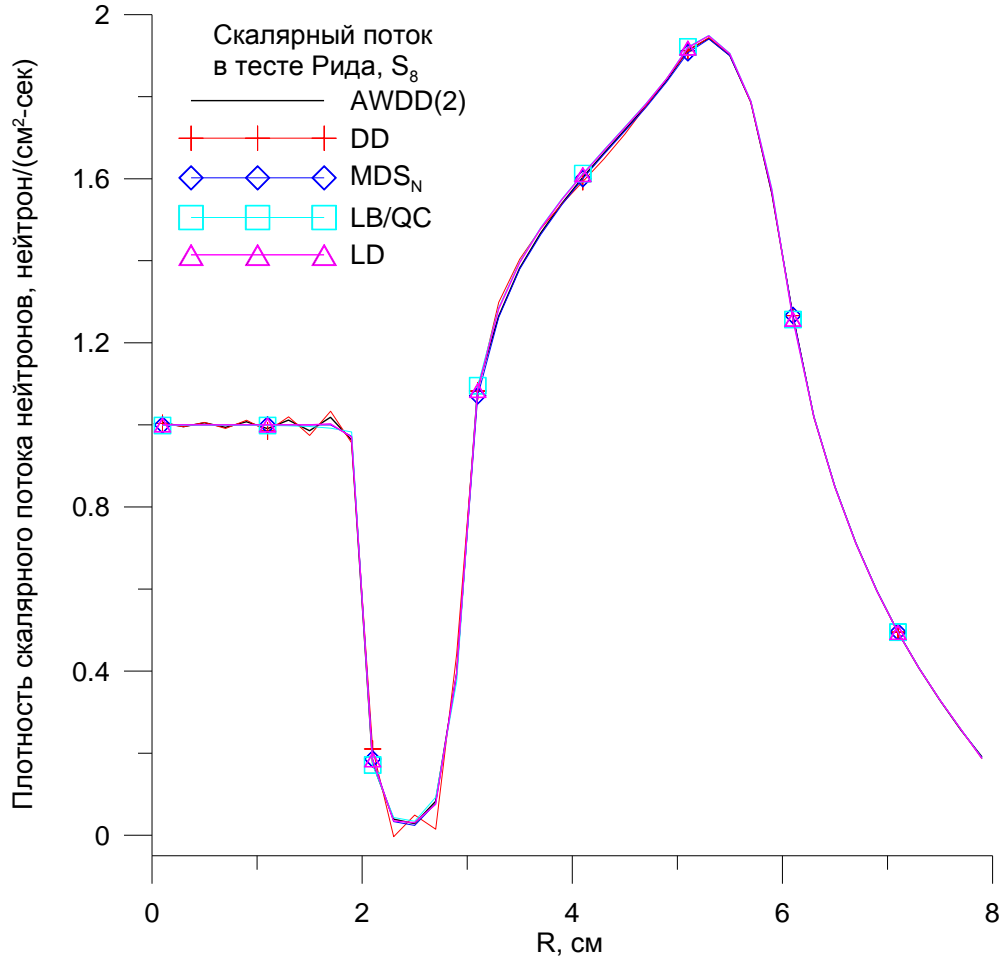


Рисунок 1.9.6. Результаты расчета скалярного потока нейтронов в тестовой гетерогенной задаче Рида (см. Рис. 1.5.5) в сферической геометрии с измененной величиной источника $F = 0.7$ в зоне IV с использованием AWDD₂, DD, MDS_N, LB/QC и LD схем

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

В данном разделе мы рассмотрим построение и некоторые свойства семейств WDD и WLB-WLD схем в 2D x, z и r, z геометриях, реализованных в программе КАСКАД-С [57]. Рассмотрение начнем со случая x, z геометрии. В этой геометрии отсутствует зависимость решения от переменной y и уравнение переноса (1.1.15) приобретает вид [4, 2, 3]:

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \sigma \psi(x, z, \xi, \mu) = S(x, z, \xi, \mu), \quad x_{\text{int}} \leq x \leq x_{\text{out}}, \quad z_{\text{bot}} \leq z \leq z_{\text{top}}. \quad (1.10.1)$$

Здесь ξ и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы (1.1.16), который с учетом имеющейся в данной геометрии симметрии:

$\psi(x, z, \mu, \varphi) = \psi(x, z, \mu, 2\pi - \varphi)$ изменяется в пределах полусферы: $-1 \leq \xi, \mu \leq 1, 0 \leq \varphi \leq \pi$. Правую часть уравнения (1.10.1), учитывая имеющуюся симметрию, можно представить в виде:

$$S(x, z, \mu, \varphi) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} \sum_{m=0}^l Y_l^m(\mu, \varphi) \Phi_l^m(x, z) + f(x, z, \mu, \varphi). \quad (1.10.2)$$

Для аппроксимации интеграла рассеяния вводится квадратура (см. Рис. 1.10.1), которая разбивает рассматриваемые 4 октанта $-1 \leq \xi, \mu \leq 1, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq \pi$ на L полос по переменной μ веса w_l , а каждая полоса $l, l=1, \dots, L$, дополнительно еще разбивается на M_l секторов веса $w_{l,m}$, где индекс m на l -ом слое пробегает значения: $m=1, \dots, M_l$. Нумерация узлов по φ на l -ом слое соответствует возрастанию $\xi_{l,m}$ (убыванию $\varphi_{l,m}$).

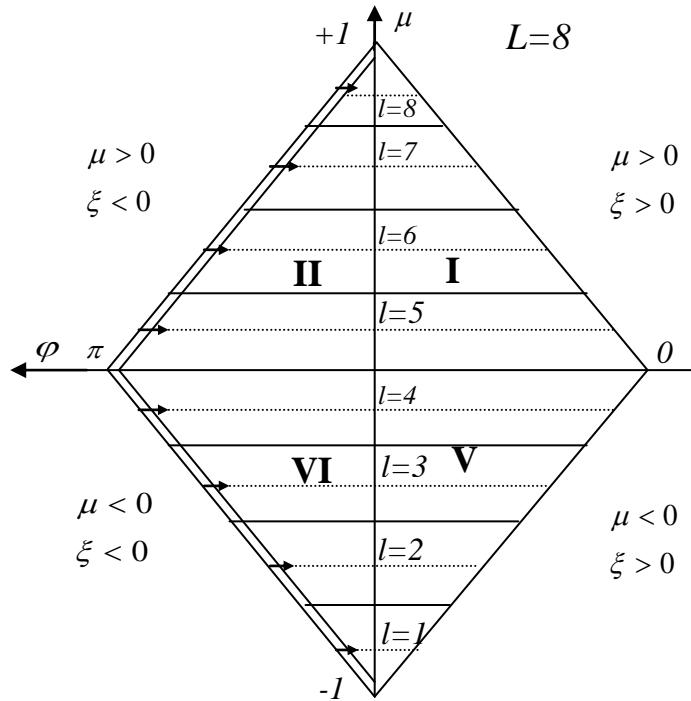


Рисунок 1.10.1. Последовательность расположения слоев квадратуры с одинаковыми значениями μ_l по октантам передней полусферы $\mu \in [-1, 1], \varphi \in [0, \pi]$ угловых направлений

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^\pi d\varphi F(\mu, \varphi) \cong \sum_{l=0}^L \sum_{m=1}^{M_l} w_{l,m} F(\mu_l, \varphi_{l,m}), \quad \sum_{l=0}^L \sum_{m=1}^{M_l} w_{l,m} = 2\pi, \quad M_l = M_l^- + M_l^+, \quad \sum_{l=1}^L M_l = M. \quad (1.10.3)$$

В (1.10.3) M_l^- и M_l^+ задают, соответственно, число узлов с $\varphi_{l,m} \in [\pi/2, \pi]$ и $\varphi_{l,m} \in [0, \pi/2]$ на слое μ_l ; угловые направления на слое нумеруются в направлении убывания φ , M - полное число узлов квадратуры. В r, z геометрии дополнительно вводятся узлы $\varphi_{l,1} = \pi$ с нулевыми весами

$w_{l,1} = 0$. В r, z геометрии эти направления используются как граничные для начала расчета слоя с $\mu = \mu_l, m = 1, \dots, M_l$.

Уравнения баланса нулевого и первого порядка получаются путем интегрирования уравнения (1.10.1) 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 $2(z - z_k) / \Delta z$:

$$|\xi| \Delta z (\psi_R - \psi_L) + |\mu| \Delta x (\psi_T - \psi_B) + \sigma V \psi = VS, \quad (1.10.4)$$

$$\xi \Delta x \Delta z [(\psi_R + \psi_L) / 2 - \psi] + |\mu| v_x^1 (\psi_T^x - \psi_B^x) + \sigma V^x \psi^x = V^x S^x, \quad (1.10.5)$$

$$|\xi| v_z^1 (\psi_R^z - \psi_L^z) + \mu \Delta x \Delta z [(\psi_T + \psi_B) / 2 - \psi] + \sigma V^z \psi^z = V^z S^z. \quad (1.10.6)$$

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 :

$$\begin{aligned} \psi = \psi^{(0,0)} &= \frac{1}{\Delta x \Delta z} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi(x, z) dx dz, \quad \psi^x = \psi^{(1,0)} = \frac{1}{v_x^1 \Delta z} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (x - x_i) \psi(x, z) dx dz, \\ \psi^z = \psi^{(0,1)} &= \frac{1}{\Delta x v_z^1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (z - z_k) \psi(x, z) dx dz, \quad S = S^{(0,0)}, \quad S^x = S^{(1,0)}, \quad S^z = S^{(0,1)}, \end{aligned} \quad (1.10.7)$$

$\psi_L, \psi_L^z, \psi_R, \psi_R^z, \psi_B, \psi_B^x, \psi_T$ и ψ_T^x , - нулевые и первые пространственные моменты по левой, правой, нижней и верхней граням пространственной ячейки:

$$\begin{aligned} \psi_{R(L)} &= \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, k}, \xi > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, k}, \xi < 0 \end{cases}, \quad \psi_{T(B)} = \begin{cases} \psi_{i, k\pm 1/2}, \mu > 0 \\ \psi_{i, k\mp 1/2}, \mu < 0 \end{cases}, \quad \psi_{R(L)}^z = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, k}^z, \xi > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, k}^z, \xi < 0 \end{cases}, \quad \psi_{T(B)}^x = \begin{cases} \psi_{i, k\pm 1/2}^x, \mu > 0 \\ \psi_{i, k\mp 1/2}^x, \mu < 0 \end{cases}, \\ \psi_{i\pm 1/2, k} &= \frac{1}{\Delta z} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi(x_{i\pm 1/2}, z) dz, \quad \psi_{i, k\pm 1/2} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi(x, z_{k\pm 1/2}) dx, \\ \psi_{i\pm 1/2, k}^z &= \frac{1}{v_z^1} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (z - z_k) \psi(x_{i\pm 1/2}, z) dz, \quad \psi_{i, k\pm 1/2}^x = \frac{1}{v_x^1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (x - x_i) \psi(x, z_{k\pm 1/2}) dx, \\ v_x &= \Delta x, \quad v_z = \Delta z, \quad v_x^1 = \frac{(\Delta x)^2}{6}, \quad v_z^1 = \frac{(\Delta z)^2}{6}, \quad V = \Delta x \Delta z, \quad V^x = \Delta z v_x^1, \quad V^z = \Delta x v_z^1. \end{aligned} \quad (1.10.8)$$

WDD схема получается добавлением к уравнению баланса нулевого порядка (1.10.4) следующих дополнительных уравнений:

$$\psi_R = (1 + P_x) \psi - P_x \psi_L, \quad \psi_T = (1 + P_z) \psi - P_z \psi_B, \quad 0 \leq P_x, P_z \leq 1. \quad (1.10.9)$$

Она соответствует аппроксимации решения в ячейке линейным элементом с разрывами на входящих гранях ячейки. Для 1-ого октанта ($\mu > 0, \xi > 0$) он имеет вид:

$$\psi(x, z) = \psi + \frac{2(x - x_i)}{\Delta x} \psi^x + \frac{2(z - z_k)}{\Delta z} \psi^z, \quad (1.10.10)$$

где:

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{2}(\psi_{i-1/2}^+ + \psi_{i+1/2}^+) = \frac{1}{2}(\psi_{k-1/2}^+ + \psi_{k+1/2}^+), \quad \psi^x = \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}^+), \quad \psi^z = \frac{1}{2}(\psi_{k+1/2} - \psi_{k-1/2}^+), \\ \psi_{i-1/2}^+ &= \psi_{i-1/2} - \Delta_i^-, \quad \psi_{k-1/2}^+ = \psi_{k-1/2} - \Delta_k^-, \quad \Delta_i^- = (1 - P_x)(\psi - \psi_{i-1/2}), \quad \Delta_k^- = (1 - P_z)(\psi - \psi_{k-1/2}).\end{aligned}\tag{1.10.11}$$

WLB-WLD схема получается добавлением к уравнениям баланса нулевого и первого порядка (1.10.4), (1.10.5) и (1.10.6) следующих 4-х дополнительных уравнений [35, 36]:

$$\begin{aligned}\psi_R &= (1 - P_x)\psi + (P_x + Q_x)s_x\psi^x + P_x\psi_L, \quad \psi_T = (1 - P_z)\psi + (P_z + Q_z)s_z\psi^z + P_z\psi_B, \\ \psi_R^z &= \psi^z + T_x s_x s_z \psi^x, \quad \psi_T^x = \psi^x + T_z s_x s_z \psi^z, \quad s_x = \text{sign}(\xi), \quad s_z = \text{sign}(\mu).\end{aligned}\tag{1.10.12}$$

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:

$$0 \leq P_t \leq 1, \quad Q_t = 1 \text{ или } P_t = 0, \quad 1/3 \leq Q_t < \infty, \quad |T_t| \leq 3Q_t, \quad t = x, z.\tag{1.10.13}$$

Дополнительные уравнения для величин ψ_R^z и ψ_T^x получены методом неопределенных коэффициентов [4]. Эти уравнения являются единственно возможными линейными соотношениями между потоками в ячейке, которые позволяют обеспечить положительность схемы. Весовые коэффициенты T_x и T_z , как показывает геометрическая интерпретация WLD схемы [35] (см. также ниже), если ограничиться определенным классом аппроксимирующих элементов, не являются независимыми параметрами и однозначно определяются по заданным значениям весов Q_t , $t = x, z$.

Анализ устойчивости WLB-WLD схемы в x, y геометрии в предположении, что $0 \leq P_t \leq 1$, $1/3 \leq Q_t \leq 1$, $|T_t| \leq 3Q_t$, $t = x, y$, [30] показал, что данный выбор системы дополнительных уравнений обеспечивает устойчивость схемы. Для полноты, этот анализ должен быть распространен на расширенный диапазон изменения весов Q_t : $1/3 \leq Q_t < \infty$, $t = x, y$, рассмотренный в [35, 36] и в данной работе. Геометрическая интерпретация WLD схемы в x, y геометрии [35, 36] показывает, что путем соответствующего выбора весовых коэффициентов Q_t , $t = x, z$ и соответствующих им весов T_t , $t = x, z$ можно обеспечить положительности схемы.

Случай $P_t = Q_t = 1$, $T_t = 0$, $t = x, z$ отвечает LB схеме 4-ого порядка точности; случай $P_t = 0$, $Q_t = 1$, $T_t = 0$, $t = x, z$ отвечает LD схеме 3-его порядка точности. LD схема для случая x, y геометрии [38], по-видимому, впервые была предложена W. Walters в 1978 году, о чем

упоминается в работе [37]. Система дополнительных уравнений (1.10.12) имеет простую WDD форму [39], что сильно упрощает ее использование и анализ.

WLB схема ($0 \leq P_t \leq 1$, $Q_t = 1$, $T_t = 0$, $t = x, z$) может быть получена путем аппроксимации решения в ячейке линейным элементом с разрывами на входящих и выходящих гранях ячеек. Для 1-ого октанта ($\mu > 0$, $\xi > 0$) он имеет вид:

$$\psi(x, z) = \psi + \frac{2(x - x_i)}{\Delta x} \psi^x + \frac{2(z - z_k)}{\Delta z} \psi^z, \quad (1.10.14)$$

где

$$\psi_{i-1/2} = \psi_{i-1/2}^+ + \Delta_i^-, \quad \psi_{i+1/2} = \psi_{i+1/2}^- + \Delta_i^+, \quad \psi_{k-1/2} = \psi_{k-1/2}^+ + \Delta_k^-, \quad \psi_{k+1/2} = \psi_{k+1/2}^- + \Delta_k^+,$$

$$\Delta_i^+ = \frac{2P_x}{(1+P_x)} \Delta_x, \quad \Delta_i^- = \frac{2}{(1+P_x)} \Delta_x, \quad \Delta_x = \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2} + \psi_{i-1/2}) - \psi,$$

$$\Delta_k^+ = \frac{2P_z}{(1+P_z)} \Delta_z, \quad \Delta_k^- = \frac{2}{(1+P_z)} \Delta_z, \quad \Delta_z = \frac{1}{2}(\psi_{k+1/2} + \psi_{k-1/2}) - \psi,$$

$$\psi = \frac{1}{2}(\psi_{i-1/2}^+ + \psi_{i+1/2}^-) = \frac{1}{2}(\psi_{k-1/2}^+ + \psi_{k+1/2}^-), \quad \psi^x = \frac{1}{2}(\psi_{i+1/2}^- - \psi_{i-1/2}^+), \quad \psi^z = \frac{1}{2}(\psi_{k+1/2}^- - \psi_{k-1/2}^+). \quad (1.10.15)$$

В WLB схеме моменты потока на выходящих гранях ячейки $x = x_{i+1/2}$ и $z = z_{k+1/2}$ непрерывны:

$$\psi_{k+1/2}^x = \psi^x, \quad \psi_{i+1/2}^z = \psi^z.$$

LD схеме соответствует частное значение линейного элемента (1.10.14), для которого как нулевые, так и первые пространственные моменты на выходящих гранях ячейки $x = x_{i+1/2}$ и $z = z_{k+1/2}$ непрерывны ($\psi_{i+1/2} = \psi_{i+1/2}^-$, $\psi_{k+1/2} = \psi_{k+1/2}^-$, $\psi_{k+1/2}^x = \psi^x$, $\psi_{i+1/2}^z = \psi^z$).

WLD схема ($P_t = 0$, $1/3 \leq Q_t < 1$ или $Q_t > 1$, $|T_t| \leq 3Q_t$, $t = x, z$) соответствует внесению излома в линейный элемент (1.10.14), вдоль линии, пересекающей этот элемент. Здесь следует рассмотреть 12 случаев [35, 36], которые изображены на Рис. 1.10.2а-1.10.2г в предположении, что $\mu, \xi \geq 0$. Рассмотрим эти случаи последовательно.

а) Пусть поток в пределах ячейки убывает по переменным x и z . Предположим также, что точки A и C линии излома AC (см. Рис. 1.10.2а) помещены, соответственно, на верхней ($z = z_{k+1/2}$) и правой ($x = x_{i+1/2}$) границах аппроксимирующего элемента, а линия излома AC параллельна плоскости Oxy (в этом случае $\delta_z \tilde{\psi}^z = \delta_x \tilde{\psi}^x$). Далее мы предположим, что $\psi(x, z) = Const$ в области заштрихованного треугольника ABC , а поток является непрерывным на выходящих гранях ячейки $x = x_{i+1/2}$ и $z = z_{k+1/2}$. В этом случае весовые коэффициенты WLD схемы имеют вид:

$$Q_x = \frac{1 - \delta_x \delta_z (1 - \delta_x / 3)}{1 - \delta_x^2 \delta_z (1 - 0.5 \delta_x)}, \quad T_x = -\frac{\delta_x \delta_z [3 - 2\delta_z - \delta_x (1 - 0.5 \delta_z)]}{1 - \delta_x^2 \delta_z (1 - 0.5 \delta_x)} \quad (1.10.16)$$

Формулы для T_z и Q_z получаются из формул (1.10.16) для T_x и Q_x путем замены: $\delta_x \rightarrow \delta_z$ и $\delta_z \rightarrow \delta_x$.

б) Точки A и C линии излома AC размещены на верхней $z = z_{k+1/2}$ и нижней $z = z_{k-1/2}$ границах аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2b) и решение является убывающим по x . В этом случае $\tilde{\psi}^z = \lambda \tilde{\psi}^x$ и весовые коэффициенты WLD схемы имеют вид:

$$Q_x = \left[1 - \delta_x^- - \delta_x^+ + \frac{1}{3} \left((\delta_x^-)^2 + (\delta_x^+)^2 + \delta_x^- \delta_x^+ \right) \right] / d, \quad T_x = (\delta_x^- - \delta_x^+) (1 - 0.5 (\delta_x^- + \delta_x^+)) / d,$$

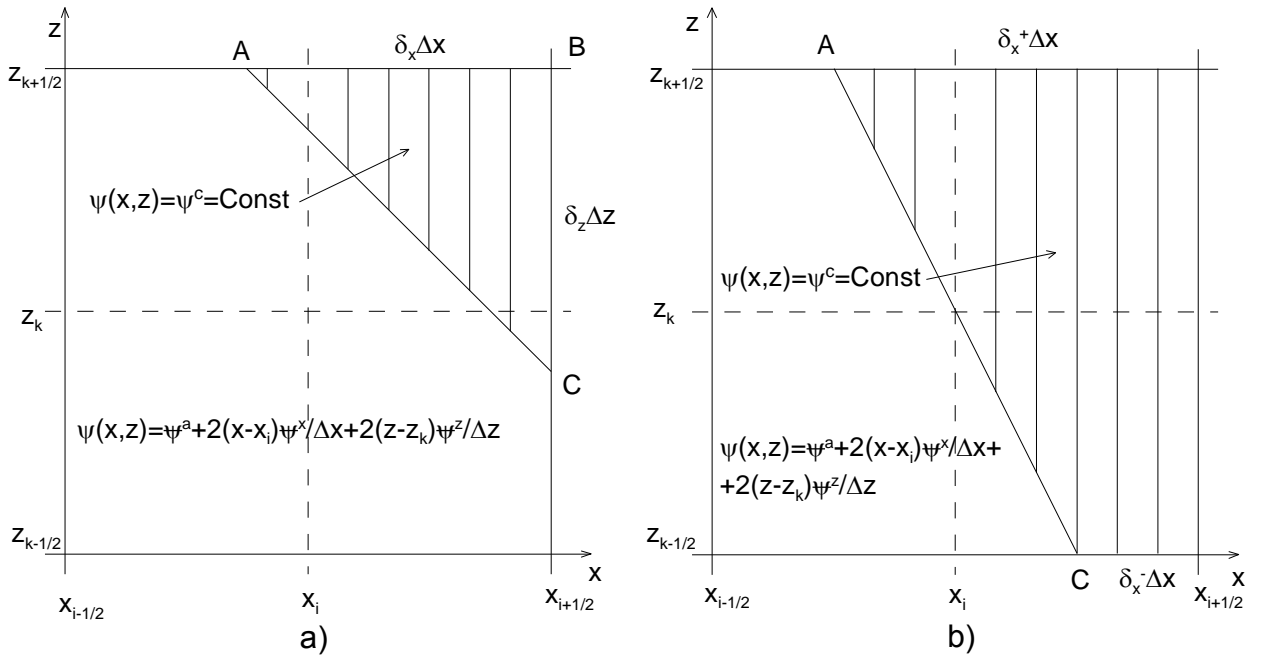
$$d = 1 - \left((\delta_x^-)^2 + (\delta_x^+)^2 + \delta_x^- \delta_x^+ \right) + 0.5 \left((\delta_x^-)^3 + (\delta_x^+)^3 + (\delta_x^-)^2 \delta_x^+ + \delta_x^- (\delta_x^+)^2 \right),$$

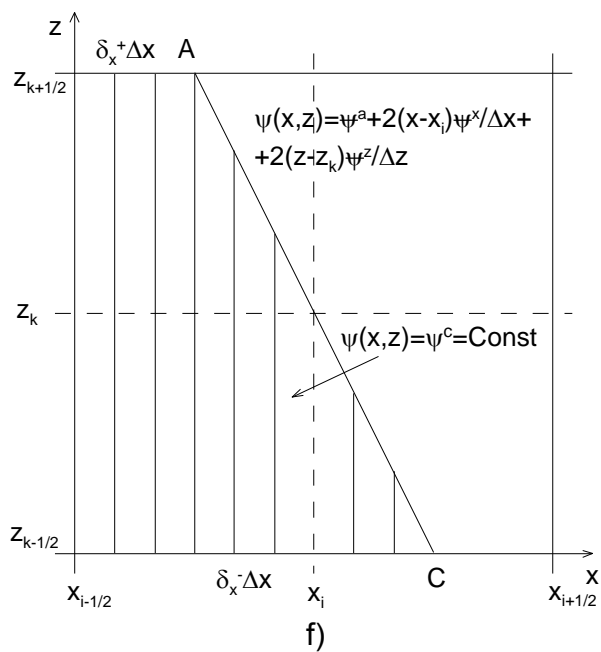
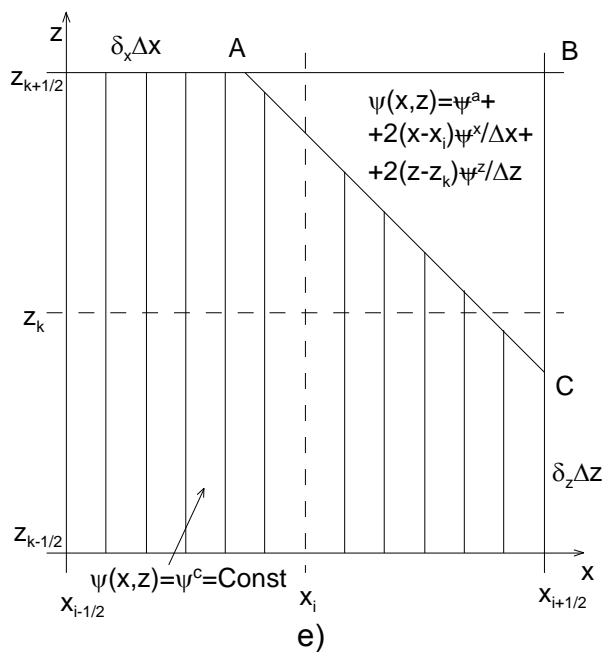
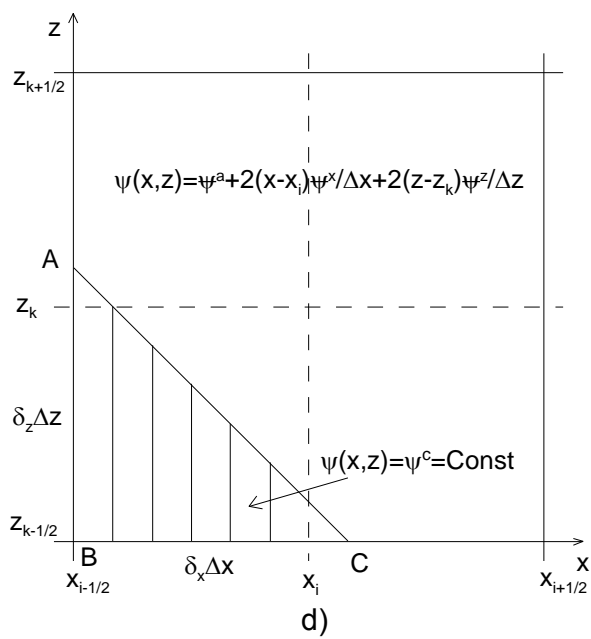
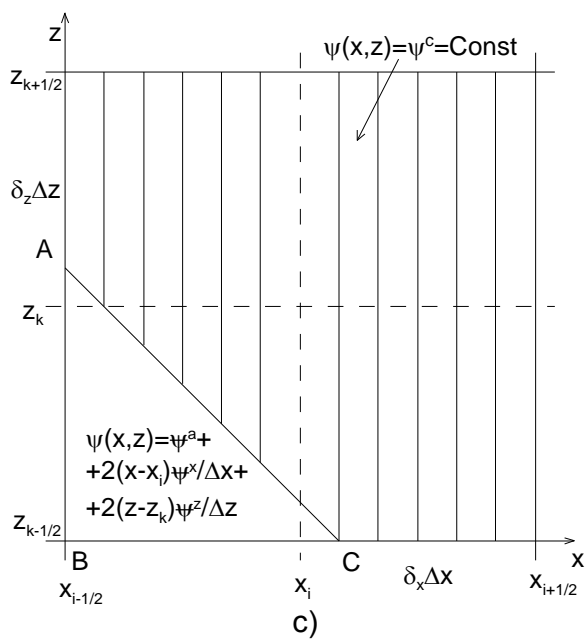
$$Q_z = \frac{1 - \delta_x^- / 3 - 2\delta_x^+ / 3}{1 - 0.5 (\delta_x^- + \delta_x^+)}, \quad T_z = \frac{-2\delta_x^+ - \delta_x^- + 0.5 (3(\delta_x^+)^2 + (\delta_x^-)^2 + 2\delta_x^- \delta_x^+)}{1 - 0.5 (\delta_x^- + \delta_x^+)}. \quad (1.10.17)$$

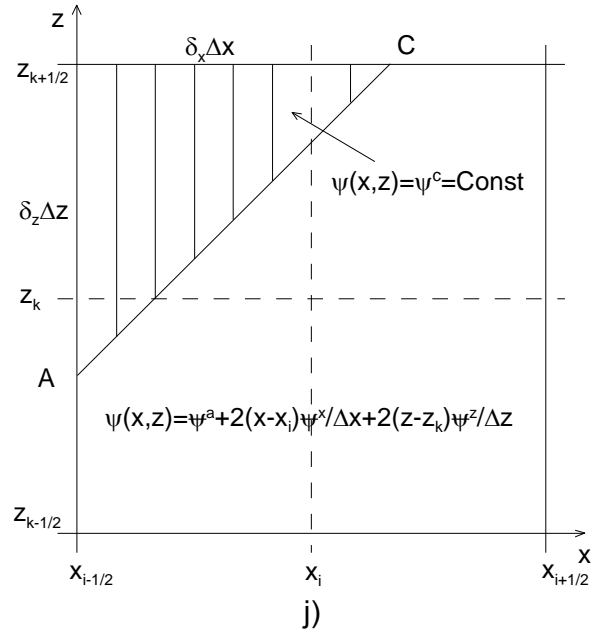
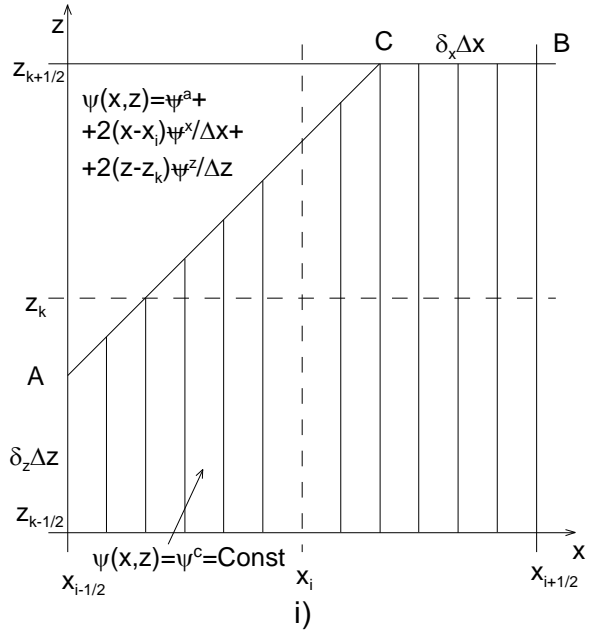
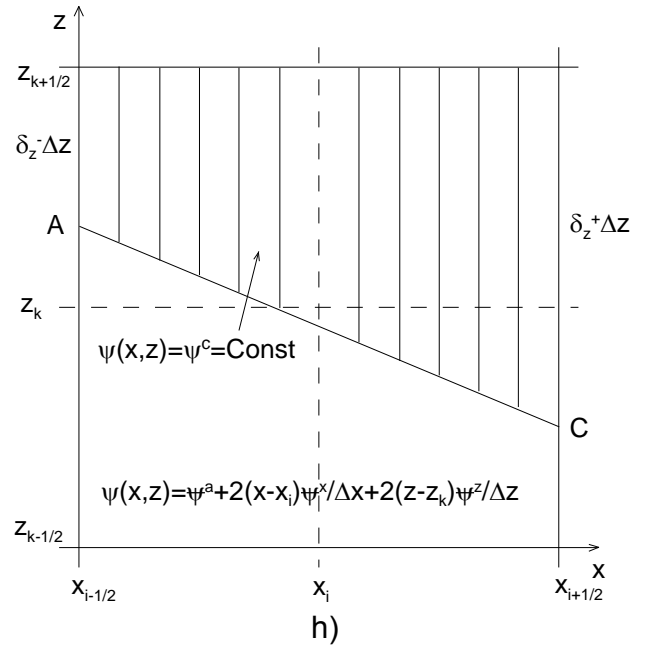
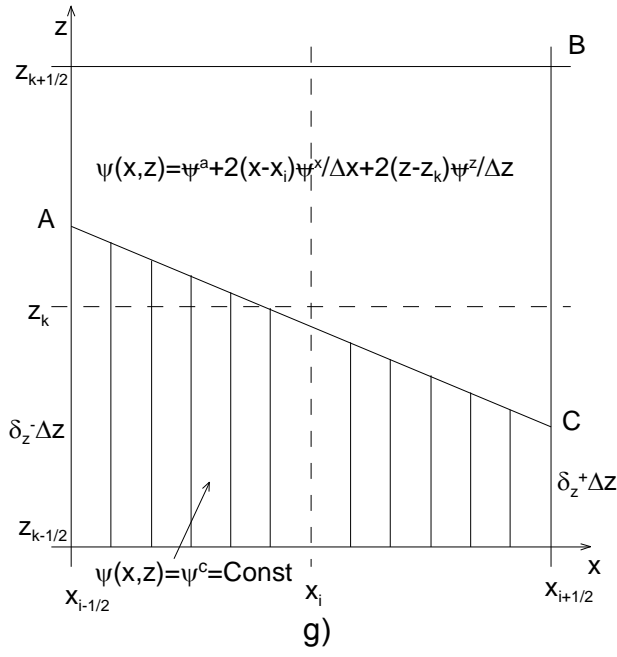
Отметим важный частный случай, когда $\delta_x^- = \delta_x^+ = \delta_x$ (линия разрыва расположена параллельно оси z). В этом случае формулы (1.10.17) упрощаются:

$$Q_x = \frac{1}{1 + 2\delta_x}, \quad T_x = 0, \quad Q_z = 1, \quad T_z = -3\delta_x, \quad \delta_x = \frac{1 - Q_x}{2Q_x}. \quad (1.10.18)$$

При этом значение Q_x совпадает с выражением, определяемом формулой (1.2.57) для случая плоской геометрии.







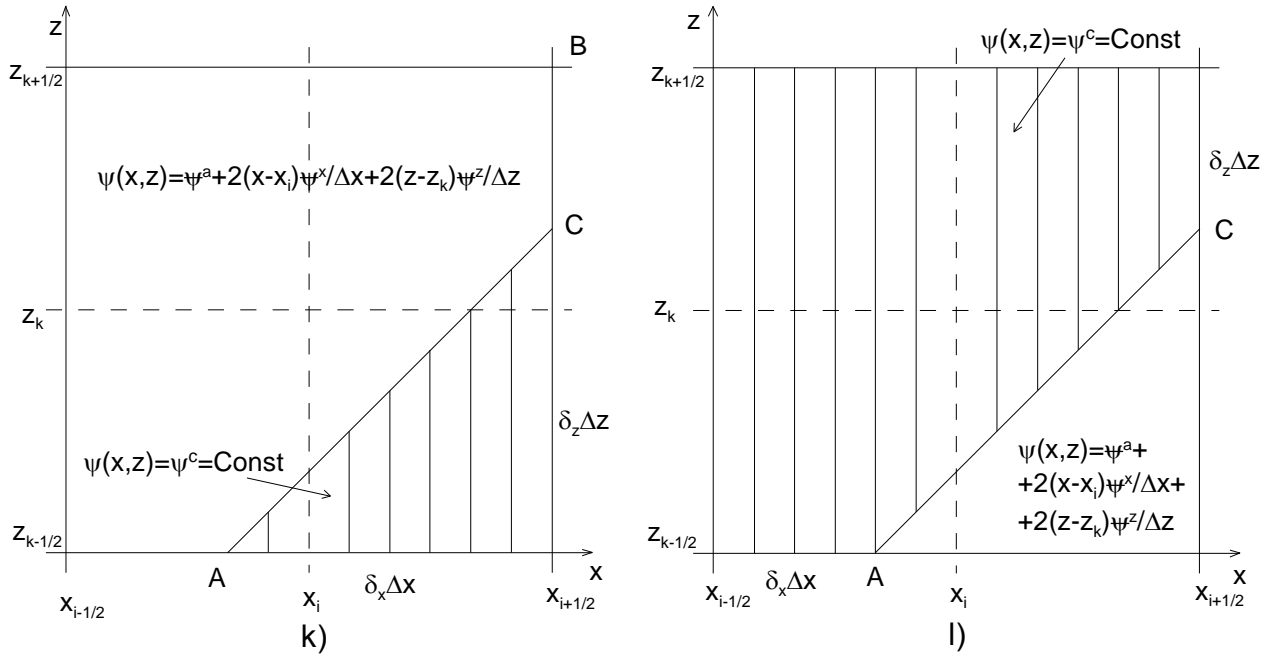


Рисунок 1.10.2. Геометрическая интерпретация WLD схемы в x, z геометрии

с) Точки A и C помещены на левую $x = x_{i-1/2}$ и нижнюю $z = z_{k-1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2с) (в этом случае $\tilde{\psi}^z = \tilde{\psi}^x (1 - \delta_x) / (1 - \delta_z)$), весовые коэффициенты WLD схемы имеют вид:

$$Q_x = \frac{2}{3(1 + \delta_x)}, \quad Q_z = \frac{2}{3(1 + \delta_z)}, \quad T_x = -\frac{1 + \delta_z}{1 + \delta_x}, \quad T_z = -\frac{1 + \delta_x}{1 + \delta_z}, \quad (1.10.19)$$

где коэффициенты δ_x и δ_z могут быть определены по явным формулам:

$$\delta_x = 2/(3Q_x) - 1, \quad \delta_z = 2/(3Q_z) - 1.$$

d) Пусть поток в ячейке возрастает по обеим переменным x и z , а точки A и C помещены, соответственно, на левую $x = x_{i-1/2}$ и нижнюю $z = z_{k-1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2d). Мы также предположим, что $\psi(x, z) = Const$ в области заштрихованного треугольника ABC , а поток является непрерывным на выходящих гранях ячейки $x = x_{i+1/2}$ и $z = z_{k+1/2}$. В этом случае весовые коэффициенты WLD схемы имеют вид:

$$Q_x = \frac{1 - (\delta_x)^2 \delta_z / 3}{1 - (\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)}, \quad T_x = \frac{(\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_z)}{1 - (\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)}. \quad (1.10.20)$$

Формулы для Q_z и T_z могут быть получены из Q_x и T_x в уравнении (1.10.20) после замены: $\delta_x \rightarrow \delta_z$ и $\delta_z \rightarrow \delta_x$.

е) Поток в ячейке возрастает по обеим переменным x и z , а точки A и C помещены, соответственно, на верхнюю $z = z_{k+1/2}$ и правую $x = x_{i+1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2е). Мы также предположим, что $\psi(x, z) = Const$ в заштрихованной области и является линейной функцией в треугольнике ABC . Предполагается также, что поток является непрерывным на выходящих гранях ячейки $x = x_{i+1/2}$ и $z = z_{k+1/2}$. В этом случае весовые коэффициенты WLD схемы имеют вид:

$$Q_x = \frac{2(2 + \delta_x)}{3(1 - \delta_x^2)}, \quad T_x = \frac{2(1 + 2\delta_z) - (1 - \delta_x)(1 + \delta_z)}{(1 - \delta_x^2)}, \quad (1.10.21)$$

где коэффициент δ_x может быть определен по явной формуле:

$$\delta_x = \frac{-1 + \sqrt{1 - 3Q_x(4 - 3Q_x)}}{3Q_x}.$$

Формулы для Q_z и T_z могут быть получены из Q_x и T_x в уравнении (1.10.21) после замены: $\delta_x \rightarrow \delta_z$ и $\delta_z \rightarrow \delta_x$.

ф) Отличается от случая е) тем, что точка C помещена на нижнюю границу аппроксимирующего элемента $z = z_{k-1/2}$ (см. Рис. 1.10.2ф). Весовые коэффициенты WLD схемы в этом случае имеют вид:

$$Q_x = \left[1 - \frac{1}{3} \left((\delta_x^-)^2 + (\delta_x^+)^2 + \delta_x^- \delta_x^+ \right) \right] / d, \quad T_x = (\delta_x^- - \delta_x^+) (\delta_x^- + \delta_x^+) / 2d,$$

$$d = 1 - \left((\delta_x^-)^2 + (\delta_x^+)^2 + \delta_x^- \delta_x^+ \right) + 0.5 \left((\delta_x^-)^3 + (\delta_x^+)^3 + (\delta_x^-)^2 \delta_x^+ + \delta_x^- (\delta_x^+)^2 \right),$$

$$Q_z = \frac{1 - \delta_x^- / 3 - 2\delta_x^+ / 3}{1 - 0.5(\delta_x^- + \delta_x^+)}, \quad T_z = \frac{(\delta_x^- + \delta_x^+) (1 - 0.5(\delta_x^- + \delta_x^+)) + \delta_x^+ (1 - \delta_x^+)}{1 - 0.5(\delta_x^- + \delta_x^+)}. \quad (1.10.22)$$

Отметим важный частный случай, когда $\delta_x^- = \delta_x^+ = \delta_x$ (линия разрыва расположена параллельно оси z). В этом случае формулы (1.10.22) упрощаются:

$$Q_x = \frac{1 + \delta_x}{(1 - \delta_x)(1 + 2\delta_x)}, \quad T_x = 0, \quad Q_z = 1, \quad T_z = 3\delta_x, \quad \delta_x = \frac{(Q_x - 1) + \sqrt{(Q_x - 1)(9Q_x - 1)}}{4Q_x}. \quad (1.10.23)$$

При этом значение Q_x совпадает с выражением, определяемом формулой (1.2.58) для случая плоской геометрии.

г) Рассмотрим случай, когда точки A и C помещены, соответственно, на левую $x = x_{i-1/2}$ и правую $x = x_{i+1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2г) и реализуется случай возрастающего по переменной y решения. Весовые коэффициенты WLD схемы для этого

случая могут быть найдены по формулам, которые получаются из (1.10.22) для случая, изображенного на Рис. 1.10.2f, после замены: $x \rightarrow z$, $z \rightarrow x$.

h) Аналогично рассматривается случай убывающего по переменной y решения (см. Рис. 1.10.2h). Весовые коэффициенты WLD схемы для этого случая могут быть найдены по формулам, которые получаются из (1.10.17) для случая, изображенного на Рис. 1.10.2b, после замены: $x \rightarrow z$, $z \rightarrow x$.

i) Пусть точки A и C помещены, соответственно, на левую $x = x_{i-1/2}$ и верхнюю $z = z_{k+1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2i) и реализуется случай возрастающего по переменной z и убывающего по x решения. Весовые коэффициенты WLD схемы для этого случая имеют вид:

$$Q_x = \frac{2}{3(1+\delta_x)}, \quad Q_z = \frac{2(2+\delta_z)}{3(1-\delta_z^2)}, \quad T_x = \frac{1+\delta_z}{1+\delta_x}, \quad T_z = -\frac{2(1+2\delta_x) - (1-\delta_z)(1+\delta_x)}{(1-\delta_z^2)}, \quad (1.10.24)$$

где коэффициенты δ_x и δ_z могут быть определены по явным формулам:

$$\delta_x = 2/(3Q_x) - 1, \quad \delta_z = \frac{-1 + \sqrt{1 - 3Q_z(4 - 3Q_z)}}{3Q_z}.$$

j). Рассмотрим далее противоположный случай убывающего по переменной z и возрастающего по переменной x решения (см. Рис. 1.10.2j). Весовые коэффициенты WLD схемы для этого случая имеют вид:

$$Q_x = \frac{1 - (\delta_x)^2 \delta_z / 3}{1 - (\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)}, \quad T_x = -\frac{(\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_z)}{1 - (\delta_x)^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)},$$

$$Q_z = \frac{1 - \delta_x \delta_z (1 - \delta_z / 3)}{1 - \delta_x \delta_z^2 (1 - 0.5\delta_z)}, \quad T_z = \frac{\delta_x \delta_z [3 - 2\delta_x - \delta_z (1 - 0.5\delta_x)]}{1 - \delta_x \delta_z^2 (1 - 0.5\delta_z)}. \quad (1.10.25)$$

k) Пусть точки A и C помещены, соответственно, на нижнюю $z = z_{k-1/2}$ и правую $x = x_{i+1/2}$ границы аппроксимирующего элемента (см. Рис. 1.10.2k) и реализуется случай возрастающего по переменной z и убывающего по x решения. Весовые коэффициенты WLD схемы для этого случая имеют вид:

$$Q_x = \frac{1 - \delta_x \delta_z (1 - \delta_x / 3)}{1 - \delta_x^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)}, \quad T_x = \frac{\delta_x \delta_z [3 - 2\delta_z - \delta_x (1 - 0.5\delta_z)]}{1 - \delta_x^2 \delta_z (1 - 0.5\delta_x)},$$

$$Q_z = \frac{1 - \delta_x (\delta_z)^2 / 3}{1 - \delta_x (\delta_z)^2 (1 - 0.5\delta_z)}, \quad T_z = -\frac{\delta_x (\delta_z)^2 (1 - 0.5\delta_x)}{1 - \delta_x (\delta_z)^2 (1 - 0.5\delta_z)}. \quad (1.10.26)$$

l) Рассмотрим противоположный случай убывающего по переменной z и возрастающего по переменной x решения (см. Рис. 1.10.2l). Весовые коэффициенты WLD схемы для этого случая имеют вид:

$$Q_x = \frac{2(2 + \delta_x)}{3(1 - \delta_x^2)}, \quad T_x = -\frac{2(1 + 2\delta_z) - (1 - \delta_x)(1 + \delta_z)}{(1 - \delta_x^2)}, \quad Q_z = \frac{2}{3(1 + \delta_z)}, \quad T_z = \frac{1 + \delta_x}{1 + \delta_z}, \quad (1.10.27)$$

где коэффициенты δ_x и δ_z могут быть определены по явным формулам:

$$\delta_x = \frac{-1 + \sqrt{1 - 3Q_x(4 - 3Q_x)}}{3Q_x}, \quad \delta_z = 2/(3Q_z) - 1.$$

На Рис. 1.10.3 представлена схема области изменения параметров Q_t , $t = x, z$, WLD схемы для каждого из вышерассмотренных 12 случаев. На Рис. 1.10.4 представлена пространственная зависимость параметров T_x (а) и T_z (б) для подобласти изменения весов схемы Q_x и Q_z : $1/3 \leq Q_x, Q_z \leq 1$.

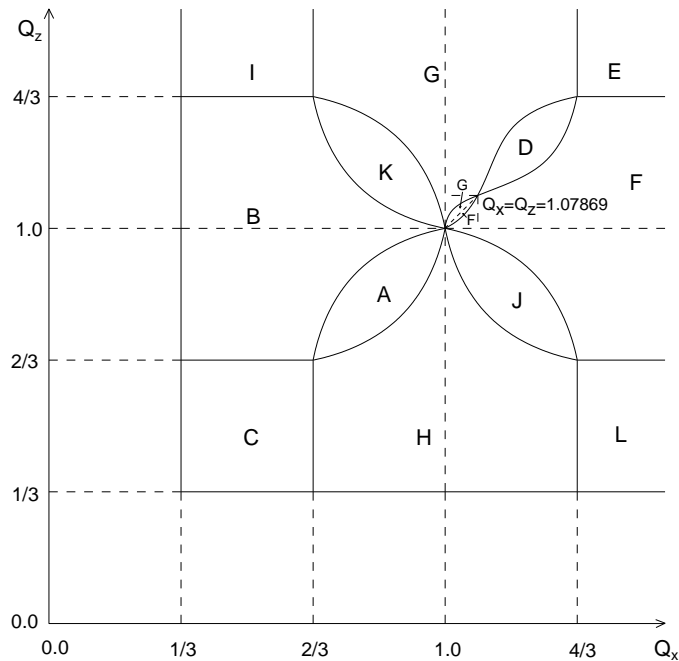


Рисунок 1.10.3. Схема области изменения параметров Q_t , $t = x, z$, WLD схемы в x, z геометрии

Существенным элементом алгоритма коррекции для LD схемы является определение параметров T_x и T_z по вычисленным в результате применения одномеризованного адаптивного алгоритма, аналогичного использованному в случае плоской геометрии, весовым коэффициентам Q_x и Q_z . В областях C, E, I и L параметры T_x и T_z могут быть определены по явным формулам (1.10.19), (1.10.21), (1.10.24) и (1.10.27). Для остальных подобластей они могут быть определены численно из решения кубических систем из двух уравнений относительно переменных δ_x и δ_z (для подобластей A, D, J, K), δ_x^- и δ_x^+ (для подобластей B и F), δ_z^- и δ_z^+ (для подобластей D и H) по заданным весовым коэффициентам Q_x и Q_z с применением, например,

метода Ньютона [55], и последующим использованием явных формул для нахождения параметров T_x и T_z . Достаточно точное начальное значение, например, величин δ_x и δ_z для подобласти А для заданной пары значений Q_x и Q_z из этой подобласти, требуемое для эффективного использования метода Ньютона [55], может быть получено путем определения по явным формулам значений величин Q_x и Q_z на достаточно частой равномерной сетке, например, (100×100) , покрывающей область определения переменных δ_x и δ_z .

Для определения какой конкретно подобласти принадлежит данная пара величин Q_x и Q_z , нам потребуются явные формулы Q_x^{edge} и Q_z^{edge} для границ подобластей А, D, J и К (см. Рис. 1.10.4), которые получаются подстановкой, соответственно, $\delta_z = 1$ и $\delta_x = 1$ в соотношения (1.10.16), (1.10.20), (1.10.25) и (1.10.26). Так, для подобласти А:

$$Q_x^{edge} = \frac{1 - \delta_x(1 - \delta_x/3)}{1 - \delta_x^2(1 - 0.5\delta_x)}, \quad \delta_x = \frac{6(1 - Q_z)}{4 - 3Q_z}, \quad Q_z^{edge} = \frac{1 - \delta_z(1 - \delta_z/3)}{1 - \delta_z^2(1 - 0.5\delta_z)}, \quad \delta_z = \frac{6(1 - Q_x)}{4 - 3Q_x}, \quad (1.10.28)$$

для подобласти D:

$$Q_x^{edge} = \frac{1 - (\delta_x)^2/3}{1 - (\delta_x)^2(1 - 0.5\delta_x)}, \quad \delta_x = \frac{6(Q_z - 1)}{3Q_z - 2}, \quad Q_z^{edge} = \frac{1 - (\delta_z)^2/3}{1 - (\delta_z)^2(1 - 0.5\delta_z)}, \quad \delta_z = \frac{6(Q_x - 1)}{3Q_x - 2}. \quad (1.10.29)$$

Следует отметить, что кривые $Q_x^{edge}(Q_z)$ и $Q_z^{edge}(Q_x)$ пересекаются в точке:

$$(Q_x^*, Q_z^*), \quad Q_x^* = Q_z^* = Q^* = \frac{2(3 + \sqrt{5})}{3(1 + \sqrt{5})} \cong 1.07869. \quad (1.10.30)$$

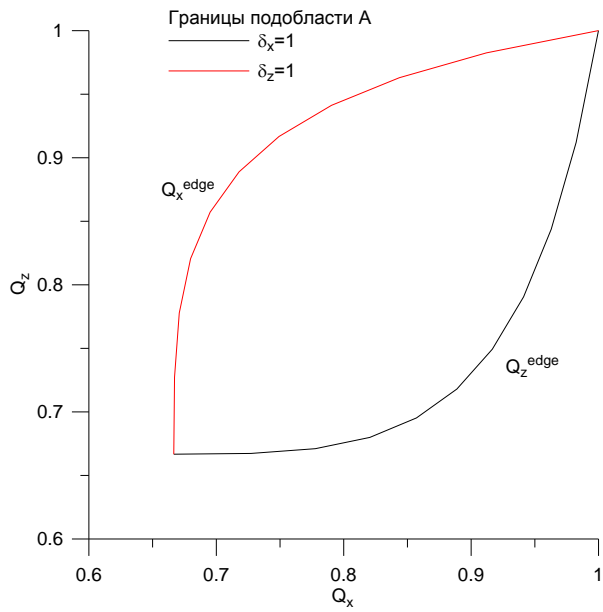
Ниже этой точки подобласть между кривыми $Q_z^{edge}(Q_x)$ и $Q_x^{edge}(Q_z)$ может быть отнесена как к подобласти G, так и к подобласти F. Мы отнесем часть этой подобласти, для которой $Q_z > Q_x$, к подобласти G, а другую часть, для которой $Q_z \leq Q_x$, к подобласти F.

Границы подобласти J имеют вид:

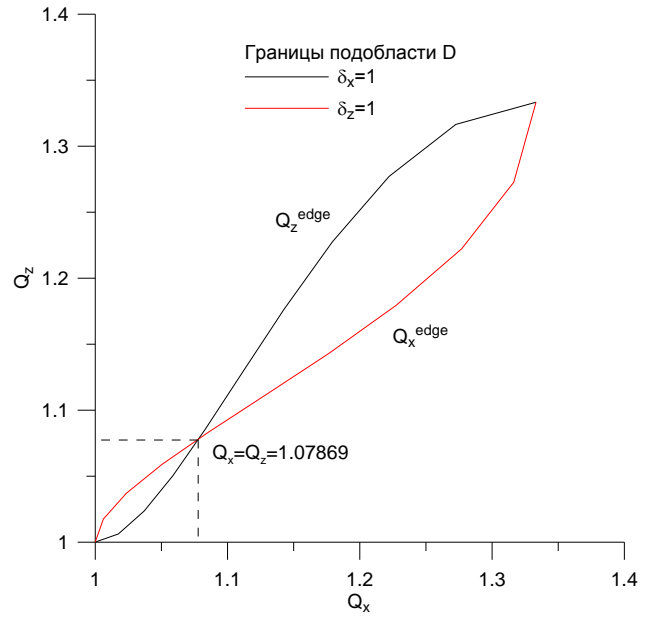
$$Q_x^{edge} = \frac{1 - (\delta_x)^2/3}{1 - (\delta_x)^2(1 - 0.5\delta_x)}, \quad \delta_x = \frac{6(1 - Q_z)}{4 - 3Q_z}, \quad Q_z^{edge} = \frac{1 - \delta_z(1 - \delta_z/3)}{1 - \delta_z^2(1 - 0.5\delta_z)}, \quad \delta_z = \frac{6(Q_x - 1)}{3Q_x - 2}, \quad (1.10.31)$$

а границы подобласти К:

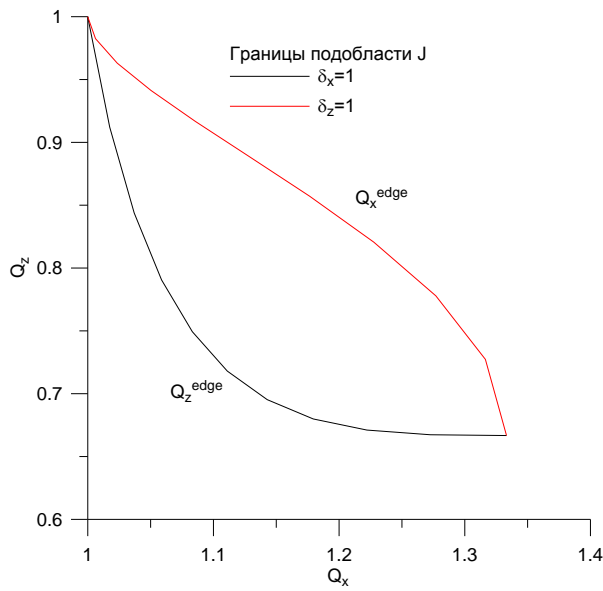
$$Q_x^{edge} = \frac{1 - \delta_x(1 - \delta_x/3)}{1 - \delta_x^2(1 - 0.5\delta_x)}, \quad \delta_x = \frac{6(Q_z - 1)}{3Q_z - 2}, \quad Q_z^{edge} = \frac{1 - (\delta_z)^2/3}{1 - (\delta_z)^2(1 - 0.5\delta_z)}, \quad \delta_z = \frac{6(1 - Q_x)}{4 - 3Q_x}. \quad (1.10.32)$$



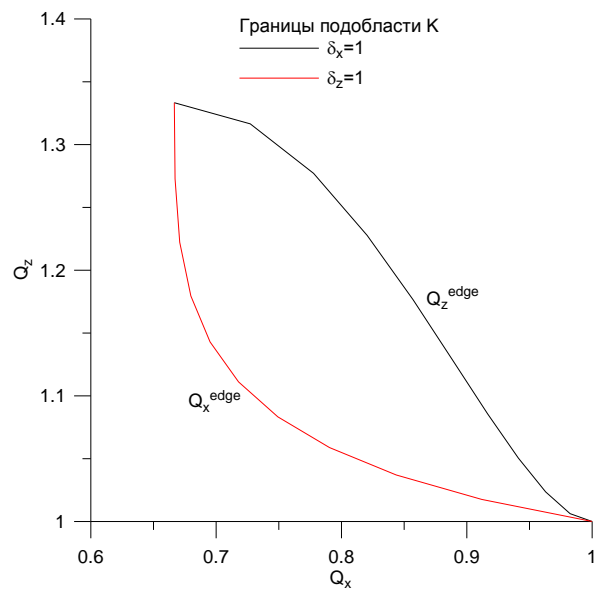
а)



б)



в)



г)

Рисунок 1.10.4. Границы подобластей А, D, J и К

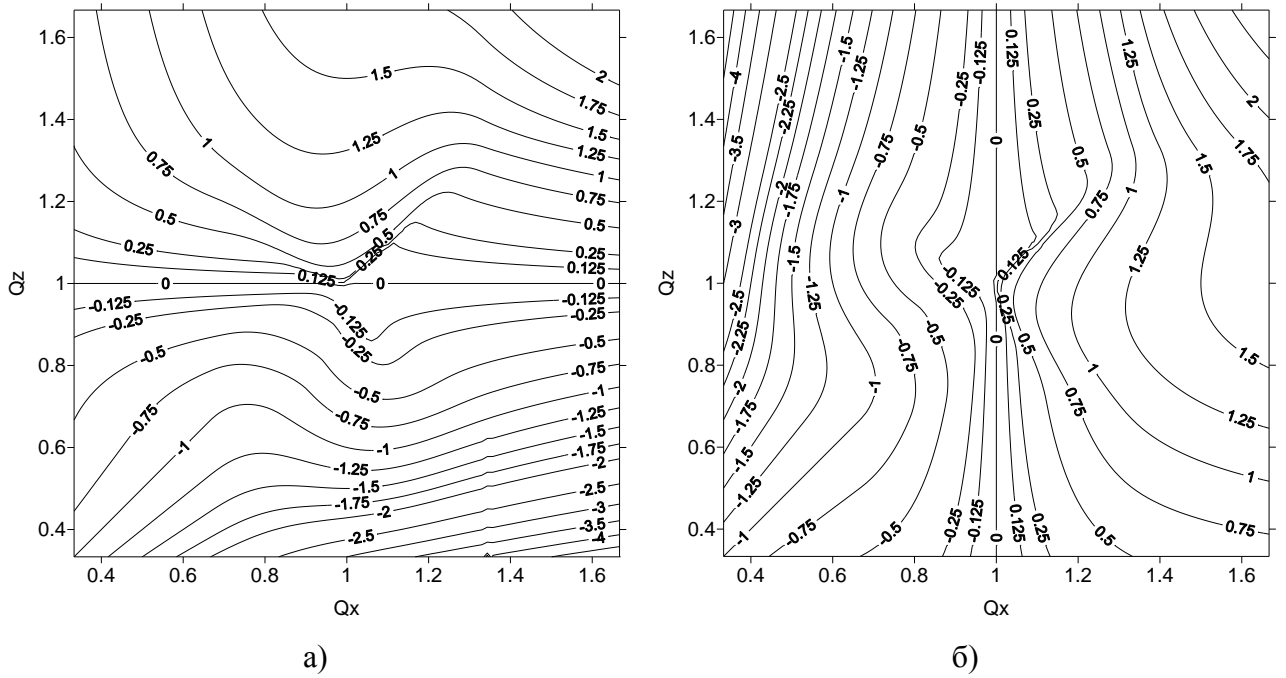


Рисунок 1.10.5. Пространственная зависимость параметров T_x (а) и T_z (б) WLD схемы в x, z геометрии для области изменения весов схемы Q_x и Q_z : $1/3 \leq Q_x, Q_z \leq 5/3$

Используя вышеописанные линейные и составные (линейно-постоянные с изломом) аппроксимирующие элементы и соответствующие им дополнительные уравнения WLB-WLD схемы можно обеспечить положительность схемы, т. е. при наличии неотрицательных входящих граничных потоков и источника в ячейке:

$$\psi_L, \psi_B \geq 0, \quad |\psi_L^z| \leq 3\psi_L, \quad |\psi_B^x| \leq 3\psi_B, \quad S \geq 0, \quad |S^x| \leq 3S, \quad |S^z| \leq 3S, \quad (1.10.33)$$

обеспечить получение неотрицательных потока в ячейке и выходящих потоков:

$$\psi_R, \psi_T \geq 0, \quad |\psi_R^z| \leq 3\psi_R, \quad |\psi_T^x| \leq 3\psi_T, \quad \psi \geq 0, \quad |\psi^x| \leq 3\psi, \quad |\psi^z| \leq 3\psi. \quad (1.10.34)$$

Подстановка дополнительных уравнений (1.10.12) в балансные соотношения (1.10.4)-(1.10.6) приводит к следующей системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ , ψ^x и ψ^z :

$$\begin{aligned} a_{11}\psi + a_{12}\psi^x + a_{13}\psi^z &= b_1 \\ a_{21}\psi + a_{22}\psi^x + a_{23}\psi^z &= b_2, \\ a_{31}\psi + a_{32}\psi^x + a_{33}\psi^z &= b_3 \end{aligned} \quad (1.10.35)$$

где элементы матриц A и B имеют вид:

$$a_{11} = \sigma V + |\mu|v_x(1-P_z) + |\xi|v_z(1-P_x), \quad a_{12} = v_z\xi(Q_x + P_x), \quad a_{13} = v_x\mu(Q_z + P_z), \quad a_{21} = -\frac{1}{2}V\xi(1+P_x),$$

$$\begin{aligned}
a_{22} &= |\mu|v_x^1 + \frac{1}{2}|\xi|V(Q_x + P_x) + \sigma V^x, & a_{23} &= \mu v_x^1 s_x T_z, & a_{31} &= -\frac{1}{2}\mu V(1 + P_z), & a_{32} &= \xi v_z^1 s_z T_x, \\
a_{33} &= \frac{1}{2}|\mu|V(Q_z + P_z) + |\xi|v_z^1 + \sigma V^z, & b_1 &= VS + |\mu|v_x(1 - P_z)\psi_B + |\xi|v_z(1 - P_x)\psi_L, \\
b_2 &= V^x S^x + |\mu|v_x^1 \psi_B^x - \frac{1}{2}\xi V(1 + P_x)\psi_L, & b_3 &= V^z S^z - \frac{1}{2}\mu V(1 + P_z)\psi_B + |\xi|v_z^1 \psi_L^z.
\end{aligned} \quad (1.10.36)$$

Решение системы (1.10.35) находится по формулам Крамера.

Все приведенные выше соотношения для случая x, z геометрии, за исключением представления интеграла рассеяния в виде разложения по сферическим гармоникам (1.10.2) и выбора квадратурной формулы (1.10.3), справедливы и для случая x, y геометрии после замены $z \rightarrow y$ и $\mu \rightarrow \eta$.

Рассмотрим далее построение и некоторые свойства семейств WDD и WLB/QC-WLD схем в 2D r, z геометрии. В этой геометрии отсутствует зависимость решения от азимутальной переменной φ и уравнение переноса (1.1.6) приобретает вид:

$$\mu r \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi}(\eta\psi) + \sigma r\psi(r, z, \mu, \varphi) = rS(r, z, \mu, \varphi), \quad (1.10.37)$$

где ξ , η и μ - направляющие косинусы единичного вектора $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы (1.1.7), который с учетом имеющейся в данной геометрии симметрии:

$\psi(r, z, \mu, \varphi) = \psi(r, z, \mu, 2\pi - \varphi)$ изменяется в пределах четырех октантов: $-1 \leq \xi, \mu \leq 1$, $0 \leq \eta \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq \pi$; пространственные переменные изменяются в пределах: $0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{out}}$, $z_{\text{bot}} \leq z \leq z_{\text{top}}$; правая часть $S(r, z, \mu, \varphi)$ имеет вид, аналогичный случаю x, z геометрии (1.10.2) с заменой $x \rightarrow r$.

Для граничного направления $\varphi = \pi$, используемого для организации расчета граничных ячеек в r, z геометрии, дивергентная форма уравнения (1.10.37) имеет вид:

$$\mu r \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \left[\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \psi \right] + \sigma r\psi(r, z, \mu, \varphi) = rS(r, z, \mu, \varphi). \quad (1.10.38)$$

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (1.10.37) по разностной ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (z_{k-1/2}, z_{k+1/2}) \times (\varphi_{l,m-1/2}, \varphi_{l,m+1/2}) \times (\mu_{l-1/2}, \mu_{l+1/2})$, $i = 1, \dots, I$, $k = 1, \dots, K$:

$$|\mu|v_r(\psi_T - \psi_B) + \Delta z \left[|\xi|(A^+\psi_R - A^-\psi_L) + \frac{C}{w}(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}) \right] + \sigma V\psi = VS, \quad (1.10.39)$$

где

$$\alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} = -w_{l,m}\xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_{l+1/2}} = 0, \quad m = 1, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L,$$

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad v_{r,i} = \frac{1}{2}(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}, \quad \Delta z_k = v_{z,k} = z_{k+1/2} - z_{k-1/2}, \quad V_{i,k} = \Delta z_k v_{r,i},$$

$$\Psi_{R(L)} \equiv \Psi_r^\pm = \begin{cases} \Psi_{i\pm 1/2,k,l,m}, \xi_{l,m} > 0 \\ \Psi_{i\mp 1/2,k,l,m}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}, \quad \Psi_{T(B)} \equiv \Psi_z^\pm = \begin{cases} \Psi_{i,k\pm 1/2,l,m}, \mu_l > 0 \\ \Psi_{i,k\mp 1/2,l,m}, \mu_l < 0 \end{cases}, \quad A^\pm = \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, \xi_{l,m} > 0 \\ A_{i\mp 1/2}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}. \quad (1.10.40)$$

Здесь $\Psi_{R(L)}$ и $\Psi_{T(B)}$ - нулевые пространственные моменты потока на пространственных границах ячейки. Для получения взвешенной алмазной (WDD) схемы к уравнению баланса (1.10.39) следует добавить три дополнительных уравнения:

$$\Psi_R = (1 + P_r)\Psi - P_r\Psi_L, \quad \Psi_T = (1 + P_z)\Psi - P_z\Psi_B, \quad \Psi_{m+1/2} = (1 + P_\xi)\Psi - P_\xi\Psi_{m-1/2},$$

$$0 \leq P_r, P_z, P_\xi \leq 1. \quad (1.10.41)$$

Исключая посредством уравнений (1.10.41) выходящие потоки на границах разностной ячейки в уравнении баланса (1.10.39), получим следующее значение для среднего значения потока в ячейке:

$$\Psi = \frac{v_r |\mu| (1 + P_z)\Psi_B + \Delta z \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) \Psi_L + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \Psi_{m-1/2} \right] + VS}{v_r |\mu| (1 + P_z) + \Delta z \left[|\xi| A^+ (1 + P_r) + \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi) \right] + \sigma V}. \quad (1.10.42)$$

Для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\xi_{l,1/2} = -\sqrt{1 - \mu_l^2}$), используемых в криволинейной геометрии для нахождения граничных значений потока $\Psi_{i,k,l,1/2}$ по угловой переменной ξ , уравнение баланса, которое получается путем интегрирования уравнения (1.10.38) по граничной ячейке, имеет вид:

$$|\mu| v_r (\Psi_T - \Psi_B) + \Delta z |\xi| [(A^+ \Psi_R - A^- \Psi_L) + (A^- - A^+) \Psi_{i,k,l,1/2}] + \sigma V \Psi_{i,k,l}^{(0)} = VS_{i,k,l}^{(0)}. \quad (1.10.43)$$

Для расчета граничных ячеек уравнение (1.10.43) дополняется предположением, что:

$$\Psi_{i,k,l,1/2} \approx \Psi_{i,k,l}^{(0)} \quad (1.10.44)$$

и двумя дополнительными WDD уравнениями по пространственным переменным:

$$\Psi_R = (1 + P_r)\Psi - P_r\Psi_L, \quad \Psi_T = (1 + P_z)\Psi - P_z\Psi_B, \quad 0 \leq P_r, P_z \leq 1. \quad (1.10.45)$$

Среднее значение потока для граничных ячеек имеет вид:

$$\Psi = \frac{v_r |\mu| (1 + P_z)\Psi_B + \Delta z |\xi| (A^- + P_r A^+) \Psi_L + VS}{v_r |\mu| (1 + P_z) + \Delta z |\xi| (A^- + P_r A^+) + \sigma V}. \quad (1.10.46)$$

Для расчета весовых коэффициентов P_r , P_z и P_ξ в дополнительных WDD уравнениях (1.10.41), (1.10.45) в программе КАСКАД-С используется AWDD схема, которая определяет эти веса в результате оценки градиентов решения по каждой из переменных.

Для построения нодальной WLB/QC-WLD схемы 2-4-ого порядка точности [4, 31, 35] кроме уравнения баланса нулевого порядка (1.10.39) нам потребуются также уравнения баланса первого порядка по ячейке, получаемые интегрированием уравнения (1.10.37) по разностной ячейке с весами $2(r - r_i - \delta_i^c) / \Delta r$ и $2(z - z_k) / \Delta z$, где δ_i^c - малое отклонение от центра ячейки, выбираемое из условия $\int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (r - r_i - \delta_i^c) r dr = 0$ [27, 4, 34]:

$$\begin{aligned} & |\mu| v_r^1 (\psi_T^r - \psi_B^r) + v_z \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) \psi_R + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \psi_L - v_r \psi \right] + \frac{C^r}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}^r - \right. \\ & \left. - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}^r) - \delta^c \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) \right\} + \sigma V^r \psi^r = V^r S^r, \end{aligned} \quad (1.10.47)$$

$$\begin{aligned} & \mu V \left[\frac{1}{2} (\psi_T + \psi_B) - \psi \right] + v_z^1 \left[|\xi| (A^+ \psi_R^z - A^- \psi_L^z) + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}^z - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}^z) \right] + \sigma V^z \psi^z = V^z S^z, \end{aligned} \quad (1.10.48)$$

где ψ - среднее значение (нулевой пространственный момент) потока в ячейке, ψ^r и ψ^z - первые пространственные моменты потока по переменным r и z :

$$\psi_{i,k,l,m}^r = \frac{1}{V_r^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r, z) (r - r_i - \delta_i^c) r dr dz, \quad \psi_{i,k,l,m}^z = \frac{1}{V_z^z} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r, z) (z - z_k) r dr dz, \quad (1.10.49)$$

(аналогично определяются и пространственные моменты источника S , S^r и S^z), $\psi_{R(L)}$ и $\psi_{T(B)}$ - нулевые, а, $\psi_{R(L)}^z$ и $\psi_{T(B)}^r$ - первые пространственные моменты потока на пространственных гранях ячейки:

$$\psi_{R(L)}^z = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, k, l, m}^z, \xi_{l, m} > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, k, l, m}^z, \xi_{l, m} < 0 \end{cases}, \quad \psi_{T(B)}^r = \begin{cases} \psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r, \mu_l > 0 \\ \psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r, \mu_l < 0 \end{cases},$$

где

$$\psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r = \frac{1}{V_r^1} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_{l, m}(r, z_{k\pm 1/2}) (r - r_i - \delta_i^c) r dr, \quad \psi_{i\pm 1/2, k, l, m}^z = \frac{1}{V_z^1} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi_{l, m}(r_{i\pm 1/2}, z) (z - z_k) dz,$$

$\psi_{m\pm 1/2}$, $\psi_{m\pm 1/2}^r$ и $\psi_{m\pm 1/2}^z$ - нулевой и первые пространственные моменты решения на входящей ($m - 1/2$) и выходящей ($m + 1/2$) угловой грани ячейки:

$$\psi_{i, k, l, m\pm 1/2}^r = \frac{1}{C^r V_z} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi_{l, m\pm 1/2}(r, z) (r - r_i) r dr dz, \quad \psi_{i, k, l, m\pm 1/2}^z = \frac{1}{C^z V_r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \psi_{l, m\pm 1/2}(r, z) (z - z_k) r dr dz, \quad (1.10.50)$$

$$V = v_r v_z, \quad V_{i, k}^r = \frac{2}{\Delta r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (r - r_i - \delta_i^c)^2 r dr dz = v_r^1 v_z, \quad V_{i, k}^z = \frac{2}{\Delta z} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} (z - z_k)^2 r dr dz = v_r v_z^1,$$

$$v_r = \frac{1}{2}(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad v_z = \Delta z, \quad v_r^1 = \frac{(\Delta r_i)^2}{6}(r_i - \delta_i^c), \quad v_z^1 = \frac{(\Delta z)^2}{6}, \quad C = \Delta r, \quad C^r = \frac{(\Delta r)^2}{6}, \quad \delta_i^c = \frac{(\Delta r)^2}{12r_i},$$

$$s_r = \text{sign}(\xi), \quad s_z = \text{sign}(\mu). \quad (1.10.51)$$

Отметим, что выбор (1.10.51) нормировочного коэффициента $V_{i,k}^r$ в определении первого радиального пространственного момента ψ^r (1.10.49) гарантирует выполнение условия [34]: дополнительное уравнение LB/QC схемы [26, 27] $\psi_{i+1/2} = 2\psi^r + \psi_{i-1/2}$ по r удовлетворяется точно на линейных по r решениях вида: $\psi(r) = a + br$.

Для получения разностной схемы к трем точным балансным уравнениям (1.10.39), (1.10.47) и (1.10.48) следует добавить семь дополнительных уравнений. WLB/QC-WLD схеме соответствует следующий выбор этих уравнений [4, 31, 35, 36]:

$$\psi_R = (1 - P_r)\psi + (P_r + Q_r)s_r\psi^r + P_r\psi_L, \quad \psi_T = (1 - P_z)\psi + (P_z + Q_z)s_z\psi^z + P_z\psi_B,$$

$$\psi_R^z = \psi^z + T_r s_r s_z \psi^r, \quad \psi_T^r = \psi^r + T_z s_r s_z \psi^z, \quad s_r = \text{sign}(\xi), \quad s_z = \text{sign}(\mu), \quad (1.10.52)$$

$$\psi_{m+1/2} = (1 + P_\xi) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) - P_\xi \psi_{m-1/2}, \quad \psi_{m+1/2}^r = (1 + P_\xi^r) \psi^r - P_\xi^r \psi_{m-1/2}^r,$$

$$\psi_{m+1/2}^z = (1 + P_\xi^z) \psi^z - P_\xi^z \psi_{m-1/2}^z, \quad 0 \leq P_\xi, P_\xi^r, P_\xi^z \leq 1. \quad (1.10.53)$$

Веса P_t и Q_t , $t = r, z$, в уравнениях (1.10.52) изменяются в пределах [35]:

$$0 \leq P_t \leq 1, \quad Q_t = 1 \quad \text{или} \quad P_t = 0, \quad 1/E^- \leq Q_r < 1, \quad 1/3 \leq Q_z < 1 \quad \text{или} \quad P_t = 0, \quad Q_t > 1, \quad (1.10.54)$$

где

$$E^- = V \left(\frac{\Delta r}{2} + s \delta^c \right) / V^r. \quad (1.10.55)$$

Случай $P_t = Q_t = 1$, $T_t = 0$ соответствует LB схеме 4-ого порядка точности, случай $P_t = 0$, $Q_t = 1$, $T_t = 0$ соответствует LD схеме 3-ого порядка точности.

Как и в случае 1D криволинейных геометрий, дополнительное уравнение WDD схемы, связывающее входящие и выходящие радиальные пространственные моменты нулевого порядка $\psi_{m\pm 1/2}$ на гранях $\xi_{l,m\pm 1/2}$ разностной ячейки, включает член $\sim \psi^r$, позволяющий учесть различие в пространственном весовом множителе в определении ψ и $\psi_{m\pm 1/2}$. Отметим, что дополнительные уравнения (1.10.53) выполняются точно на постоянных по углу φ и линейных по пространственным переменным r и z решениях:

$$\psi(r, z, \mu, \varphi) = \psi + \frac{2}{\Delta r} (r - r_i - \delta_i^c) \psi^r + \frac{2}{\Delta z} (z - z_k) \psi^z. \quad (1.10.56)$$

В дальнейшем ограничим выбор весов P_ξ^r и P_ξ^z в экстраполяционных соотношениях для $\psi_{m+1/2}^r$ и $\psi_{m+1/2}^z$ (1.10.53) условием:

$$P_\xi^r = P_\xi^z = P_\xi. \quad (1.10.57)$$

Система дополнительных уравнений LD схемы для случая x, y геометрии была предложена в работе [38]. Система дополнительных уравнений WLB-WLD схемы (1.10.52)–(1.10.54) представляет собой обобщение указанной системы на случай семейства взвешенных нодальных схем в r, z геометрии. Отметим, что альтернативный достаточно эффективный, но менее общий вариант построения LD схемы в r, z геометрии предложен в работе [42].

Подстановка дополнительных уравнений (1.10.52)–(1.10.53) в балансные соотношения (1.10.39), (1.10.47) и (1.10.48) приводит к следующей системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ , ψ^r и ψ^z :

$$\begin{aligned} a_{11}\psi + a_{12}\psi^r + a_{13}\psi^z &= b_1 \\ a_{21}\psi + a_{22}\psi^r + a_{23}\psi^z &= b_2, \\ a_{31}\psi + a_{32}\psi^r + a_{33}\psi^z &= b_3 \end{aligned} \quad (1.10.58)$$

где элементы матриц A и B имеют вид:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \sigma V + |\mu|v_r(1-P_z) + |\xi|v_z A^+(1-P_r) + \frac{C}{w}v_z\alpha_{m+1/2}(1+P_\xi), \\ a_{12} &= v_z\xi A^+(Q_r+P_r) - \delta^c \frac{2}{\Delta r} \frac{C}{w}v_z\alpha_{m+1/2}(1+P_\xi), \\ a_{13} &= v_r\mu(Q_z+P_z), \quad a_{21} = v_z \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r\delta^c \right) (1-P_r) - v_r \right] - \delta^c \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1+P_\xi) \right\}, \\ a_{22} &= |\mu|v_r^1 + |\xi|v_z A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r\delta^c \right) (Q_r+P_r) + (\delta^c)^2 \frac{2}{\Delta r} \frac{C}{w}v_z\alpha_{m+1/2}(1+P_\xi) + \frac{C^r}{w}v_z\alpha_{m+1/2}(1+P_\xi^r) + \sigma V^r, \\ a_{23} &= \mu v_r^1 s_r T_z, \quad a_{31} = -\frac{1}{2}\mu V(1+P_z), \quad a_{32} = \xi v_z^1 A^+ s_z T_r, \\ a_{33} &= |\mu|v_r \frac{\Delta z}{2}(Q_z+P_z) + |\xi|v_z^1 A^+ + v_z^1 \frac{C}{w}\alpha_{m+1/2}(1+P_\xi^z) + \sigma V^z, \\ b_1 &= VS + |\mu|v_r(1-P_z)\psi_B + v_z \left[|\xi|(A^- - A^+P_r)\psi_L + \frac{C}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\xi\alpha_{m+1/2})\psi_{m-1/2} \right], \\ b_2 &= V^r S^r + |\mu|v_r^1\psi_B^r - v_z \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r\delta^c \right) P_r + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r\delta^c \right) \right] \psi_L - \right. \\ &\quad \left. - \frac{C^r}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\xi^r\alpha_{m+1/2})\psi_{m-1/2}^r + \delta^c \frac{C}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\xi\alpha_{m+1/2})\psi_{m-1/2} \right\}, \end{aligned}$$

$$b_3 = V^z S^z - \mu v_r \frac{\Delta z}{2} (1 + P_z) \psi_B + v_z^1 \left[|\xi| A^- \psi_L^z + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi^z \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}^z \right]. \quad (1.10.59)$$

Решение системы (1.10.58) находится по формулам Крамера.

Система балансных уравнений для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\xi_{l,1/2} = -\sqrt{1 - \mu_l^2}$), используемых для нахождения граничных значений потока $\psi_{i,k,l,1/2}$, $\psi_{i,k,l,1/2}^r$ и $\psi_{i,k,l,1/2}^z$ по угловой переменной ξ , состоит из уравнения баланса нулевого порядка (1.10.43), в котором вместо (1.10.44) используется более точное соотношение:

$$\psi_{i,k,l,1/2} \approx \psi_{i,k,l}^{(0)} - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi_{i,k,l}^r, \quad (1.10.60)$$

учитывающее линейную аппроксимацию решения в ячейке (1.10.56) и уравнений баланса первого порядка, которые получаются путем интегрирования уравнения (1.10.38) по граничной ячейке с весами $2(r - r_i - \delta_i^c) / \Delta r$ и $2(z - z_k) / \Delta z$:

$$|\mu| v_r (\psi_T - \psi_B) + \Delta z |\xi| \left[(A^+ \psi_R - A^- \psi_L) + (A^- - A^+) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) \right] + \sigma V \psi = VS, \quad (1.10.61)$$

$$|\mu| v_r^1 (\psi_T^r - \psi_B^r) + v_z \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) \psi_R + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \psi_L - v_r \psi + \delta^c C \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) - C^r \psi^r \right] + \sigma V^r \psi^r = V^r S^r, \quad (1.10.62)$$

$$\mu V \left[\frac{1}{2} (\psi_T + \psi_B) - \psi \right] + v_z^1 |\xi| \left[(A^+ \psi_R^z - A^- \psi_L^z) + (A^- - A^+) \psi^z \right] + \sigma V^z \psi^z = V^z S^z, \quad (1.10.63)$$

В случае WLB-WLD схемы эти уравнения дополняются четырьмя дополнительными уравнениями (1.10.52). Подставляя их в балансные соотношения (1.10.39), (1.10.62) и (1.10.63) получим систему вида (1.10.58) со следующими коэффициентами:

$$a_{11} = \sigma V + |\mu| v_r (1 - P_z) + |\xi| v_z (A^- - P_r A^+), \quad a_{12} = v_z \xi \left[A^+ (Q_r + P_r) + 2\delta^c \right], \quad a_{13} = v_r \mu (Q_z + P_z),$$

$$a_{21} = v_z \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (1 - P_r) - v_r + \delta^c C \right],$$

$$a_{22} = |\mu| v_r^1 + v_z |\xi| \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (Q_r + P_r) - s_r (\delta^c)^2 C \frac{2}{\Delta r} - s_r C^r \right] + \sigma V^r, \quad a_{23} = \mu v_r^1 s_r T_z,$$

$$a_{31} = -\frac{1}{2} \mu V (1 + P_z), \quad a_{32} = \xi v_z^1 A^+ s_z T_r, \quad a_{33} = \frac{1}{2} |\mu| V (Q_z + P_z) + |\xi| v_z^1 A^- + \sigma V^z,$$

$$b_1 = VS + |\mu| v_r (1 - P_z) \psi_B + |\xi| v_z (A^- - A^+ P_r) \psi_L,$$

$$b_2 = V^r S^r + |\mu| v_r^1 \psi_B^r - v_z \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) P_r + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \right] \psi_L,$$

$$b_3 = V^z S^z - \frac{1}{2} \mu V (1 + P_z) \psi_B + v_z^1 |\xi| A^- \psi_L^z. \quad (1.10.64)$$

Следует отметить, что расчет ячейки с использованием WLB-WLD схемы происходит аналогично случаю WDD схемы. Вначале из решения системы вида (1.10.58) находятся нулевой и первые пространственные моменты решения в ячейке, а затем по явным формулам (1.10.52), (1.10.53) находятся граничные потоки и соответствующие пространственные моменты граничных потоков на выходящих гранях ячейки.

Как показывает геометрическая интерпретация WLB-WLD схемы [35], путем соответствующего выбора весов в дополнительных уравнениях (1.10.52), (1.10.53) можно обеспечить положительность схемы.

Определение положительности нодальной схемы в r, z геометрии основывается на следующих неравенствах, которые имеют место для каждой функции $f(r, z)$, неотрицательной в области $[r_{i-1/2}, r_{i+1/2}] \times [z_{k-1/2}, z_{k+1/2}]$:

$$-\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi \leq \psi^r \leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi, \quad |\psi^z| \leq 3\psi. \quad (1.10.65)$$

Отметим, что равенства в (1.10.64) имеют место при $\psi(r, z) \sim \delta(r - r_{i\pm 1/2})$ и $\psi(r, z) \sim \delta(z - z_{k\pm 1/2})$.

Положительная нодальная схема при неотрицательных входящих потоках и источнике в ячейке:

$$\begin{aligned} \psi_L, \psi_B, \psi_{m-1/2} &\geq 0, & |\psi_L^z| &\leq 3\psi_L, & |\psi_{m-1/2}^z| &\leq 3\psi_{m-1/2}, & |\psi_{m-1/2}^r| &\leq 3\psi_{m-1/2}, \\ & & -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi_B &\leq \psi_B^r &\leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi_B, \\ S &\geq 0, & -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} S &\leq S^r &\leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} S, & |S^z| &\leq 3S, \end{aligned} \quad (1.10.66)$$

должна обеспечивать неотрицательность выходящих потоков и решения в ячейке:

$$\begin{aligned} \psi_R, \psi_T, \psi_{m+1/2} &\geq 0, & |\psi_R^z| &\leq 3\psi_R, & |\psi_{m+1/2}^z| &\leq 3\psi_{m+1/2}, & |\psi_{m+1/2}^r| &\leq 3\psi_{m+1/2}, \\ & & -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi_T &\leq \psi_T^r &\leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi_T, \\ \psi &\geq 0, & -\left(\frac{\Delta r}{2} + \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi &\leq \psi^r &\leq \left(\frac{\Delta r}{2} - \delta^c\right) \frac{v_r}{v_r^1} \psi, & |\psi^z| &\leq 3\psi. \end{aligned} \quad (1.10.67)$$

Рассмотрим далее построение семейств WDD и WLB/QC-WLD схем в 2D r, ϑ геометрии. В этой геометрии отсутствует зависимость решения от аксиальной переменной z и уравнение переноса (1.1.6) приобретает вид:

$$\eta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \xi \frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi}(\eta\psi) + \sigma r\psi(r, \vartheta, \mu, \varphi) = rS(r, \vartheta, \mu, \varphi), \quad (1.10.68)$$

где с учетом имеющейся в данной геометрии симметрии: $\psi(r, \vartheta, \mu, \varphi) = \psi(r, \vartheta, -\mu, \varphi)$ единичный вектор $\vec{\Omega}$ направления скорости частицы (1.1.7) изменяется в пределах четырех октантов: $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$, $0 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Предполагается также, что: $0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{out}}$, $0 \leq \vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_{\text{end}} \leq 2\pi$.

Правую часть уравнения (1.10.68), учитывая имеющуюся симметрию, можно представить в виде:

$$S(r, \vartheta, \mu, \varphi) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} \sum_{\substack{m=-l \\ l+m=2n}}^l Y_l^m(\mu, \varphi) \Phi_l^m(r, \vartheta) + f(r, \vartheta, \mu, \varphi), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.10.69)$$

Для граничного направления $\varphi = \pi$, используемого для задания граничных условий по угловой переменной φ при расчете ячеек в r, ϑ геометрии, уравнение (1.10.68) имеет вид:

$$\xi \left[\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \psi \right] + \sigma r\psi(r, \vartheta, \mu, \varphi) = rS(r, \vartheta, \mu, \varphi). \quad (1.10.70)$$

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (1.10.68) по разностной ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\vartheta_{k-1/2}, \vartheta_{k+1/2}) \times (\varphi_{l,m-1/2}, \varphi_{l,m+1/2}) \times (\mu_{l-1/2}, \mu_{l+1/2})$, $i = 1, \dots, I$, $k = 1, \dots, K$:

$$|\eta| \Delta r (\psi_P - \psi_F) + \Delta \vartheta \left[|\xi| (A^+ \psi_R - A^- \psi_L) + \frac{C}{W} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) \right] + \sigma V \psi = VS, \quad (1.10.71)$$

где

$$\alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} = -w_{l,m} \xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_{l+1/2}} = 0, \quad m = 1, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L,$$

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad \Delta r_i = C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}, \quad \Delta \vartheta_k = v_{\vartheta,k} = \vartheta_{k+1/2} - \vartheta_{k-1/2}, \quad V_{i,k} = \Delta \vartheta_k v_{r,i}, \quad v_{r,i} = \frac{1}{2} (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2),$$

$$\psi_{R(L)} \equiv \psi_r^\pm = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, k, l, m}, \xi_{l,m} > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, k, l, m}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}, \quad \psi_{P(F)} \equiv \psi_\vartheta^\pm = \begin{cases} \psi_{i, k\pm 1/2, l, m}, \eta_{l,m} > 0 \\ \psi_{i, k\mp 1/2, l, m}, \eta_{l,m} < 0 \end{cases}, \quad A^\pm = \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, \xi_{l,m} > 0 \\ A_{i\mp 1/2}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}. \quad (1.10.72)$$

Здесь $\psi_{i\pm 1/2, k, l, m}$ и $\psi_{i, k\pm 1/2, l, m}$ - нулевые пространственные моменты потока на пространственных гранях ячейки по переменным r и ϑ :

$$\psi_{i\pm 1/2, k, l, m} = \frac{1}{\Delta \vartheta} \int_{\vartheta_{k-1/2}}^{\vartheta_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r_{i\pm 1/2}, \vartheta) d\vartheta, \quad \psi_{i, k\pm 1/2, l, m} = \frac{1}{\Delta r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_{l,m}(r, \vartheta_{k\pm 1/2}) dr,$$

Для получения взвешенной алмазной (WDD) схемы к уравнению баланса (1.10.71) следует добавить три дополнительных уравнения:

$$\psi_R = (1 + P_r)\psi - P_r\psi_L, \quad \psi_P = (1 + P_\vartheta)\psi - P_\vartheta\psi_F, \quad \psi_{m+1/2} = (1 + P_\xi)\psi - P_\xi\psi_{m-1/2},$$

$$0 \leq P_r, P_g, P_\xi \leq 1. \quad (1.10.73)$$

Исключая посредством уравнений (1.10.73) выходящие потоки на гранях разностной ячейки в уравнении баланса (1.10.71), получим следующее значение для среднего значения потока в ячейке:

$$\psi = \frac{\Delta r |\eta| (1 + P_g) \psi_F + \Delta \mathcal{G} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_L + \frac{C}{W} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} \right] + VS}{\Delta r |\eta| (1 + P_g) + \Delta \mathcal{G} \left[|\xi| A^+ (1 + P_r) + \frac{C}{W} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi) \right] + \sigma V}. \quad (1.10.74)$$

Для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\xi_{i,1/2} = -\sqrt{1 - \mu_l^2}$, $\eta_{i,1/2} = 0$), используемых в криволинейной геометрии для нахождения граничных значений потока $\psi_{i,k,l,1/2}$ по угловой переменной ξ , уравнение баланса, которое получается путем интегрирования уравнения (1.10.70) по граничной ячейке, имеет вид:

$$\Delta \mathcal{G} |\xi| [(A^+ \psi_R - A^- \psi_L) + (A^- - A^+) \psi_{i,k,l,1/2}] + \sigma V \psi_{i,k,l}^{(0)} = VS_{i,k,l}^{(0)}. \quad (1.10.75)$$

Для расчета граничных ячеек уравнение (1.10.75) дополняется предположением, что:

$$\psi_{i,k,l,1/2} \approx \psi_{i,k,l}^{(0)} \quad (1.10.76)$$

и дополнительным WDD уравнением по радиальной пространственной переменной:

$$\psi_R = (1 + P_r) \psi - P_r \psi_L, \quad 0 \leq P_r \leq 1. \quad (1.10.77)$$

Среднее значение потока для граничных ячеек имеет вид:

$$\psi = \frac{\Delta \mathcal{G} |\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_L + VS}{\Delta \mathcal{G} |\xi| (A^- + P_r A^+) + \sigma V}. \quad (1.10.78)$$

Для построения нодальной WLB/QC-WLD схемы 2-4-ого порядка точности кроме уравнения баланса нулевого порядка (1.10.71) нам потребуются также уравнения баланса первого порядка по ячейке, получаемые интегрированием уравнения (1.10.68) по разностной ячейке с весами $2(r - r_i - \delta_i^c) / \Delta r$ и $2(\mathcal{G} - \mathcal{G}_k) / \Delta \mathcal{G}$, где δ_i^c - малое отклонение от центра ячейки, выбираемое из условия $\int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (r - r_i - \delta_i^c) r dr = 0$:

$$\begin{aligned} & |\eta| v_{r0}^1 (\psi_P^r - \psi_F^r) - |\eta| \Delta r \delta^c (\psi_P - \psi_F) + v_g \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) \psi_R + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \psi_L - v_r \psi \right] + \right. \\ & \left. + \frac{C^r}{W} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}^r - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}^r) - \delta^c \frac{C}{W} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) \right\} + \sigma V^r \psi^r = V^r S^r, \quad (1.10.79) \end{aligned}$$

$$\eta \Delta r v_g \left[\frac{1}{2} (\psi_P + \psi_F) - \psi \right] + v_g^1 \left[|\xi| (A^+ \psi_R^g - A^- \psi_L^g) + \frac{C}{W} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2}^g - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}^g) \right] + \sigma V^g \psi^g = V^g S^g, \quad (1.10.80)$$

где ψ - среднее значение (нулевой пространственный момент) потока в ячейке, ψ^r и ψ^g - первые пространственные моменты потока по переменным r и g :

$$\begin{aligned} \psi_{i,k,l,m} &= \frac{1}{V_{i,k}} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r, g) r dr d g, & \psi_{i,k,l,m}^r &= \frac{1}{V_{i,k}^r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r, g) (r - r_i - \delta_i^c) r dr d g, \\ \psi_{i,k,l,m}^g &= \frac{1}{V_{i,k}^g} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l,m}(r, g) (g - g_k) r dr d g, \end{aligned} \quad (1.10.81)$$

(аналогично определяются и пространственные моменты источника S , S^r и S^g), $\psi_{R(L)}$ и $\psi_{P(F)}$ - нулевые, а $\psi_{R(L)}^g$ и $\psi_{P(F)}^r$ - первые пространственные моменты потока на пространственных гранях ячейки:

$$\psi_{R(L)}^g = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, k, l, m}^g, \xi_{l, m} > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, k, l, m}^g, \xi_{l, m} < 0 \end{cases}, \quad \psi_{P(F)}^r = \begin{cases} \psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r, \eta_{l, m} > 0 \\ \psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r, \eta_{l, m} < 0 \end{cases},$$

где

$$\psi_{i, k\pm 1/2, l, m}^r = \frac{1}{v_{r0}^1} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \psi_{l, m}(r, g_{k\pm 1/2}) (r - r_i) dr, \quad \psi_{i\pm 1/2, k, l, m}^g = \frac{1}{v_g^1} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l, m}(r_{i\pm 1/2}, g) (g - g_k) d g.$$

$\psi_{m\pm 1/2}$, $\psi_{m\pm 1/2}^r$ и $\psi_{m\pm 1/2}^g$ - нулевой и первые пространственные моменты решения на входящей ($m - 1/2$) и выходящей ($m + 1/2$) угловой грани ячейки:

$$\begin{aligned} \psi_{i, k, l, m\pm 1/2} &= \frac{1}{C v_g} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l, m\pm 1/2}(r, g) dr d g, & \psi_{i, k, l, m\pm 1/2}^r &= \frac{1}{v_{r0}^1 v_g} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l, m\pm 1/2}(r, g) (r - r_i) dr d g, \\ \psi_{i, k, l, m\pm 1/2}^g &= \frac{1}{C v_g^1} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} \psi_{l, m\pm 1/2}(r, g) (g - g_k) dr d g, \end{aligned} \quad (1.10.82)$$

$$V = v_r v_g, \quad V_{i,k}^r = \frac{2}{\Delta r} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} (r - r_i - \delta_i^c)^2 r dr d g = v_r^1 v_g, \quad V_{i,k}^g = \frac{2}{\Delta g} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \int_{g_{k-1/2}}^{g_{k+1/2}} (g - g_k)^2 r dr d g = v_r v_g^1,$$

$$v_r = \frac{1}{2} (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad v_g = \Delta g, \quad v_r^1 = \frac{(\Delta r_i)^2}{6} (r_i - \delta_i^c), \quad v_{r0}^1 = C^r = \frac{(\Delta r_i)^2}{6}, \quad v_g^1 = \frac{(\Delta g)^2}{6}, \quad C = \Delta r,$$

$$\delta_i^c = \frac{(\Delta r)^2}{12 r_i}, \quad s_r = \text{sign}(\xi), \quad s_g = \text{sign}(\eta). \quad (1.10.83)$$

Для получения разностной схемы к трем точным балансным уравнениям (1.10.71), (1.10.79) и (1.10.80) следует добавить семь дополнительных уравнений. WLB/QC-WLD схеме соответствует следующий выбор этих уравнений:

$$\begin{aligned} \psi_R &= (1 - P_r) \psi + (P_r + Q_r) s_r \psi^r + P_r \psi_L, & \psi_P &= (1 - P_g) \psi + (P_g + Q_g) s_g \psi^g + P_g \psi_F, \\ \psi_R^g &= \psi^g + T_r s_r s_g \psi^r, & \psi_P^r &= \psi^r + T_g s_r s_g \psi^g, \quad s_r = \text{sign}(\xi), \quad s_g = \text{sign}(\eta), \end{aligned} \quad (1.10.84)$$

$$\begin{aligned}\psi_{m+1/2} &= (1 + P_\xi) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) - P_\xi \psi_{m-1/2}, & \psi_{m+1/2}^r &= (1 + P_\xi^r) \psi^r - P_\xi^r \psi_{m-1/2}^r, \\ \psi_{m+1/2}^g &= (1 + P_\xi^g) \psi^g - P_\xi^g \psi_{m-1/2}^g, & 0 \leq P_\xi, P_\xi^r, P_\xi^g &\leq 1,\end{aligned}\quad (1.10.85)$$

Весы P_t и Q_t , $t = r, g$, в уравнениях (1.10.84) изменяются в пределах:

$$0 \leq P_t \leq 1, Q_t = 1 \quad \text{или} \quad P_t = 0, 1/E^- \leq Q_r < 1, 1/3 \leq Q_g < 1 \quad \text{или} \quad P_t = 0, Q_t > 1, \quad (1.10.86)$$

где E^- определяется уравнением (1.10.55).

Случай $P_t = Q_t = 1, T_t = 0$ соответствует LB схеме 4-ого порядка точности, случай $P_t = 0, Q_t = 1, T_t = 0$ - LD схеме 3-ого порядка точности.

Как и в случае r, z геометрии, дополнительное уравнение WDD схемы, связывающее входящие и выходящие радиальные пространственные моменты нулевого порядка $\psi_{m\pm 1/2}$ на гранях $\xi_{l, m\pm 1/2}$ разностной ячейки, включает член $\sim \psi^r$, позволяющий учесть различие в пространственном весовом множителе в определении ψ и $\psi_{m\pm 1/2}$. Отметим, что дополнительные уравнения (1.10.85) выполняются точно на постоянных по углу φ и линейных по пространственным переменным r и g решениях:

$$\psi(r, g, \mu, \varphi) = \psi + \frac{2}{\Delta r} (r - r_i - \delta_i^c) \psi^r + \frac{2}{\Delta g} (g - g_k) \psi^g. \quad (1.10.87)$$

В дальнейшем ограничим выбор весов P_ξ^r и P_ξ^g в экстраполяционных соотношениях для $\psi_{m+1/2}^r$ и $\psi_{m+1/2}^g$ (1.10.85) условием:

$$P_\xi^r = P_\xi^g = P_\xi. \quad (1.10.88)$$

Аналогичная поправка, компенсирующая использование различного весового множителя по радиальной переменной r в определении величин $\psi_{P(F)}$ и ψ , включена и в экстраполяционное соотношение WLB-WLD схемы по переменной g для величины ψ_p (1.10.84).

Подстановка дополнительных уравнений (1.10.84)–(1.10.85) в балансные соотношения (1.10.71), (1.10.79) и (1.10.80) приводит к следующей системе уравнений относительно пространственных моментов решения в ячейке ψ , ψ^r и ψ^g :

$$\begin{aligned}a_{11}\psi + a_{12}\psi^r + a_{13}\psi^g &= b_1 \\ a_{21}\psi + a_{22}\psi^r + a_{23}\psi^g &= b_2, \\ a_{31}\psi + a_{32}\psi^r + a_{33}\psi^g &= b_3\end{aligned}\quad (1.10.89)$$

где элементы матриц A и B имеют вид:

$$a_{11} = \sigma V + |\eta| \Delta r (1 - P_g) + |\xi| v_g A^+ (1 - P_r) + \frac{C}{w} v_g \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi),$$

$$\begin{aligned}
a_{12} &= v_g \xi A^+ (Q_r + P_r) - \delta^c \frac{2}{\Delta r} \frac{C}{w} v_g \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi), \quad a_{13} = \eta \Delta r (Q_g + P_g), \\
a_{21} &= v_g \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (1 - P_r) - v_r \right] - \delta^c \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi) \right\} - \delta^c |\eta| \Delta r (1 - P_g), \\
a_{22} &= |\eta| v_{r0}^1 + |\xi| v_g A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (Q_r + P_r) + (\delta^c)^2 \frac{2}{\Delta r} \frac{C}{w} v_g \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi) + \\
&\quad + \frac{C^r}{w} v_g \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi^r) + \sigma V^r, \\
a_{23} &= \eta v_{r0}^1 s_r T_g - \eta \Delta r \delta^c (P_g + Q_g), \quad a_{31} = 0, \quad a_{32} = \xi v_g^1 A^+ s_g T_r, \\
a_{33} &= |\eta| \Delta r \frac{v_g}{2} (Q_g + P_g) + |\xi| v_g^1 A^+ + v_g^1 \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi^g) + \sigma V^g, \\
b_1 &= VS + |\eta| \Delta r (1 - P_g) \psi_F + v_g \left[|\xi| (A^- - A^+ P_r) \psi_L + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} \right], \\
b_2 &= V^r S^r + |\eta| v_{r0}^1 \psi_F^r - |\eta| \Delta r \delta^c (1 - P_g) \psi_F - v_g \left\{ \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) P_r + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \right] \psi_L - \right. \\
&\quad \left. - \frac{C^r}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi^r \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}^r + \delta^c \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} \right\}, \\
b_3 &= V^g S^g - \eta \Delta r \frac{v_g}{2} (1 + P_g) \psi_F + v_g^1 \left[|\xi| A^- \psi_L^g + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi^g \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2}^g \right]. \quad (1.10.90)
\end{aligned}$$

Решение системы (1.10.89) находится по формулам Крамера.

Система балансных уравнений для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\xi_{l,1/2} = -\sqrt{1 - \mu_l^2}$), используемых для нахождения граничных значений потока $\psi_{i,k,l,1/2}$, $\psi_{i,k,l,1/2}^r$ и $\psi_{i,k,l,1/2}^g$ по угловой переменной ξ , состоит из уравнения баланса нулевого порядка (1.10.75), в котором вместо (1.10.76) используется более точное соотношение:

$$\psi_{i,k,l,1/2} \approx \psi_{i,k,l}^{(0)} - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi_{i,k,l}^r, \quad (1.10.91)$$

учитывающее линейную аппроксимацию решения в ячейке (1.10.87) и уравнений баланса первого порядка, которые получаются путем интегрирования уравнения (1.10.70) по граничной ячейке с весами $2(r - r_i - \delta_i^c) / \Delta r$ и $2(g - g_k) / \Delta g$:

$$v_g |\xi| \left[(A^+ \psi_R - A^- \psi_L) + (A^- - A^+) \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) \right] + \sigma V \psi = VS, \quad (1.10.92)$$

$$v_g \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) \psi_R + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \psi_L - v_r \psi + \delta^c C \left(\psi - \frac{2}{\Delta r} \delta^c \psi^r \right) - C^r \psi^r \right] + \sigma V^r \psi^r = V^r S^r, \quad (1.10.93)$$

$$v_g^1 |\xi| \left[(A^+ \psi_R^g - A^- \psi_L^g) + (A^- - A^+) \psi^g \right] + \sigma V^g \psi^g = V^g S^g, \quad (1.10.94)$$

В случае WLB-WLD схемы первые два балансных уравнения (1.10.92) и (1.10.93) дополняются экстраполяционным соотношением WLB-WLD схемы по радиальной переменной:

$$\psi_R = (1 - P_r) \psi + (P_r + Q_r) s_r \psi^r + P_r \psi_L, \quad (1.10.95)$$

а балансное уравнение (1.10.94) – дополнительным соотношением:

$$\psi_R^g = \psi^g. \quad (1.10.96)$$

Таким образом, в r, g геометрии, система уравнений для расчета граничных ячеек вырождается в систему уравнений для определения ψ и ψ^r :

$$\begin{cases} a_{11} \psi + a_{12} \psi^r = b_1 \\ a_{21} \psi + a_{22} \psi^r = b_2 \end{cases}, \quad (1.10.97)$$

где

$$a_{11} = \sigma V + |\xi| v_g (A^- - P_r A^+), \quad a_{12} = v_g \xi \left[A^+ (Q_r + P_r) + 2\delta^c \right],$$

$$a_{21} = v_g \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (1 - P_r) - v_r + \delta^c C \right],$$

$$a_{22} = v_g |\xi| \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) (Q_r + P_r) - s_r \left[2(\delta^c)^2 + C^r \right] \right] + \sigma V^r,$$

$$b_1 = VS + |\xi| v_g (A^- - A^+ P_r) \psi_L, \quad b_2 = V^r S^r - v_g \xi \left[A^+ \left(\frac{\Delta r}{2} - s_r \delta^c \right) P_r + A^- \left(\frac{\Delta r}{2} + s_r \delta^c \right) \right] \psi_L.$$

Величина ψ^g находится по явной формуле:

$$\psi^g = \frac{V^g S^g + v_g^1 |\xi| A^- \psi_L^g}{v_g^1 |\xi| A^- + \sigma V^g}. \quad (1.10.98)$$

1.11. Адаптивная WDD схема для уравнения переноса в многомерной криволинейной геометрии

Построение AWDD схемы в криволинейной многомерной геометрии мы проведем на примере уравнения переноса в r, g, z геометрии. Для аппроксимации интеграла рассеяния введем квадратуру на единичной сфере угловых направлений (8 октантов): $-1 \leq \xi, \eta, \mu \leq 1$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ следующего вида:

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) + \int_{-1}^1 d\mu \int_{\pi}^{2\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) =$$

$$= \sum_{l=1}^{L_1} \sum_{m=1}^{M_l^{(1)}} w_{l,m}^{(1)} f(\mu_l^{(1)}, \varphi_{l,m}^{(1)}) + \sum_{l=1}^{L_2} \sum_{m=1}^{M_l^{(2)}} w_{l,m}^{(2)} f(\mu_l^{(2)}, \varphi_{l,m}^{(2)}). \quad (1.11.1)$$

Таким образом, для передней $0 < \varphi < \pi$ ($\eta_{l,m} > 0$) и задней $\pi < \varphi < 2\pi$ ($\eta_{l,m} < 0$) полусфер, вообще говоря, может использоваться различная квадратура. Квадратура, например, для передней полусферы (I, II, V и VI октанты) разбивает ее на L_1 полос по переменной μ веса $w_l^{(1)}$, а каждая полоса l , $l = 1, \dots, L_1$, дополнительно разбивается еще на $M_l^{(1)}$ секторов веса $w_{l,m}^{(1)}$, где индекс m на l -ом слое пробегает значения: $m = 1, \dots, M_l^{(1)}$. Нумерация узлов по φ на l -ом слое соответствует возрастанию $\xi_{l,m}^{(1)}$ (убыванию $\varphi_{l,m}^{(1)}$, при $0 < \varphi < \pi$). Аналогично устроена квадратура и для задней полусферы (III, IV, VII и VIII октанты). Нумерация узлов по φ на l -ом слое для нее соответствует возрастанию $\xi_{l,m}^{(2)}$ (и $\varphi_{l,m}^{(2)}$) при $\pi < \varphi < 2\pi$. Для обычно используемых симметричных квадратур квадратура для задней полусферы получается из квадратуры для передней полусферы путем зеркального отражения относительно точки $\varphi = \pi$. Ниже мы будем, как правило, опускать индекс полусферы.

Использование квадратур вида (1.11.1) связано с тем, что в S_n методе квадратурная сетка по углу φ одновременно используется и для аппроксимации частной производной по этому углу в уравнении (1.1.6). Примером квадратуры вида (1.11.1) является симметричная ES_n квадратура [6], имеющая одинаковые веса $w_{l,m} = 4\pi / (n(n+2))$, где n - порядок квадратуры (см. Рис. 1.11.1).

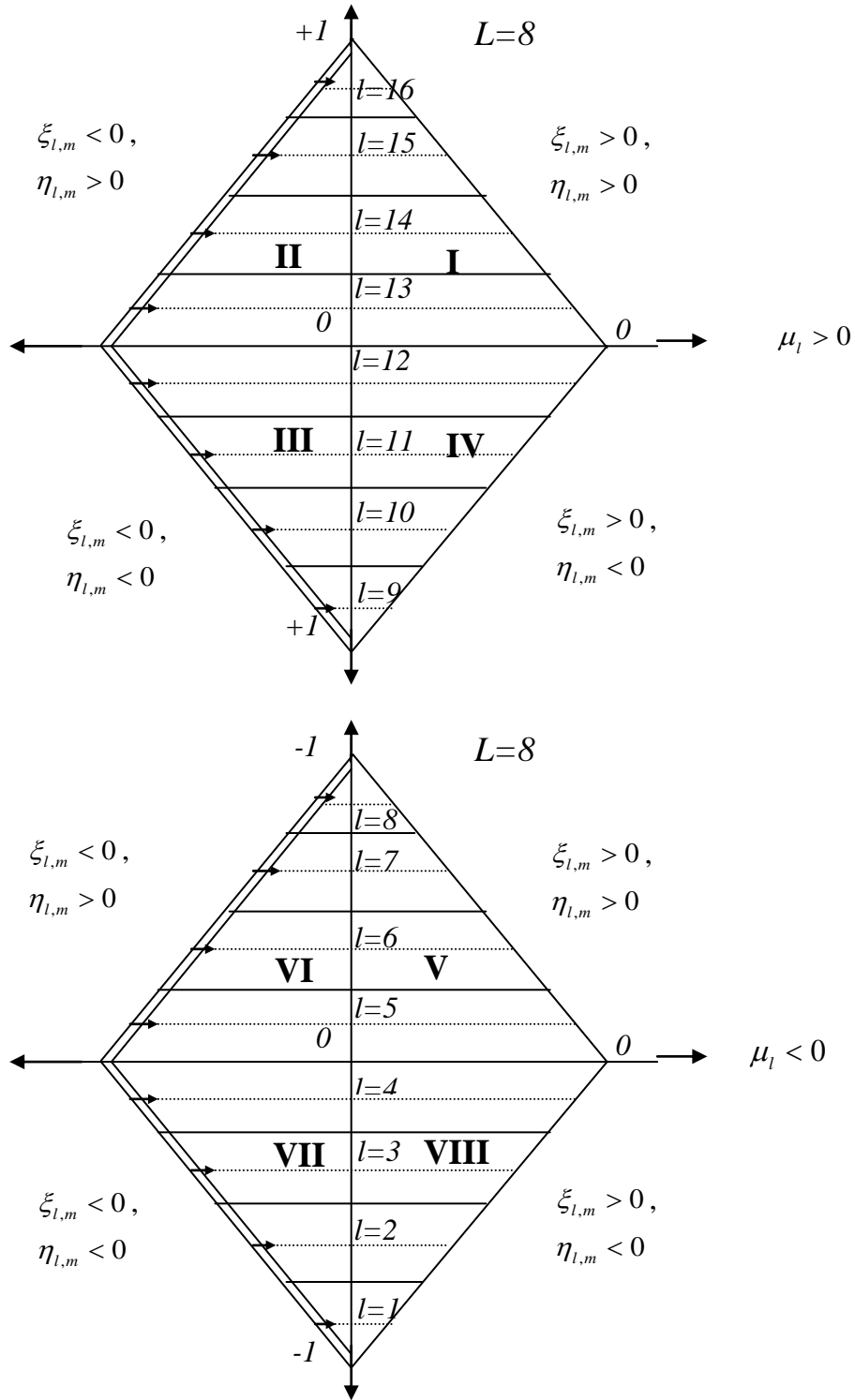


Рисунок 1.11.1. Последовательность расположения слоев квадратуры с одинаковыми значениями μ_l по октантам единичной сферы угловых направлений

Отметим, что используемая ниже в данном разделе нумерация узлов квадратуры отличается от принятой в уравнении (1.11.1):

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\varphi F(\mu, \varphi) \cong \sum_{l=0}^L \sum_{m=1}^{M_l} w_{l,m} F(\mu_l, \varphi_{l,m}), \quad \sum_{l=0}^L \sum_{m=1}^{M_l} w_{l,m} = 4\pi, \quad M_l = M_l^- + M_l^+, \quad \sum_{l=1}^L M_l = M, \quad (1.11.2)$$

В уравнении (1.11.2) M_l^- и M_l^+ задают, соответственно, число узлов с $\xi_{l,m} < 0$ и $\xi_{l,m} > 0$ на слое μ_l ; угловые направления на слое нумеруются в направлении возрастания ξ , M - полное число узлов квадратуры. Предполагается также, что $\varphi_{l,1} = \pi$, $w_{l,1} = 0$. Эти направления используются как граничные для начала расчета слоя с $\mu = \mu_l$, $m = 1, \dots, M_l$. Стрелки на Рис. 1.11.1 указывают направления расчета ячеек. Для передней $0 < \varphi < \pi$ ($\eta_{l,m} > 0$) и задней $\pi < \varphi < 2\pi$ ($\eta_{l,m} < 0$) полусфер, вообще говоря, может использоваться различная квадратура по μ .

Точность ES_n квадратуры сопоставима с точностью стандартной S_n квадратуры [7], полностью инвариантной относительно поворотов системы координат на 90° вокруг осей координат, однако, в отличие от последней, у которой при $n > 22$ появляются отрицательные веса, веса ES_n квадратуры, по построению, всегда положительны. В работе [7] рассмотрены и другие варианты S_n квадратур, в частности, симметричная квадратура, полученная путем использования для передней полусферы Гауссовой квадратуры по углу μ порядка $n = 2, 4, \dots$ на интервале $[-1, 1]$ и квадратур Чебышева по углу φ на интервале $[0, \pi]$ порядка $m = 2, 4, \dots, n$, возрастающего от $m = 2$ для слоя вблизи полюса до $m = n$ для слоя вблизи экватора.

К недостаткам S_n и ES_n квадратур можно отнести их сравнительно невысокую алгебраическую точность. Поэтому в задачах с сильной анизотропией рассеяния целесообразно использование квадратур, имеющих более высокую алгебраическую точность, например, квадратуры Чебышева-Гаусса на сфере типа произведение [8], с коэффициентом эффективности (отношением числа точно интегрируемых сферических гармоник к максимально возможному) $2/3$. Альтернативное, более рациональное решение - использование квадратуры типа Гаусса, инвариантной относительно группы диэдра (призмы) [9] (конкретно, варианта, который не содержит узлов, расположенных на полюсах и экваторе сферы). Указанная квадратура имеет послыйный вид (1.11.1) и асимптотический коэффициент эффективности $8/9$.

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (1.1.6) по разностной ячейке

$$(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\vartheta_{j-1/2}, \vartheta_{j+1/2}) \times (z_{k-1/2}, z_{k+1/2}) \times (\varphi_{l,m+1/2}, \varphi_{l,m-1/2}) \times (\mu_{l-1/2}, \mu_{l+1/2}), \quad i = 1, \dots, I, \quad j = 1, \dots, J,$$

$k = 1, \dots, K$ (ниже мы опускаем целые индексы, в том числе, номер группы, в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$\begin{aligned} |\eta| \Delta r \Delta z (\psi_g^+ - \psi_g^-) + |\mu| \nu \Delta \vartheta (\psi_z^+ - \psi_z^-) + \Delta z \Delta \vartheta \left[|\xi| (A^+ \psi_r^+ - A^- \psi_r^-) + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) \right] + \\ + \sigma V \psi = VS, \end{aligned} \quad (1.11.3)$$

где

$$\begin{aligned}
\alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} &= -w_{l,m} \xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_{l+1/2}} = 0, \quad m = 1, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L, \\
A_{i\pm 1/2} &= r_{i\pm 1/2}, \quad v_i = \frac{1}{2}(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad C_i = \Delta r_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}, \quad V_{i,j,k} = v_i \Delta \mathcal{G}_j \Delta z_k, \quad \Delta \mathcal{G}_j = \mathcal{G}_{j+1/2} - \mathcal{G}_{j-1/2}, \\
\psi_g^\pm &= \begin{cases} \psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}, \eta_{l,m} > 0 \\ \psi_{i,j\mp 1/2,k,l,m}, \eta_{l,m} < 0 \end{cases}, \quad \psi_z^\pm = \begin{cases} \psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}, \mu_l > 0 \\ \psi_{i,j,k\mp 1/2,l,m}, \mu_l < 0 \end{cases}, \quad \psi_r^\pm = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}, \xi_{l,m} > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2,j,k,l,m}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}, \\
A^\pm &= \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, \xi_{l,m} > 0 \\ A_{i\mp 1/2}, \xi_{l,m} < 0 \end{cases}. \tag{1.11.4}
\end{aligned}$$

Для получения взвешенной алмазной (WDD) схемы к уравнению баланса (1.11.3) следует добавить четыре дополнительных уравнения:

$$\begin{aligned}
\psi_r^+ &= (1 + P_r)\psi - P_r\psi_r^-, \quad \psi_g^+ = (1 + P_g)\psi - P_g\psi_g^-, \quad \psi_z^+ = (1 + P_z)\psi - P_z\psi_z^-, \quad \psi_{m+1/2} = (1 + P_\xi)\psi - P_\xi\psi_{m-1/2}, \\
0 &\leq P_r, P_g, P_z, P_\xi \leq 1. \tag{1.11.5}
\end{aligned}$$

Исключая посредством уравнений (1.11.5) выходящие потоки на гранях разностной ячейки в уравнении баланса (1.11.3), получим следующее значение для среднего значения потока в ячейке:

$$\psi = \frac{|\eta| \Delta r \Delta z (1 + P_g) \psi_g^- + |\mu| v \Delta \mathcal{G} (1 + P_z) \psi_z^- + \Delta z \Delta \mathcal{G} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_r^- + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} \right] + VS}{|\eta| \Delta r \Delta z (1 + P_g) + |\mu| v \Delta \mathcal{G} (1 + P_z) + \Delta z \Delta \mathcal{G} \left[|\xi| A^+ (1 + P_r) + \frac{C}{w} \alpha_{m+1/2} (1 + P_\xi) \right] + \sigma V}. \tag{1.11.6}$$

Для граничных ячеек с $m = 1/2$ ($\xi_{l,1/2} = -\sqrt{1 - \mu_l^2}$, $\eta_{l,1/2} = 0$), используемых в криволинейной геометрии для нахождения граничных значений потока $\psi_{i,k,l,1/2}$ по угловой переменной ξ , уравнение баланса, которое получается путем интегрирования уравнения (1.1.14) по граничной ячейке, имеет вид:

$$|\mu| v \Delta \mathcal{G} (\psi_z^+ - \psi_z^-) + |\xi| \Delta z \Delta \mathcal{G} [(A^+ \psi_r^+ - A^- \psi_r^-) + (A^- - A^+) \psi] + \sigma V \psi = VS. \tag{1.11.7}$$

Для расчета граничных ячеек это уравнение дополняется двумя дополнительными WDD уравнениями по пространственным переменным:

$$\psi_r^+ = (1 + P_r)\psi - P_r\psi_r^-, \quad \psi_z^+ = (1 + P_z)\psi - P_z\psi_z^-, \quad 0 \leq P_r, P_z \leq 1. \tag{1.11.8}$$

Среднее значение потока для граничных ячеек имеет вид:

$$\psi = \frac{|\mu| v \Delta \mathcal{G} (1 + P_z) \psi_z^- + |\xi| \Delta z \Delta \mathcal{G} (A^- + P_r A^+) \psi_r^- + VS}{|\mu| v \Delta \mathcal{G} (1 + P_z) + |\xi| \Delta z \Delta \mathcal{G} (A^- + P_r A^+) + \sigma V}. \tag{1.11.9}$$

Для расчета весовых коэффициентов P_r , P_g , P_z и P_ξ в дополнительных WDD уравнениях (1.11.5), (1.11.8) может быть использована AWDD схема, которая определяет эти веса в результате оценки градиентов решения по каждой из переменных.

Построение AWDD схемы для случая плоской геометрии [6] рассмотрено выше в разделе 1.3. Ее обобщение на случай криволинейной неоднородной геометрии было предложено в работах [10, 4, 11, 14, 17] и рассмотрено выше в разделе 1.7. Первые численные результаты по использованию AWDD схемы в 3D геометрии получены в [12]. Вышеуказанное обобщение основывается на возможности «квазиодномерного» представления, аналогичного (1.6.36) и (1.6.37), для системы (1.11.3), (1.11.5) по каждой из переменных:

$$|\xi|[(A^+\psi_r^+ - A^-\psi_r^-) + (A^- - A^+)\psi] + \sigma_r v \psi = v S_r, \quad \psi_r^+ = (1 + P_r)\psi - P_r \psi_r^-, \quad (1.11.10)$$

$$|\eta|(\psi_g^+ - \psi_g^-) + \sigma_g \Delta g \psi = \Delta g S_g, \quad \psi_g^+ = (1 + P_g)\psi - P_g \psi_g^-, \quad (1.11.11)$$

$$|\mu|(\psi_z^+ - \psi_z^-) + \sigma_z \Delta z \psi = \Delta z S_z, \quad \psi_z^+ = (1 + P_z)\psi - P_z \psi_z^-, \quad (1.11.12)$$

$$\frac{C}{w}[(\alpha_{m+1/2}\psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2}\psi_{m-1/2}) + (\alpha_{m-1/2} - \alpha_{m+1/2})\psi] + \sigma_\xi v \psi = v S_\xi,$$

$$\psi_{m+1/2} = (1 + P_\xi)\psi - P_\xi \psi_{m-1/2}, \quad (1.11.13)$$

где σ_r , σ_g , σ_z , σ_ξ и S_r , S_g , S_z , S_ξ - эффективные полные сечения и источники для экстраполяции по радиальной, полярной, аксиальной и угловой переменным:

$$\begin{aligned} \sigma_r v &= \sigma_r v + \frac{C}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) + |\mu| \frac{v}{\Delta z} (1 + P_z) + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g), \\ v S_r &= v S + \frac{C}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} + |\mu| \frac{v}{\Delta z} (1 + P_z) \psi_z^- + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g) \psi_g^-, \end{aligned} \quad (1.11.14)$$

$$\sigma_g = \sigma_g + \frac{|\mu|}{\Delta z} (1 + P_z) + \frac{1}{v} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \right],$$

$$S_g = S + \frac{|\mu|}{\Delta z} (1 + P_z) \psi_z^- + \frac{1}{v} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_r^- + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} \right], \quad (1.11.15)$$

$$\sigma_z = \sigma_z + \frac{1}{v} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g) \right],$$

$$S_z = S + \frac{1}{v} \left[|\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_r^- + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\xi \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g) \psi_g^- \right], \quad (1.11.16)$$

$$\sigma_\xi v = \sigma_\xi v + |\xi| (A^- + P_r A^+) + \frac{v}{\Delta z} |\mu| (1 + P_z) + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g),$$

$$v S_\xi = v S + |\xi| (A^- + P_r A^+) \psi_r^- + \frac{v}{\Delta z} |\mu| (1 + P_z) \psi_z^- + |\eta| \frac{\Delta r}{\Delta g} (1 + P_g) \psi_g^-. \quad (1.11.17)$$

Необходимым и достаточным условием монотонности WDD схемы в r, g, z геометрии по каждой из переменных является выполнение условий, аналогичных (1.6.26), (1.6.27):

$$\begin{aligned} \left(\psi_r^- - \frac{S_r}{\sigma_r}\right)\left(\psi_r^+ - \frac{S_r}{\sigma_r}\right) &\geq 0, & \left(\psi_g^- - \frac{S_g}{\sigma_g}\right)\left(\psi_g^+ - \frac{S_g}{\sigma_g}\right) &\geq 0, \\ \left(\psi_z^- - \frac{S_z}{\sigma_z}\right)\left(\psi_z^+ - \frac{S_z}{\sigma_z}\right) &\geq 0, & \left(\psi_{m-1/2}^- - \frac{S_{\xi}}{\sigma_{\xi}}\right)\left(\psi_{m+1/2}^- - \frac{S_{\xi}}{\sigma_{\xi}}\right) &\geq 0. \end{aligned} \quad (1.11.18)$$

Для WDD схемы имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \left(\psi_r^+ - \frac{S_r}{\sigma_r}\right) &= \frac{|\xi|(A^- + A^+P_r) - P_r\sigma_r\nu}{|\xi|(A^- + A^+P_r) + \sigma_r\nu} \left(\psi_r^- - \frac{S_r}{\sigma_r}\right), & \left(\psi_g^+ - \frac{S_g}{\sigma_g}\right) &= \frac{|\eta|(1 + P_g) - P_g\sigma_g\Delta g}{|\eta|(1 + P_g) + \sigma_g\Delta g} \left(\psi_g^- - \frac{S_g}{\sigma_g}\right), \\ \left(\psi_z^+ - \frac{S_z}{\sigma_z}\right) &= \frac{|\mu|(1 + P_z) - P_z\sigma_z\Delta z}{|\mu|(1 + P_z) + \sigma_z\Delta z} \left(\psi_z^- - \frac{S_z}{\sigma_z}\right), \\ \left(\psi_{m+1/2}^- - \frac{S_{\xi}}{\sigma_{\xi}}\right) &= \frac{C/w(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}P_{\xi}) - P_{\xi}\sigma_{\xi}\nu}{C/w(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}P_{\xi}) + \sigma_{\xi}\nu} \left(\psi_{m-1/2}^- - \frac{S_{\xi}}{\sigma_{\xi}}\right). \end{aligned} \quad (1.11.19)$$

Из уравнений (1.11.18) и (1.11.19) можно сделать вывод, что для алмазной (DD) схемы ($P_r = P_g = P_z = P_{\xi} = 1$) неравенства (1.11.18) не могут быть соблюдены одновременно на любой сетке, а для шаговой (Step) схемы ($P_r = P_g = P_z = P_{\xi} = 0$) всегда соблюдаются. Максимальные (наиболее близкие к 1) значения весов, при которых выполняются условия монотонности WDD схемы (1.11.18), могут быть определены по формулам:

$$\begin{aligned} P_r &= \begin{cases} 1, & |\xi|(A^- + A^+) - \sigma_r\nu \geq 0 \\ |\xi|A^- / (\sigma_r\nu - |\xi|A^+), & |\xi|(A^- + A^+) - \sigma_r\nu < 0 \end{cases}, \\ P_g &= \begin{cases} 1, & 2|\eta| - \sigma_g\Delta g \geq 0 \\ |\eta| / (\sigma_g\Delta g - |\eta|), & 2|\eta| - \sigma_g\Delta g < 0 \end{cases}, & P_z &= \begin{cases} 1, & 2|\mu| - \sigma_z\Delta z \geq 0 \\ |\mu| / (\sigma_z\Delta z - |\mu|), & 2|\mu| - \sigma_z\Delta z < 0 \end{cases}, \\ P_{\xi} &= \begin{cases} 1, & (C/w)(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}) - \sigma_{\xi}\nu \geq 0 \\ (C/w)\alpha_{m-1/2} / [\sigma_{\xi}\nu - (C/w)\alpha_{m+1/2}], & (C/w)(\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}) - \sigma_{\xi}\nu < 0 \end{cases}. \end{aligned} \quad (1.11.20)$$

Следует отметить, что величины $\sigma_r, \sigma_g, \sigma_z, \sigma_{\xi}$ являются убывающими функциями весов: $\sigma_r = \sigma_r(P_g, P_z, P_{\xi})$, $\sigma_g = \dots$. Поэтому, определение весов по формулам (1.11.20) требует, вообще говоря, итерационной процедуры уточнения весов. Однако, как показывает численный эксперимент, нулевая итерация, состоящая в последовательном определении весов по формулам (1.11.20) с уточнением величин $\sigma_r, \sigma_g, \sigma_z, \sigma_{\xi}$ по мере определения весов также обеспечивает приемлемый результат. Полученная схема хоть несколько и отличается от оптимальной моно-

тонной схемы, но обеспечивает монотонность и положительность разностного решения. Формулы расчета весов (1.11.20), будучи использованы для всех экстраполяций во всех разностных ячейках сетки (такую схему мы обозначим как MDS_n full) приводят к существенному понижению точности расчета, характерному для схем первого порядка точности.

Для получения практически монотонной схемы, имеющей порядок точности, близкий ко второму, достаточно использовать монотонные экстраполяции (1.11.20) только по тем переменным и в тех ячейках, в которых имеют место сильные градиенты разностного решения. Привнесение извне такой информации приводит к неоднородным схемам, примером которых является MDS_n схема [18, 19, 10, 4], в которой формулы типа (1.11.20) используются при входе в зону с изменившимися сечениями, при пересечении особых характеристик и т. п.

Нелинейная AWDD схема представляет собой альтернативное решение проблемы, позволяющее практически сохранить 2-ой порядок аппроксимации ценой некоторого ослабления требования строгой монотонности схемы.

К системам (1.11.10)-(1.11.13) может быть применен алгоритм выбора весов P_r , P_ϑ , P_z и P_ξ , аналогичный изложенному выше в разделе 1.7.

Коррекция в AWDD схеме выполняется последовательно по переменным z , ϑ , r и ξ . В начале ячейка рассчитывается с весами $P_r = P_z = P_\xi = 1$, $P_\vartheta = P_\vartheta^{cut} \leq 1$. При использовании условий зеркального отражения или периодических граничных условий по переменной ϑ на границах сектора симметрии $\vartheta \in [\vartheta_0, \vartheta_{end}]$ параметр $P_\vartheta^{cut} = 0.95$. В противном случае $P_\vartheta^{cut} = 1$. Выбор веса $P_\vartheta^{cut} < 1$ связан с необходимостью регуляризации алгоритма решения P_1 системы для ускоряющих поправок KP_1 схемы методом расщепления [14, 17] при наличии условия зеркального отражения или периодического граничного условия на противоположных границах расчетной области. При этом, одновременно, достигается монотонизирующий эффект. Далее, вес P_z рассчитывается по формуле:

$$P_z = \begin{cases} 1, & U_z \leq U_z^0 \\ P(U_z), & U_z > U_z^0 \end{cases}, \quad U_z = b_z |u_z|, \quad u_z = \frac{\psi_z^- - \psi}{\psi}, \quad (1.11.21)$$

где $b_z \geq 1$ - параметр монотонизации по аксиальной переменной z , $P(U)$ - корректирующая функция. В программе КАТРИН реализовано три варианта корректирующей функции, соответствующих уравнениям (1.7.9), (1.7.10) и (1.7.11):

$$P(U) = 1/2U, \quad U_z^0 = 1/2, \quad (1.11.22)$$

$$P(U) = \frac{1/2}{U + 1/16U}, \quad U_z^0 = 1/4, \quad (1.11.23)$$

$$P(U) = \frac{0.5U + \beta}{U^2 + \gamma U + \alpha}, \quad \gamma = 0.5(1 - 4U_0), \quad \beta = 0.5\gamma, \quad \alpha = \beta + U_0^2, \quad U_0 = 1/8. \quad (1.11.24)$$

Для корректирующих функций (1.11.23) и (1.11.24) выполняются оба условия из уравнения (1.7.4). Их использование обеспечивает более мягкую коррекцию разностного решения, чем использование корректирующей функции (1.11.22), для которой выполняется только первое условие из уравнения (1.7.4). При $P_z < 1$ ячейка пересчитывается с весом P_z по переменной z . Далее, по формуле:

$$P_g = \begin{cases} P_g^{cut}, & U_g \leq U_g^0 \\ P(U_g), & U_g > U_g^0 \end{cases}, \quad U_g = b_g |u_g|, \quad u_g = \frac{\psi_g^- - \psi}{\psi}, \quad (1.11.25)$$

где $P(U_g)$ - одна из корректирующих функций (1.7.9), (1.7.10) и (1.7.11):

$$P(U_g) = P_g^{cut} \frac{U_g^0}{U_g}, \quad U_g^0 = \frac{1}{P_g^{cut} (1 + P_g^{cut})}, \quad (1.11.26)$$

$$P(U_g) = P_g^{cut} \frac{2U_g^0}{U_g + (U_g^0)^2/U_g}, \quad U_g^0 = \frac{1}{2P_g^{cut} (1 + P_g^{cut})}, \quad (1.11.27)$$

$$P(U_g) = \frac{4P_g^{cut}U_g^0 + \beta/U_g}{U_g + \gamma + \alpha/U_g}, \quad U_g^0 = \frac{1}{4P_g^{cut} (1 + P_g^{cut})}, \quad \gamma = \frac{1}{P_g^{cut} (1 + P_g^{cut})} - 2U_g^0 = 2U_g^0,$$

$$\beta = \frac{\gamma}{1 + P_g^{cut}} = 8P_g^{cut} (U_g^0)^2, \quad \alpha = \frac{\beta}{P_g^{cut}} + (U_g^0)^2 = 9(U_g^0)^2, \quad (1.11.28)$$

вычисляется вес P_g . В уравнении (1.11.25) $b_g \geq 1$ - параметр монотонизации по азимутальной переменной g . Если $P_g < P_g^{cut}$, то ячейка пересчитывается с выбранными весами P_g и P_z по переменным g и z . Затем по формуле. Затем по формуле

$$P_r = \begin{cases} 1, & U_r \leq U_r^0 \\ P(U_r, \delta_r), & U_r > U_r^0 \end{cases}, \quad \delta_r = \frac{A^+}{A^- + A^+}, \quad U_r = b_r |u_r|, \quad u_r = \frac{\psi_r^- - \psi}{\psi}, \quad (1.11.29)$$

где $b_r \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной r , а $P(U, \delta)$ - корректирующая функция для случая криволинейной геометрии, вычисляется вес P_r . В программе КАТРИН используются следующие три варианта функции $P(U, \delta)$: отвечающих (1.7.9), (1.7.10) и (1.7.11):

$$P(U, \delta) = \frac{1 - \delta}{U}, \quad U_0 = 1 - \delta, \quad (1.11.30)$$

$$P(U, \delta) = \frac{1 - \delta}{U + (U_0)^2/U}, \quad U_0 = \frac{1 - \delta}{2}, \quad (1.11.31)$$

$$P(U, \delta) = \frac{(1 - \delta)U + \beta}{U^2 + \gamma U + \alpha}, \quad \gamma = 1 - \delta - 2U_0, \quad \beta = (1 - \delta)\gamma, \quad \alpha = \beta + U_0^2, \quad U_0 = \frac{1 - \delta}{4}. \quad (1.11.32)$$

При $P_r < 1$ ячейка пересчитывается с весами P_r , P_θ и P_z по переменным r и z . Затем по формуле

$$P_\xi = \begin{cases} 1, & U_\xi \leq U_\xi^0 \\ P(U_\xi, \delta_\xi), & U_\xi > U_\xi^0 \end{cases}, \quad \delta_\xi = \frac{\alpha_{l,m+1/2}}{\alpha_{l,m-1/2} + \alpha_{l,m+1/2}}, \quad U_\xi = b'_\xi |u_\xi|, \quad u_\xi = \frac{\psi_{m-1/2} - \psi}{\psi}, \quad (1.11.33)$$

где $b'_\xi = \max(1, 2b_\xi U_\xi^0)$, а $b_\xi \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной ξ , вычисляется вес P_ξ и т. д. Использование в уравнении (1.11.33) величины b'_ξ вместо b_ξ обеспечивает более равномерную монотонизацию для угловых направлений $\xi > 0$. В программе КАТРИН параметры монотонизации выбраны следующим образом: $b_r = b_\theta = b_z = 1.75$, $b_\xi = 1$ для корректирующих функций (1.11.22) и (1.11.30), $b_r = b_\theta = b_z = 1.75$, $b_\xi = 1$ - для корректирующих функций (1.11.23) и (1.11.31), $b_r = b_\theta = b_z = 1.5$, $b_\xi = 1$ - для корректирующих функций (1.11.24) и (1.11.32).

1.12. Адаптивная WLB-WLD схема для уравнения переноса в двумерных геометриях

Обобщение AWLB-WLD схемы на случай неодномерной, например, x, z геометрии, использует то обстоятельство, что возможна одномеризация WLB-WLD схемы (1.10.4)-(1.10.6), (1.10.12) по каждой из пространственных переменных. Действительно, указанную систему можно переписать, например, по переменной x , в «квазиодномерном виде» (1.2.53), где:

$$a_{11} = |\xi| v_z (1 - P_x) + \sigma_x V, \quad a_{12} = \xi v_z (Q_x + P_x) - \alpha, \quad a_{21} = -\xi v_x v_z (1 + P_x) / 2 + \beta, \\ a_{22} = |\xi| v_x v_z (Q_x + P_x) / 2 + \sigma_x^1 V^x, \quad b_1 = VS_x + (1 - P_x) |\xi| v_z \psi_L, \quad b_2 = V^x S_x^x - \xi v_x v_z (1 + P_x) \psi_L / 2. \quad (1.12.1)$$

Здесь

$$\sigma_x V = \sigma V + |\mu| v_x (1 - P_z) + 0.5 \mu^2 (v_x)^2 v_z (1 + P_z) (P_z + Q_z) D_z^{-1}, \quad \alpha = |\mu| \xi v_x v_z^1 T_x (P_z + Q_z) D_z^{-1}, \\ \sigma_x^1 V^x = \sigma V^x + |\mu| v_x^1 - |\mu| |\xi| v_x^1 v_z^1 T_x T_z D_z^{-1}, \quad \beta = 0.5 \mu^2 S_x v_x v_x^1 v_z (1 + P_z) T_z D_z^{-1}, \\ VS_x = VS + |\mu| v_x (1 - P_z) \psi_B - \mu v_x (P_z + Q_z) D_z^{-1} [V^z S^z + |\xi| v_z^1 \psi_L^z - 0.5 \mu v_x v_z \psi_B], \\ V^x S_x^x = V^x S^x + |\mu| v_x^1 \psi_B^x - \mu S_x v_x^1 T_z D_z^{-1} [V^z S^z + |\xi| v_z^1 \psi_L^z - 0.5 \mu v_x v_z \psi_B], \\ D_z = |\xi| v_z^1 + 0.5 v_x v_z |\mu| (P_z + Q_z) + \sigma V^z. \quad (1.12.2)$$

Экстраполяционное соотношение по переменной x также представим в виде, аналогичном (1.4.6):

$$\psi_R = \psi (1 - Q_x u_{1x} - P_x u_{2x}), \quad (1.12.3)$$

где

$$u_{1x} = -\frac{s_x \psi^x}{\psi} \sim -\frac{\partial \psi / \partial x}{\psi}, \quad u_{2x} = \frac{\psi - \psi_R - s_x \psi^x}{\psi} \sim \frac{\partial^2 \psi / \partial x^2}{\psi}. \quad (1.12.4)$$

Аналогично записывается и экстраполяционное соотношение по переменной z :

$$\psi_T = \psi (1 - Q_z u_{1z} - P_z u_{2z}), \quad (1.12.5)$$

где

$$u_{1z} = -\frac{s_z \psi^z}{\psi} \sim -\frac{\partial \psi / \partial z}{\psi}, \quad u_{2z} = \frac{\psi - \psi_B - s_z \psi^z}{\psi} \sim \frac{\partial^2 \psi / \partial z^2}{\psi}. \quad (1.12.6)$$

Первый этап коррекции – последовательный выбор весов P_x и P_z в рамках WLB схемы – может быть проведен по алгоритму, используемому в плоской геометрии (см. Раздел 1.4), дополненному проверкой положительности экстраполированных значений ψ_R и ψ_T по результатам коррекции. Если это не удается сделать, т. е. оказалось, что в результате оценки по LB схеме один из параметров u_{1x} или u_{1z} по абсолютной величине ≥ 1 , либо не выполняется условие положительности ψ_R или ψ_T после коррекции в рамках WLB схемы (что может иметь место на грубых сетках), происходит переход ко второму этапу коррекции – выбору весов Q_x и Q_z и соответствующих им параметров T_x и T_z в рамках WLD схемы.

При выборе, например, веса Q_x существенно используется тот факт, что зависимость параметра u_{1x} от веса Q_x имеет тот же вид $a/(bQ_x + c)$, что и в плоской геометрии, и, соответственно может быть применен аналогичный алгоритм расчета этого веса, но со следующей модификацией: соотношение (1.4.21) для расчета веса Q на убывающих решениях меняется на следующее:

$$Q_x = \begin{cases} 1 & , \quad 0 < u_{1x}^{LD} \leq u_0^{LD} \\ \max(f^Q(u_{1x}^{LD}), 1/3) & , \quad u_{1x}^{LD} > u_0^{LD} \end{cases}. \quad (1.12.7)$$

Затем по явной формуле (1.10.18) при $Q_x < 1$ или по формуле (1.10.23) при $Q_x > 1$ вычисляется вес T_x . Далее, по аналогичному алгоритму вычисляется вес Q_z и выполняется расчет параметров T_x и T_z на основе интерполяции в заданную точку (Q_x, Q_z) заранее рассчитанных на достаточно частой сетке величин $T_x(Q_x, Q_z)$ и $T_z(Q_x, Q_z)$.

Модификация (1.12.7) связана с тем, что хотя для LD схемы u_{1x}^{LD} и $u_{1z}^{LD} \leq 3$, в процессе выбора весов Q_x и Q_z за счет ненулевых значений T_x и T_z данные параметры могут приобретать значения ≥ 3 .

В 2D r, z геометрии, формулы, определяющие параметры аппроксимирующего элемента WLD схемы, вообще говоря, должны быть несколько изменены. Однако, для большинства пространственных ячеек такое изменение оказывается малосущественным и численный эксперимент показал, что указанная поправка не является обязательной для построения приемлемого алгоритма коррекции. Таким образом, для определения весовых коэффициентов P_t и Q_t , $t = r, z$ в дополнительных уравнения (1.10.52), как для центральных, так и для граничных ячеек, соответствующих граничным угловым направлениям $\varphi = -\pi$, после замены: $x \rightarrow r$ может быть применен вышеописанный алгоритм коррекции для x, z геометрии. Для расчета веса P_ξ в дополнительном уравнении WDD схемы (1.10.53) по угловой переменной φ может быть использована AWDD схема [11], конкретно, ее вариант, описываемый уравнением (1.11.33) с параметром монотонизации $b_\xi = 1$. Весовые коэффициенты P_ξ^r и P_ξ^z в экстраполяционных уравнениях для величин $\psi_{m+1/2}^r$ и $\psi_{m+1/2}^z$ в (1.10.53) выбираются, согласно аппроксимации (1.10.57): $P_\xi^r = P_\xi^z = P_\xi$.

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

В данном разделе мы приведем численные результаты для двумерных x, z и r, z геометрий, демонстрирующие сравнительную точность DD, AWDD (варианты с корректирующими функциями (1.11.22) и (1.11.30) для значений параметров монотонизации $b_x = b_r = b_z = 2$ - AWDD₁ и с корректирующим функциями (1.11.23) и (1.11.31) при $b_x = b_r = b_z = 1.75$ - AWDD₂), LD, LB, AWLB и AWLD схем. В AWLB схеме для расчета весов P_x (или P_r) и P_z WLB схемы использовалась корректирующая формула (1.4.15) с параметром монотонизации $b = 3$. Для расчета весов Q_x (или Q_r) и Q_z для подобласти изменения весов $1/3 \leq Q_t \leq 1$, $t = x, z$ (или $t = r, z$) в AWLB и AWLD схемах использовалась корректирующая формула (1.12.7), (1.4.23) с параметром $u_0^{LD} = 0.85$. Значения весов $Q_t > 1$ в связи с приближенным характером корректирующей формулы (1.4.24) были ограничены интервалом $1 \leq Q_t \leq 4/3$, $t = x, z$ (или $t = r, z$). Соответственно, вместо уравнения (1.4.25) использовалось следующее уравнение:

$$u_1^+ = \begin{cases} u_1^{LD}, & u_1^{LD} > -u_1^{\max} \\ -u_1^{\max}, & u_1^{LD} \leq -u_1^{\max} \end{cases}, \quad u_1^{\max} = 1 + 2\delta_{\max}, \quad \delta_{\max} = \frac{1 + \sqrt{33}}{16} \approx 0.421535165. \quad (13.1)$$

Значения параметров $T_x(Q_x, Q_z)$ и $T_z(Q_x, Q_z)$ были предварительно рассчитаны с равномерным шагом 0.02 по каждой из переменных Q_x и Q_z для подобласти: $1/3 \leq Q_x, Q_z \leq 4/3$. Веса T_x и T_z для пространственной ячейки определялись путем линейной интерполяции на основе вышеуказанной таблицы значений параметров T_x и T_z по результатам определения посредством адаптивного алгоритма коррекции весов Q_x и Q_z для данной ячейки сетки.

В качестве тестовой задачи рассмотрим обобщение одnogрупповой 4-х зонной задачи с изотропным рассеянием в плоской геометрии [47], изображенной на Рис. 1.5.1, на случай 2D x, z геометрии (см. Рис. 1.13.1). Вариант этой же задачи, но для r, z геометрии, получается путем замены на Рис. 1.13.1 $x \rightarrow r$.

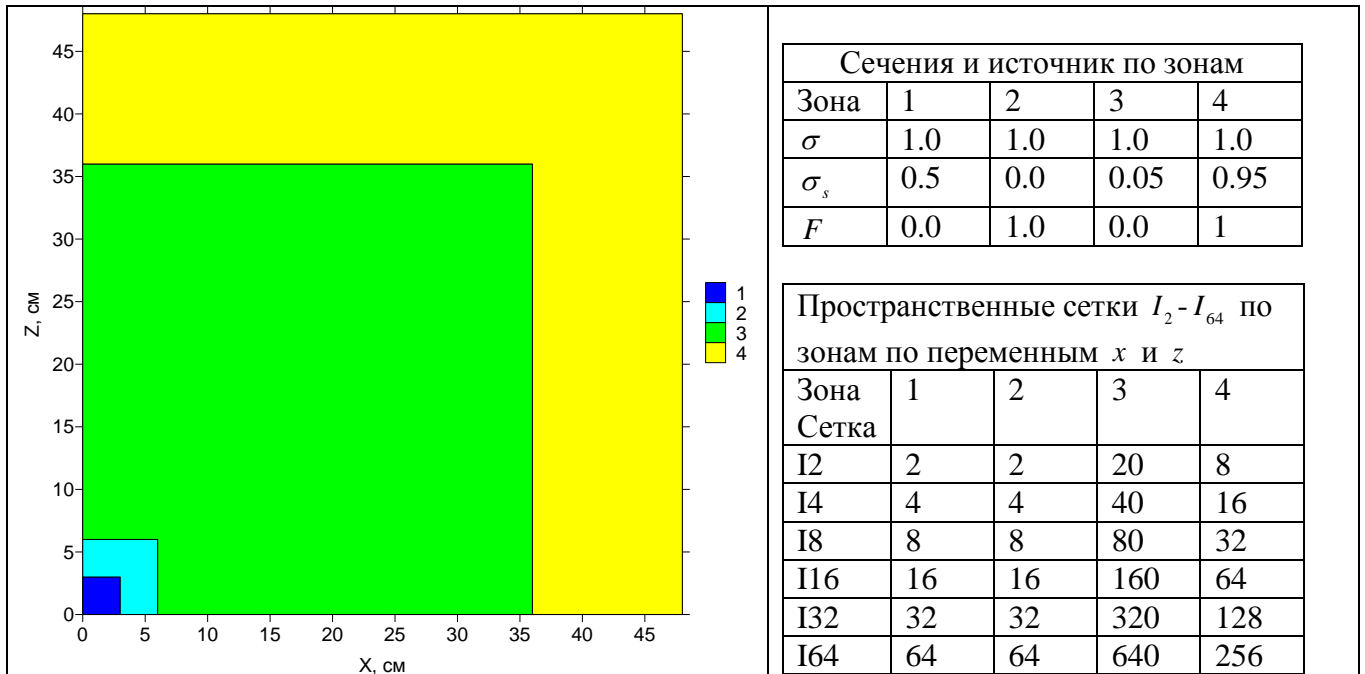


Рисунок 1.13.1. Модельная задача в x, z геометрии, обобщающая тестовую задачу [47] (Рис. 1.5.1) в плоской геометрии. Указаны полное сечение σ , сечение рассеяния σ_s , внутренний изотропный источник F и число шагов мелкой пространственной сетки по зонам по переменным x и z

В качестве точного решения этой задачи в x, z и r, z геометриях использовалось ее решение, полученное с использованием LB схемы 4-ого порядка точности на равномерной пространственной сетке с шагом $\Delta x = \Delta r = \Delta z = 3/64$ (число пространственных интервалов по зонам по каждой из пространственных переменных составило: $64+64+640+256$) и с квадратурой ES_{32} [6]. Точность сходимости итераций составляла 10^{-10} . Для ускорения внутренних итераций

для DD и AWDD схем использовалась согласованная с WDD схемой KP_1 схема ускорения итераций [50], что позволило уменьшить число внутренних итераций в рассматриваемой задаче с примерно 300 до 13.

В Табл. 1.13.1 и 1.13.2 (для x, z геометрии), 1.13.3 и 1.13.4 (для r, z геометрии) показаны относительные ошибки $\delta_{average}$ и δ_{sum} в расчете нулевого пространственного момента скалярного потока $\Phi_{i,k}^{(0)}$ и полного числа частиц $\sum_{i,k} \Phi_{i,k}^{(0)} V_{i,k}$:

$$\delta_{average} = \max_{i,k \in K_j} \frac{\Phi_{i,k}^{(0)} - \Phi_{i,k}^{(0)ex}}{\Phi_{i,k}^{(0)ex}}, \quad \delta_{sum} = \frac{\sum_{i,k} \Phi_{i,k}^{(0)} V_{i,k} - \int_0^R \int_0^Z \Phi^{ex}(r, z) dV}{\int_0^R \int_0^Z \Phi^{ex}(r, z) dV}. \quad (1.13.2)$$

В уравнении (1.13.2) $\Phi^{ex}(r, z)$ - "точное" решение, K_j - пространственная зона, занятая j -ым материалом, $j = 1, \dots, 4$, изображенной на Рис. 1.13.1 пространственной области.

Таблица 1.13.1. Относительная ошибка аппроксимации $\delta_{average}$ (1.13.2) при решении модельной задачи (Рис. 1.13.1) в 2D x, z геометрии с квадратурой ES_{32} , %. В скобках указано количество пространственных ячеек с отрицательным значением скалярного потока

Шаг $\Delta x,$ Δz	Зона	Схема						
		DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
3/2	1				-11.	-9.6	10.	-3.8
	2				-1.5	-1.5	1.4	0.68
	3				-320. (18)	-96.	5.9E+5 (9)	-84.
	4				-3.1	-3.1	-0.42	-0.31
3/4	1	-13.6	8.3	8.3	-1.7	-1.7	1.6	-0.48
	2	-6.9	5.3	4.6	-1.4	-1.4	0.65	-0.33
	3	-9.0E+5 (766)	120.	110.	-29.	-15.	190. (11)	17.
	4	-5.8	-9.3	8.6	-1.6	-1.6	0.37	0.27
3/8	1	-3.8	-2.6	-1.9	0.67	0.67	0.49	-0.14
	2	-5.4	7.6	6.9	-1.1	-1.1	-0.40	-0.23
	3	2.2E+5 (1494)	36.	25.	-6.6	-6.6	13.0	-6.6
	4	-3.7	10.	9.6	-0.95	-0.95	-0.24	-0.19
3/16	1	1.5	0.89	0.76	0.32	0.32	0.14	0.11

	2	-3.7	8.3	7.6	-0.81	-0.82	-0.21	-0.14
	3	1.4E+5 (4844)	24.	19.5	-3.7	-3.9	-3.4	-2.8
	4	-2.3	8.7	8.2	-0.56	-0.56	0.14	-0.16
3/32	1	0.69	0.52	0.43	0.14	0.14	3.8E-2	3.8E-2
	2	-2.1	7.6	7.0	-0.47	-0.47	-0.12	-0.13
	3	-5.8E+4 (15582)	16.6	13.0	-2.9	-2.9	-1.2	1.6
	4	-1.1	6.7	6.2	-0.26	-0.26	-9.5E-2	-0.11

Таблица 1.13.2. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи (Рис. 1.13.1) в 2D x, z геометрии с квадратурой ES_{32} , %

Шаг $\Delta x, \Delta z$	Схема						
	DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
3/2				-2.2E-1	-2.2E-1	-1.0E-2	-2.5E-2
3/4	-2.1E-2	-1.4	-1.4	-4.1E-2	-4.1E-2	-1.9E-3	-3.7E-3
3/8	-5.3E-3	-0.47	-0.46	-7.3E-3	-7.3E-3	-3.0E-4	-5.2E-4
3/16	-1.3E-3	-0.14	-0.14	-1.3E-3	-1.3E-3	-6.3E-5	-5.5E-5
3/32	-3.2E-4	-4.0E-2	-4.0E-2	-2.0E-4	-2.0E-4	-5.1E-6	-4.5E-6

Таблица 1.13.3. Относительная ошибка аппроксимации $\delta_{average}$ (1.13.2) при решении модельной задачи (Рис. 1.13.1) в 2D r, z геометрии с квадратурой ES_{32} , %. В скобках указано количество пространственных ячеек с отрицательным значением скалярного потока

Шаг $\Delta r, \Delta z$	Зона	Схема						
		DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
3/2					-8.4	-8.4	9.5	3.0
					-1.5	-1.5	1.3	0.58
					-2.7E+2 (15)	-91.	8.6E+5 (3)	-81.
					-3.1	-3.1	0.44	-0.33
3/4	1	-11.	4.9	3.6	-1.6	-1.6	1.6	0.93
	2	-6.5	5.1	4.0	-1.4	-1.4	-0.62	0.4

	3	-2.4E+6 (761)	1.4E+2	78.	-26.	-15.	6.2E+2 (21)	17.
	4	-5.7	-9.3	-8.2	-1.6	-1.6	0.37	0.27
3/8	1	-3.5	-3.6	-3.6	0.63	0.63	0.45	0.31
	2	-5.2	7.6	6.3	-1.2	-1.2	-0.40	-0.24
	3	1.9E+5 (1503)	31.	23.	-6.6	-6.8	-29.	-6.8
	4	-3.7	10.	8.8	-0.96	-0.96	0.24	0.19
3/16	1	1.5	-1.5	-1.5	0.32	0.32	0.15	0.13
	2	-3.7	8.2	6.9	-0.87	-0.87	-0.23	-0.15
	3	-9.6E+4 (4790)	21.	15.	-3.8	-4.1	-23.	-3.2
	4	-2.3	8.7	7.5	-0.59	-0.59	0.14	-0.16
3/32	1	1.1	0.79	-0.78	0.14	0.15	-4.9E-2	-6.9E-2
	2	-2.2	7.3	6.2	-0.47	-0.54	0.11	-0.11
	3	-5.1E+4 (14957)	15.	11.	-2.9	-3.0	3.6	1.8
	4	-1.1	6.5	5.7	-0.26	-0.28	-9.0E-2	-0.11

Таблица 1.13.4. Относительная ошибка аппроксимации δ_{sum} при решении модельной задачи (Рис. 1.13.1) в 2D r, z геометрии с квадратурой ES_{32} , %

Шаг $\Delta r,$ Δz	Схема						
	DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LD	AWLD	LB	AWLB
3/2				-2.2E-1	-2.2E-1	-1.3E-2	-2.8E-2
3/4	-1.9E-2	-1.4	-1.3	4.3E-2	-4.2E-2	-2.5E-3	-4.9E-3
3/8	-4.9E-3	-0.48	-0.43	-8.5E-3	-8.0E-3	-3.8E-4	-7.4E-4
3/16	-1.2E-3	-0.14	-0.13	-1.8E-3	-1.5E-3	-5.2E-5	-8.0E-5
3/32	-3.0E-4	-4.1E-2	-3.7E-2	-2.0E-4	-7.9E-5	-6.3E-6	2.3E-4

Из Табл. 1.13.1-1.13.4 можно сделать следующие выводы. Использование DD схемы для решения гетерогенной задачи, параметры которой представлены на Рис. 1.13.1, в x, z и r, z геометриях для каждой из использованных пространственных сеток приводит к появлению отрицательных скалярных потоков. Кроме того, оказалось, что на частых пространственных сетках поточечный критерий сходимости итераций 10^{-10} для DD схемы не может быть выполнен и был использован критерий 2×10^{-8} . Для LD или LB схем уменьшение шага пространственной

сетки приводит к исчезновению отрицательных потоков. При этом не наблюдается проблем со сходимостью итерационного процесса. При использовании же редких пространственных сеток LD и, в особенности, LB схема нуждаются в коррекции отрицательных потоков.

Использование адаптивного алгоритма коррекции в x, z и r, z геометриях, также как и в 1D геометриях, позволяет до определенной степени предотвратить грубые ошибки аппроксимации на редких пространственных сетках с одновременным поддержанием приемлемого уровня ошибок в интегральной норме δ_{sum} . Из представленных в таблицах результатов можно также сделать вывод, что использование AWLB и AWLD схем обеспечивает значительный вычислительный выигрыш в точности решения задачи по сравнению с AWDD схемой.

Если подобласть изменения весов Q_x и Q_z уменьшить до: $1/3 \leq Q_x, Q_z \leq 1$ (исключив тем самым коррекцию на возрастающих вдоль направления скорости частиц решениях), то на грубой сетке I_2 при использовании AWLB и AWLD имеет место некоторая деградация в точности скалярных потоков, а также не удается полностью избавиться от отрицательных потоков. В противоположном случае, при расширении области изменения весов Q_x и Q_z до:

$1/3 \leq Q_x, Q_z \leq 5/3$, точность AWLD схемы для сетки I_2 несколько улучшается, однако при этом наблюдается эффект неустойчивости AWLB схемы на сетках I_{32} и I_{64} , а также AWLD схемы на сетке I_{64} . Представляется, что это является результатом условной устойчивости WLD схемы при $Q_x, Q_z > 4/3$ и необоснованного использования больших значений весов Q_x и Q_z на частых пространственных сетках в реализованном алгоритме коррекции. В целом, этот вопрос нуждается в дальнейшем исследовании.

Приведем далее результаты (см. Рис. 1.13.3), показывающие скорость сходимости k_{eff} в зависимости от выбора пространственной сетки и разностной схемы при фиксированной квадратуре ES_8 для 2-х зонной задачи из [42] в r, z геометрии, изображенной на Рис. 1.13.2 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} .

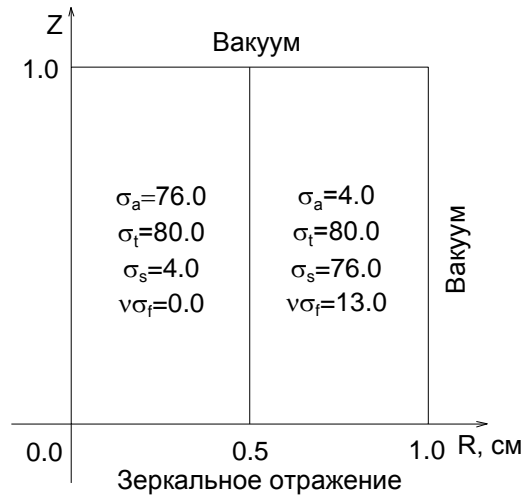


Рисунок 1.13.2. Модельная задача в r, z геометрии [42]. Указаны сечение поглощения σ_a , полное сечение σ_t , сечение рассеяния σ_s , $\nu\sigma_f$ по зонам

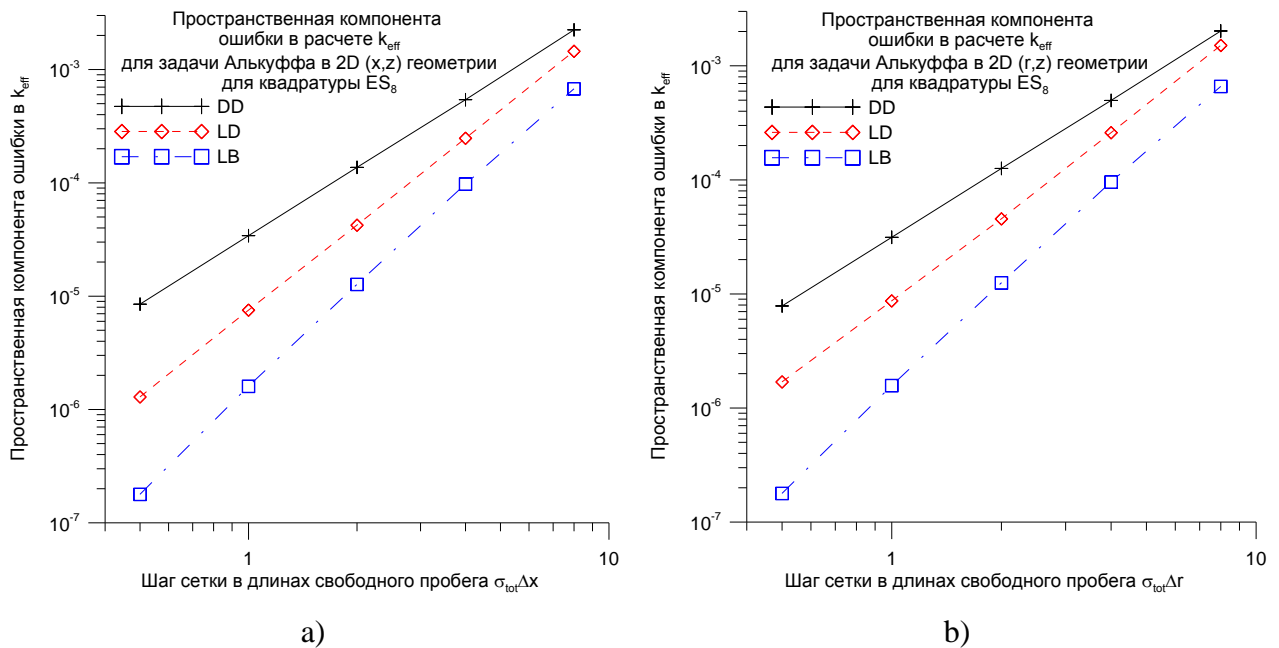


Рисунок 1.13.3. Пространственная компонента ошибки в расчете k_{eff} при расчете модельной задачи (см. Рис. 1.13.2) [42] в x, z и r, z геометриях с фиксированной квадратурой ES_8

Как следует из приведенных результатов, в 2D x, z и r, z геометриях, как и в случае плоской геометрии, введение коррекции позволяет, до определенной степени, убрать грубые ошибки аппроксимации на редких сетках при сохранении, в целом, достаточно высокой точно-

сти расчета интегральных величин. Использование AWLB схемы обеспечивает значительный выигрыш в точности расчета по сравнению с AWDD схемой и в этих геометриях.

Глава 2. Согласованная KP_1 схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в 1D геометриях

Введение

Алгоритм ускорения итераций по интегралу рассеяния является существенным элементом численной методики решения уравнения переноса, основанной на использовании метода дискретных ординат. Алгоритм ускорения позволяет существенно (в 2-10 раз, в зависимости от задачи) уменьшить расчетное время. Особенно значимый эффект дает использование ускорения в задачах с преобладающей ролью рассеяния, к которым можно отнести большую часть задач переноса в физике реакторов.

Существует достаточно много подходов к проблеме ускорения итераций. Линейные методы ускорения, как правило, основаны на использовании в той или иной форме итерационного метода Шмидта [62]. Одна из первых линейных схем ускорения такого рода - метод оценки итерационных отклонений - была предложена в работе [63]. Обзор методов ускорения итераций для уравнения переноса (предложенных до 2002 г) содержится в [64].

Среди наиболее популярных линейных методов ускорения отметим KP_1 метод [65, 66, 67, 3, 48, 50, 17] (или diffusion synthetic acceleration (DSA) метод [68, 69, 70, 71], или P_1 synthetic acceleration (P_1SA) метод [72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 14]) и S_2 synthetic acceleration (S_2SA) метод [79, 80, 82], а среди нелинейных - метод квазидиффузии [83, 84] (или P_1 rebalance acceleration (P_1RA) метод) и метод средних потоков (или S_2RA метод) [85, 10, 86, 11, 84]. Указанные методы отличаются выбором ускоряющих поправок. Так, метод квазидиффузии и KP_1 метод используют, соответственно, мультипликативные и линейные поправки к нулевому и первым угловым моментам решения; метод средних потоков и S_2SA методы - соответственно, мультипликативные и линейные поправки к угловым потокам по октантам единичной сферы угловых направлений. По числу используемых переменных (степеней свободы) и, соответственно, по эффективности эти методы ускорения можно отнести к одному классу. Однако, как можно предположить, используемый вид поправок в задачах с существенной анизотропией рассеяния дает некоторое преимущество методу квазидиффузии и KP_1 методу, а в существенно гетерогенных задачах - S_2RA и S_2SA методам.

Как показывают теоретические оценки и вычислительный эксперимент, существенным условием для получения устойчивого алгоритма ускорения является согласование разностной аппроксимации системы уравнений для ускоряющих поправок с исходной разностной схемой для уравнения переноса [87, 69, 88, 71]. В противном случае эффективность алгоритма ускоре-

ния сильно зависит от выбора разностной сетки, а на грубых сетках алгоритм ускорения становится неустойчивым.

При решении уравнения переноса с существенной гетерогенностью расчетной области в 2D и 3D геометриях оказалась, что для предотвращения деградации алгоритма ускорения требование согласованности схемы ускорения должно быть дополнено требованием монотонности (или наличием некоторого достаточного уровня монотонности) используемой разностной схемы [14, 90] (более подробно этот вопрос рассматривается ниже в Главах 3 и 4 данной работы).

В работах [10, 4] на примере стационарного уравнения переноса в 1D геометриях и метода средних потоков нами был сформулирован общий подход к построению схем ускорения, согласованных с WDD схемой в задачах с анизотропией рассеяния, который в дальнейшем был успешно применен при реализации метода средних потоков в нестационарной задаче [86, 11] и KP_1 схемы в задачах переноса нейтрального и заряженного излучения [74, 75].

Если анизотропия рассеяния задана в P_L приближении и используемая квадратура достаточно точна, предлагаемый подход к построению согласованной схемы ускорения в случае KP_1 схемы совпадает с 4-step процедурой Ларсена [88, 71].

В рамках предложенного подхода к построению согласованных схем ускорения оказалось, что при использовании P_L аппроксимации индикатрисы рассеяния расчетные формулы для согласованной KP_1 схемы и метода квазидиффузии существенно проще, особенно для одномерных геометрий и нодальных схем, и требуют меньше памяти при реализации, чем для метода средних потоков и S_2SA схемы. В связи с этим, а также в связи с тем, что для KP_1 схемы, в силу ее линейности, во многих случаях удастся провести анализ устойчивости и получить оценки для спектрального радиуса, вместо изначально реализованной в программе РОЗ-6.3 [10] согласованной схемы метода средних потоков мы перешли на использование в этой и последующих 2D и 3D S_n программах КАСКАД-С и КАТРИН согласованной KP_1 схемы [50, 17].

2.1. Итерационная схема KP_1 метода

Основная идея синтетического или КР метода ускорения итераций может быть сформулирована следующим образом. Рассмотрим уравнение вида:

$$(\hat{A} - \hat{B})\psi = F \quad (2.1.1)$$

где \hat{A} и \hat{B} - линейные операторы, ψ - неизвестная функция, а F - источник. Предположим, что оператор \hat{A} легко обратим, а использование прямого метода для обращения оператора

$\hat{A} - \hat{B}$ является трудоемкой задачей. В этом случае для решения уравнения (2.1.1) можно воспользоваться следующим итерационным процессом:

$$\psi^{n+1} = \hat{M}\psi^n + \hat{A}^{-1}F, \quad \hat{M} = \hat{A}^{-1}\hat{B}, \quad (2.1.2)$$

где n - номер итерации. При этом предполагается, что спектральный радиус оператора \hat{M} в уравнении (2.1.2) меньше 1. Если этот радиус близок к 1, то итерационный процесс (2.1.2) сходится медленно. Для его ускорения поступим следующим образом. Исключим из уравнений (2.1.1) и (2.1.2) источник F . Получим, что:

$$\psi = \psi^{n+1} + (\hat{A} - \hat{B})^{-1}\hat{B}(\psi^{n+1} - \psi^n). \quad (2.1.3)$$

Предположим далее, что существует легко обратимый оператор \hat{P} , аппроксимирующий оператор $\hat{A} - \hat{B}$. Заменяем итерационный процесс (2.1.2) на следующий двухшаговый алгоритм [65, 70, 3]:

$$\psi^{n+1/2} = \hat{M}\psi^n + \hat{A}^{-1}F, \quad \psi^{n+1} = \psi^{n+1/2} + \hat{P}^{-1}\hat{B}(\psi^{n+1/2} - \psi^n). \quad (2.1.4)$$

Исключая из (2.1.4) величину $\psi^{n+1/2}$, получим [70], что

$$\psi^{n+1} = [\hat{I} - \hat{P}^{-1}(\hat{A} - \hat{B})]\hat{M}\psi^n + (\hat{I} + \hat{P}^{-1}\hat{B})\hat{A}^{-1}F, \quad (2.1.5)$$

где \hat{I} - единичный оператор. Из уравнения (2.1.5) следует, что при $\hat{P}^{-1}(\hat{A} - \hat{B}) \rightarrow \hat{I}$ спектральный радиус итерационного процесса (2.1.4) стремится к нулю.

Следует отметить, что итерационная схема (2.1.4), с точностью до обозначений, является методом Шмидта [62], примененным к итерационному решению уравнения (2.1.1). Термин синтетическая схема ускорения был введен в работе [68], однако использованный в этой работе итерационный алгоритм несколько отличается от принятого в настоящее время вида этого алгоритма, задаваемого уравнением (2.1.4).

В случае односкоростного уравнения переноса

$$\hat{A} = \hat{L} \equiv (\vec{\Omega}\vec{\nabla}) + \sigma(\vec{r}), \quad \hat{B} = \hat{S} \equiv \int_{\vec{\Omega}} d\vec{\Omega}' \sigma_s(\vec{r}, (\vec{\Omega}'\vec{\Omega})), \quad (2.1.6)$$

$\psi = \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ - пространственно-угловое распределение потока излучения. В уравнении (2.1.6) $\sigma(\vec{r})$ и $\sigma_s(\vec{r}, (\vec{\Omega}'\vec{\Omega}))$ - полное сечение и сечение рассеяния. Итерации по интегралу рассеяния в этом случае принято называть внутренними (в отличие от внешних итераций по компоненте интеграла рассеяния, связанной с переходами вверх по группам в многогрупповой задаче).

Далее в данной и последующих двух главах нами будет построена KP_1 схемы для уравнения переноса в 1D, 2D и 3D геометриях, когда в качестве оператора \hat{P} в КР схеме используется P_1 оператор.

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

Вывод расчетных формул KP_1 схемы, согласованной с WDD схемой, для случая 1D геометрий мы проведем на примере уравнения переноса в 1D сферической геометрии (1.6.1). Следуя [73], перепишем уравнение баланса для центральных ячеек (1.6.3), дополнительные уравнения WDD схемы (1.6.6) на $n+1$ -ой внутренней итерации в виде, более удобном для последующего изложения:

$$\begin{aligned} \mu_m (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2}) + \frac{C_i}{w_m} (\alpha_{m+1/2} \psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2}) + \sigma V_i \psi_{i,m}^{n+1/2} = \\ = V_i \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} P_l(\mu_m) \Phi_{i,l}^n + V_i F_{i,m}, \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

$$\psi_{i,m}^{n+1/2} = a_{i,m}^{n+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} + (1 - a_{i,m}^{n+1/2}) \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2}, \quad a = \begin{cases} 1/(1+P_r), & \mu > 0 \\ P_r/(1+P_r), & \mu < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (2.2.2)$$

$$\psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} = (1 + P_\mu) \psi_{i,m}^{n+1/2} - P_\mu \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} c_{m'}^{(m)} \psi_{i,m'}^{n+1/2}, \quad 0 \leq P_\mu \leq 1, \quad (2.2.3)$$

К системе уравнений (2.2.1)-(2.2.3) следует также добавить граничные условия при

$$r = r_{1/2} = r_{int} \geq 0 \quad \text{и} \quad r = r_{I+1/2} = r_{out} :$$

$$\begin{aligned} \psi_{1/2,m}^{n+1/2} = F_m^{int} + \sum_{\mu_{m'} < 0} w_{m'} R_{m,m'}^{int} \psi_{1/2,m'}^{n+1/2}, \quad \mu_m > 0, \\ \psi_{I+1/2,m}^{n+1/2} = F_m^{out} + \sum_{\mu_{m'} > 0} w_{m'} R_{m,m'}^{out} \psi_{I+1/2,m'}^n, \quad \mu_m < 0, \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

где коэффициенты R^{int} и R^{out} задают, соответственно, закон отражения, а F^{int} и F^{out} - поверхностный источник на внутренней ($r = r_{int}$) и внешней ($r = r_{out}$) границах области. Здесь, как обычно [3], индекс $n+1/2$ обозначает результат решения кинетического уравнения с правой частью и отраженной компонентой потока на правой границе области, полученными на предыдущей n -ой итерации. Для итераций без ускорения $\psi^{n+1} = \psi^{n+1/2}$.

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

$$\psi_{i,m}^{n+1} = \psi_{i,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_i^0 + 3\mu_m f_i^1), \quad \psi_{i\pm 1/2,m}^{n+1} = \psi_{i\pm 1/2,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i\pm 1/2}^0 + 3\mu_m f_{i\pm 1/2}^1). \quad (2.2.5)$$

Для получения системы уравнений для определения ускоряющих поправок f^0 и f^1 воспользуемся следующей процедурой, близкой к "4-step" процедуре Ларсена [71] (см. также

[74, 75]). Прежде всего, подействуем на уравнение баланса (2.2.1) операторами проектирования \hat{L}_0 и \hat{L}_1 :

$$\hat{L}_l \psi = 2\pi \sum_m w_m P_l(\mu_m) \psi_{i,m}, \quad l = 0, 1. \quad (2.2.6)$$

В предположении, что используемая квадратура достаточно точно интегрирует на интервале $[-1, 1]$ полиномы по μ вплоть до порядка $\max(3, L+1)$, где L - порядок P_L -приближения индикатрисы рассеяния, получим:

$$\begin{aligned} A_{i+1/2} f_{i+1/2}^1 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^1 + \sigma^{00} V_i f_i^0 &= V_i Q_i^0, \\ \frac{1}{3} (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^0) + M_0 C_i f_i^0 + (\sigma^{11} V_i + M_1 C_i) f_i^1 &= V_i Q_i^1, \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

где

$$Q_i^l = \sigma_{s,l} (\Phi_i^{l,n+1/2} - \Phi_i^{l,n}), \quad l = 0, 1, \quad \sigma^{00} = \sigma - \sigma_{s,0}, \quad \sigma^{11} = \sigma - \sigma_{s,1}, \quad (2.2.8)$$

$$M_0 = \frac{1}{2} \sum_m \mu_m (\alpha_{m+1/2} \pi_{m+1/2}^0 - \alpha_{m-1/2} \pi_{m-1/2}^0) = -\frac{1}{3}, \quad \pi_{m+1/2}^0 = \sum_{m' \leq m} c_{m'}^{(m)}, \quad (2.2.9)$$

$$M_1 = \frac{3}{2} \sum_m \mu_m (\alpha_{m+1/2} \pi_{m+1/2}^1 - \alpha_{m-1/2} \pi_{m-1/2}^1), \quad \pi_{m+1/2}^1 = \sum_{m' \leq m} c_{m'}^{(m)} \mu_{m'}. \quad (2.2.10)$$

В уравнении (2.2.8) Φ_i^l - угловые моменты решения (1.2.3), $l = 0, 1$; величины $\pi_{m+1/2}^0$ и $\pi_{m+1/2}^1$ в (2.2.10) могут быть вычислены с помощью следующих рекуррентных соотношений:

$$\pi_{m+1/2}^0 = (1 + P_m^\mu) - P_m^\mu \pi_{m-1/2}^0, \quad \pi_{1/2}^0 = 1, \quad (2.2.11)$$

$$\pi_{m+1/2}^1 = (1 + P_m^\mu) \mu_m - P_m^\mu \pi_{m-1/2}^1, \quad \pi_{1/2}^1 = \mu_{1/2}. \quad (2.2.12)$$

Из рекуррентного соотношения (2.2.11) следует, что $\pi_{m\pm 1/2}^0 = 1$ и, соответственно, $M_0 = -1/3$.

В систему из двух уравнений (2.2.7) входит четыре неизвестных величины: f_i^0 , f_i^1 , $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$. Для замыкания системы (2.2.7) к ней необходимо добавить два дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные соотношения можно получить из естественного требования инвариантности системы (2.2.7) при замене в уравнении баланса (2.2.1) [4, 72, 11, 74, 75]:

$$\psi \rightarrow a\psi_{i+1/2} + (1-a)\psi_{i-1/2}. \quad (2.2.13)$$

Аналогичное условие было успешно использовано также при построении S_2RA схемы (метода средних потоков), согласованной с WDD схемой [10, 86, 11]. В сущности, таким образом используется имеющаяся степень свободы в выборе проекционного оператора для дополнительного WDD уравнения по пространственной переменной [72]. Однако, если используемая квадратура достаточно точна, то полученные таким образом соотношения совпадают с теми, кото-

рые получаются применением операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_1 к уравнению (2.2.2) (как это рекомендуется в "4-step" процедуре [71, 64]):

$$\begin{aligned} f_i^0 &= A_i^0 f_{i+1/2}^0 + (1 - A_i^0) f_{i-1/2}^0 + A_i^1 (f_{i+1/2}^1 - f_{i-1/2}^1), \\ f_i^1 &= A_i^2 f_{i+1/2}^1 + (1 - A_i^2) f_{i-1/2}^1 + A_i^1 (f_{i+1/2}^0 - f_{i-1/2}^0) / 3, \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

где

$$A_i^0 = \frac{1}{2} \sum_m w_m a_{i,m}, \quad A_i^1 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m a_{i,m}, \quad A_i^2 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m^2 a_{i,m}. \quad (2.2.15)$$

Для получения граничных условий для P_1 системы воспользуемся следующей процедурой [72, 73, 74, 75]. Домножим уравнения (2.2.4), определяющие закон отражения при $r = r_{int}$ и $r = r_{out}$, на $w_m \mu_m$ и просуммируем их по направлениям $\mu_m > 0$ и $\mu_m < 0$, соответственно. С учетом вида поправок (2.2.5), получим:

$$l_0 f_{1/2}^0 + 3l_1 f_{1/2}^1 = 0, \quad m_0 f_{I+1/2}^0 + 3m_1 f_{I+1/2}^1 = \lambda, \quad (2.2.16)$$

где

$$\begin{aligned} l_p &= \sum_{\mu_m > 0} w_m \mu_m \left(\mu_m^p - \sum_{\mu_{m'} < 0} w_{m'} \mu_{m'}^p R_{m,m'}^{int} \right), \quad m_p = \sum_{\mu_m < 0} w_m \mu_m \left(\mu_m^p - \sum_{\mu_{m'} > 0} w_{m'} \mu_{m'}^p R_{m,m'}^{out} \right), \quad p = 0, 1, \\ \lambda &= 4\pi \sum_{\mu_m < 0} w_m \mu_m \sum_{\mu_{m'} > 0} w_{m'} R_{m,m'}^{out} (\psi_{I+1/2,m'}^{n+1/2} - \psi_{I+1/2,m'}^n). \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

Исключая из двух уравнений системы (2.2.7) посредством дополнительных уравнений (2.2.14) величины f_i^0 и f_i^1 получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$:

$$f_{i+1/2}^0 a_i^\alpha + f_{i-1/2}^0 b_i^\alpha + f_{i+1/2}^1 c_i^\alpha + f_{i-1/2}^1 d_i^\alpha = q_i^\alpha, \quad \alpha = 0, 1, \quad (2.2.18)$$

где

$$\begin{aligned} a^0 &= \sigma^{00} V A_0, \quad b^0 = \sigma^{00} V (1 - A_0), \quad c^0 = A_{i+1/2} + \sigma^{00} V A_1, \quad d^0 = -A_{i-1/2} - \sigma^{00} V A_1, \quad q^0 = V Q^0, \\ a^1 &= (A_{i+1/2} - C A_0 + \Sigma^{1,1} A_1) / 3, \quad b^1 = -(A_{i-1/2} + C(1 - A_0) + \Sigma^{1,1} A_1) / 3, \quad c^1 = -C A_1 / 3 + \Sigma^{1,1} A_2, \\ d^1 &= C A_1 / 3 + \Sigma^{1,1} (1 - A_2), \quad \Sigma^{1,1} = \sigma^{11} V + C M_1, \quad q^1 = V Q^1. \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

Двухточечная система (2.2.18) аналогична системе для мультипликативных поправок, которая возникает при использовании метода средних потоков, согласованного с WDD схемой [10, 4, 86, 11], и может быть решена методом прогонки [91, 72, 73]:

$$f_{i+1/2}^0 = \xi_i^0 f_{i-1/2}^0 + \eta_i^0, \quad f_{i-1/2}^1 = \xi_i^1 f_{i-1/2}^0 + \eta_i^1, \quad (2.2.20)$$

где коэффициенты $\vec{\xi}_i = \text{col}\{\xi_i^0, \xi_i^1\}$ и $\vec{\eta}_i = \text{col}\{\eta_i^0, \eta_i^1\}$ вычисляются посредством следующих рекуррентных соотношений:

$$\vec{\xi}_i = -W_i^{-1}\vec{B}_i, \quad \vec{\eta}_i = W_i^{-1}\vec{Q}_i, \quad (2.2.21)$$

$$W_i = \begin{pmatrix} a_i^0 + c_i^0 \xi_{i+1}^1 & d_i^0 \\ a_i^1 + c_i^1 \xi_{i+1}^1 & d_i^1 \end{pmatrix}, \quad \vec{B}_i = \begin{pmatrix} b_i^0 \\ b_i^1 \end{pmatrix}, \quad \vec{Q}_i = \begin{pmatrix} q_i^0 - c_i^0 \eta_{i+1}^1 \\ q_i^1 - c_i^1 \eta_{i+1}^1 \end{pmatrix}.$$

К рекуррентным соотношениям (2.2.20) и (2.2.21) следует также добавить граничные условия на внешней $r = r_{out}$ и внутренней $r = r_{int}$ границах области:

$$f_{l+1/2}^1 = \xi_{l+1}^1 f_{l+1/2}^0 + \eta_{l+1}^1, \quad \xi_{l+1}^1 = -\frac{m_0}{3m_1}, \quad \eta_{l+1}^1 = \frac{\lambda}{3m_1}, \quad f_{l/2}^0 = -\frac{l_1 \eta_1^1}{l_1 \xi_1^1 + l_0 / 3}. \quad (2.2.22)$$

Достаточным условием устойчивости этого алгоритма прогонки является выполнение неравенства $|\xi_i^0| \leq 1$. После нахождения величин поправок для потоков на гранях ячейки $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$, поправки f_i^0 и f_i^1 для средних значений потока вычисляются по явным формулам (2.2.14). После этого по формулам (2.2.5) вычисляются решение на $n+1$ -ой итерации, включая альбедо на внешней границе области.

Следует отметить, что изложенный алгоритм решения P_1 системы для поправок, впервые предложенный в [4] и затем реализованный в [72, 73, 74, 75], выгодно отличается от использованного в работах Ларсена [88, 71] тем, что не налагает каких-либо дополнительных условий на веса WDD схемы.

В заключение параграфа, укажем, как трансформируются приведенные соотношения для KP_1 схемы, согласованной с WDD схемой, в плоской и цилиндрической геометриях.

В *плоской геометрии* в уравнении (2.2.1) и последующих соотношениях (2.2.7) и (2.2.19) следует положить:

$$A_{i\pm 1/2} = 1, \quad C_i = 0, \quad V_i = \Delta x_i. \quad (2.2.23)$$

В *1D цилиндрической геометрии* в уравнениях (2.2.1)-(2.2.19) следует заменить:

$\mu_m \rightarrow \xi_{l,m}$, $\alpha_{m\pm 1/2} \rightarrow \alpha_{l,m\pm 1/2}$, $w_m \rightarrow w_{l,m}$, а также воспользоваться подстановкой (1.6.44):

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad V_i = (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2) / 2, \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}$$

и заменить операторы проектирования (2.2.6) на следующие:

$$\hat{L}_0 \psi = 4 \sum_{l,m} w_{l,m} \psi_{l,m}, \quad \hat{L}_1 \psi = 4 \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} \psi_{l,m}, \quad (2.2.24)$$

где интегрирование производится в пределах 2-х октантов единичной сферы угловых направлений: $\varphi \in [0, \pi]$, $\theta \in [0, \pi/2]$, что, соответственно, приводит к появлению дополнительного коэффициента $2/\pi$ в соотношениях для M_1 , A_0 , A_1 и A_2 .

2.3. КР1 схема ускорения для закона рассеяния, определяемого матрицей рассеяния

В данном параграфе на примере 1D сферической геометрии мы построим согласованную КР₁ схему ускорения для случая закона рассеяния, заданного посредством матрицы рассеяния:

$$\sigma_{i;m,m'}^s = \int_0^{2\pi} \sigma_s \left(\mu_{m'} \mu_m + \sqrt{(1-\mu_{m'}^2)(1-\mu_m^2)} \cos \varphi \right) d\varphi, \quad (2.3.1)$$

где $\sigma_s(\mu_s)$ - индикатриса рассеяния. Такой случай представляет интерес при поточечном задании индикатрисы рассеяния, а также при решении уравнения переноса для электронов с трехдиагональной Фоккер-Планковской матрицей рассеяния. Действуя на уравнение баланса для центральных ячеек

$$\begin{aligned} \mu_m (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2}) + \frac{C_i}{w_m} (\alpha_{m+1/2} \psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2}) + \sigma V_i \psi_{i,m}^{n+1/2} = \\ = V_i \sum_{m'} w_{m'} \sigma_{i;m,m'}^s \psi_{i,m'}^n + V_i F_{i,m}, \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

операторами проектирования (2.2.6), получим:

$$\begin{aligned} A_{i+1/2} f_{i+1/2}^1 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^1 + \sigma^{00} V_i f_i^0 + \sigma^{01} V_i f_i^1 = V_i Q_i^0, \\ \frac{1}{3} (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^0) + (\sigma^{10} V_i + M_0 C_i) f_i^0 + (\sigma^{11} V_i + M_1 C_i) f_i^1 = V_i Q_i^1, \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma^{00} = \sigma - \tilde{\sigma}_{s,0}, \quad \tilde{\sigma}_{s,0} \equiv \frac{1}{2} \sum_{m'} I_{m'}^0, \quad \sigma^{01} = -\frac{3}{2} \sum_{m'} \mu_{m'} I_{m'}^0 = 3\sigma^{10}, \quad \sigma^{10} = -\frac{1}{2} \sum_{m'} I_{m'}^1, \quad \sigma^{11} = \sigma - \tilde{\sigma}_{s,1}, \\ \tilde{\sigma}_{s,1} \equiv \frac{3}{2} \sum_{m'} \mu_{m'} I_{m'}^1, \quad Q_i^l = 2\pi \sum_{m'} I_{m'}^l (\psi_{i,m'}^{n+1/2} - \psi_{i,m'}^n), \quad I_{m'}^l \equiv \sum_m w_m P_l(\mu_m) w_{m'} \sigma_{i;m,m'}^s, \quad l=1,2, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

а величины M_0 и M_1 определяются соотношениями (2.2.9) и (2.2.10), соответственно. Для замыкания системы (2.3.3) к ней необходимо добавить два дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные соотношения можно получить из естественного требования инвариантности системы (2.3.3) при замене (2.2.13) в уравнении баланса (2.3.2). Без учета членов, пропорциональных C , это дает [74]:

$$\begin{aligned} f_i^0 = A_i^0 f_{i+1/2}^0 + (1 - A_i^0) f_{i-1/2}^0 + A_i^1 (f_{i+1/2}^1 - f_{i-1/2}^1), \\ f_i^1 = A_i^2 f_{i+1/2}^1 + (1 - A_i^2) f_{i-1/2}^1 + A_i^3 (f_{i+1/2}^0 - f_{i-1/2}^0), \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

где

$$DA_i^0 = \alpha^{00} \sigma^{11} - \alpha^{10} \sigma^{01}, \quad DA_i^1 = \alpha^{01} \sigma^{11} - \alpha^{11} \sigma^{01}, \quad DA_i^2 = \alpha^{11} \sigma^{00} - \alpha^{01} \sigma^{10}, \quad DA_i^3 = \alpha^{10} \sigma^{00} - \alpha^{00} \sigma^{10},$$

$$D = \sigma^{00} \sigma^{11} - \sigma^{01} \sigma^{10}, \quad \alpha^{00} = \frac{1}{2} \sum_{m'} (\sigma w_{m'} - I_{m'}^0) a_{i,m'}, \quad \alpha^{01} = \frac{3}{2} \sum_{m'} (\sigma w_{m'} - I_{m'}^0) \mu_{m'} a_{i,m'},$$

$$\alpha^{10} = \frac{1}{2} \sum_{m'} (\sigma w_{m'} \mu_{m'} - I_{m'}^1) a_{i,m'}, \quad \alpha^{11} = \frac{3}{2} \sum_{m'} (\sigma w_{m'} \mu_{m'} - I_{m'}^1) \mu_{m'} a_{i,m'}. \quad (2.3.6)$$

Более полный учет инвариантности системы (2.3.3) при замене (2.2.13) с учетом членов, пропорциональных C , описан в [75]. Однако, как показал численный эксперимент, такая модификация расчетных формул, усложняя алгоритм, приводит лишь к незначительному уменьшению числа итераций, т. е., представляется неоправданной.

Если индикатриса рассеяния задана в P_L приближении (1.1.4) и используемая квадратура достаточно точно интегрирует на интервале $[-1, 1]$ полиномы по μ вплоть до порядка $\max(3, L+1)$, то

$$\hat{\sigma}_{s,0} = \sigma_{s,0}, \quad \hat{\sigma}_{s,1} = \sigma_{s,1}, \quad \sigma^{00} = \sigma - \sigma_{s,0}, \quad \sigma^{11} = \sigma - \sigma_{s,1}, \quad \sigma^{10} = \sigma^{01} = 0,$$

$$I_m^{l'} = w_m \sigma_{s,l'} P_l(\mu_m), \quad \alpha_i^{l,l'} = (\sigma - \sigma_{s,l'}) \frac{(2l'+1)}{2} \sum_m w_m P_l(\mu_m) P_{l'}(\mu_m) a_{i,m}, \quad l, l' = 0, 1,$$

$$A_i^0 = \frac{1}{2} \sum_m w_m a_{i,m}, \quad A_i^1 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m a_{i,m}, \quad A_i^2 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m^2 a_{i,m}, \quad A_i^3 = A_i^1 / 3. \quad (2.3.7)$$

Таким образом, расчетные формулы KP_1 схемы, согласованной с WDD схемой, в рассматриваемом случае переходят в формулы, получаемые при использовании "4-step" процедуры.

2.4. Оценка спектрального радиуса сходимости KP_1 схемы ускорения для закона рассеяния, определяемого матрицей рассеяния

Спектральный радиус сходимости KP_1 схемы для случая, когда сечение рассеяния задано в P_L приближении, исследован в работах [81, 82]. Эти результаты допускают обобщение на случай, когда закон рассеяния задается посредством матрицы рассеяния $\sigma_{m,m'}^s$ (2.3.1) [75]. Рассмотрим уравнение переноса в плоской геометрии в предположении, что среда является однородной и бесконечной. Предположим также, что используется гауссова квадратура порядка M и закон рассеяния задан матрицей $\sigma_{m,m'}^s$. Положим

$$\Psi_m^{n+1/2}(x) = \psi_m^{n+1/2}(x) - \psi_m^{n-1/2}(x), \quad \Psi_m^{n+1}(x) = \psi_m^{n+1}(x) - \psi_m^n(x). \quad (2.4.1)$$

Введенные величины, определяющие невязки между итерациями, удовлетворяют уравнению:

$$\mu_m \frac{\partial \Psi_m^{n+1/2}(x)}{\partial x} + \sigma \Psi_m^{n+1/2}(x) = \sum_{m'=1}^M w_{m'} \sigma_{m,m'}^s \Psi_{m'}^n(x). \quad (2.4.2)$$

Правую часть этого уравнения можно также представить в виде:

$$\sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m'=1}^M w_{m'} \sigma_{m,m'}^s P_l(\mu_{m'}) \Phi_l^n(x), \quad L = M - 1, \quad (2.4.3)$$

где $\Phi_l^n(x)$ - угловые моменты невязок $\Psi_m^n(x)$:

$$\Phi_l^n(x) = 2\pi \sum_{m=1}^M w_m P_l(\mu_m) \Psi_m^n(x), \quad l = 0, \dots, L. \quad (2.4.4)$$

Исследуем затухание пространственных Фурье гармоник величины $\Phi_l^n(x)$. Положим

$$\Phi_l^n(x) = \omega^n b_l e^{j\lambda x}, \quad \Psi_m^{n+1/2}(x) = \omega^n g(\mu_m) e^{j\lambda x}, \quad j = \sqrt{-1}. \quad (2.4.5)$$

Подставляя (2.4.5) в уравнение (2.4.2) с правой частью (2.4.3), получим уравнение для определения $g(\mu_m)$:

$$(j\mu_m \lambda + \sigma) g(\mu_m) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m'=1}^M w_{m'} \sigma_{m,m'}^s P_l(\mu_{m'}) b_l. \quad (2.4.6)$$

Для случая чистых (неускоренных) итераций $\Phi_l^{n+1}(x) = \Phi_l^{n+1/2}(x)$. Подставляя сюда (2.4.5) с учетом явного вида $g(\mu_m)$ (2.4.6), а также симметрии используемой квадратуры, получим следующую задачу для определения M собственных чисел $\omega(\lambda)$ и векторов (в невырожденном случае) для данного итерационного процесса:

$$\omega b_l = \sum_{l'=0}^L A_{l,l'} b_{l'}, \quad A_{l,l'} = \sigma \frac{2l+1}{2} \sum_{m,m'} \frac{w_m w_{m'} P_l(\mu_m) P_{l'}(\mu_{m'}) \sigma_{m,m'}^s}{\sigma^2 + \lambda^2 \mu_m^2}. \quad (2.4.7)$$

По определению, спектральный радиус ρ итерационного процесса равен:

$$\rho = \max_{0 \leq l \leq L} \sup_{\lambda} |\omega_l(\lambda)|. \quad (2.4.8)$$

Хуже всего затухают гармоники с $\lambda = 0$. При $\lambda = 0$, с учетом имеющейся симметрии матрицы рассеяния, отличны от нуля только диагональные члены матрицы A , т. е. $\omega_l(\lambda = 0) = A_{l,l}(\lambda = 0)$.

Отсюда следует, что если элементы матрицы $\sigma_{m,m'}^s$ неотрицательны, то $\rho = \omega_0(\lambda = 0) = \tilde{\sigma}_{s,0} / \sigma$, где величина $\tilde{\sigma}_{s,0}$ определена в (2.3.4).

Аналогично, с использованием результатов работ [81, 82], может быть проведен и анализ сходимости KP_1 схемы в непрерывном случае (т. е. без аппроксимации по переменной x), когда закон рассеяния задан матрицей $\sigma_{m,m'}^s$. KP_1 схема подавляет (с коэффициентом ≈ 0.23) первые два (наибольшие) собственные значения ($\sigma_{s,0} / \sigma$ и $\sigma_{s,1} / \sigma$ при $\lambda = 0$) матрицы A . В работе [82] показано, что в задачах с сильно вытянутой вперед индикатрисой рассеяния, спектральный радиус KP_1 схемы определяется величиной $\sigma_{s,2} / \sigma$. Аналогичный анализ для случая закона рассеяния, задаваемого матрицей рассеяния $\sigma_{m,m'}^s$, показывает, что в этом случае

$$\rho \approx \tilde{\sigma}_{s,2} / \sigma, \quad \tilde{\sigma}_{s,2} = \frac{5}{2} \sum_{m,m'} w_m w_{m'} P_2(\mu_m) P_2(\mu_{m'}) \sigma_{m,m'}^s. \quad (2.4.9)$$

2.5. KP1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная с WLB-WLD схемой, для уравнения переноса в 1D геометриях

Вывод расчетных формул KP₁ схемы, согласованной с WLB-WLD схемой, для случая 1D геометрий мы проведем на примере уравнения переноса в 1D сферической геометрии (1.6.1). Следуя [48, 49], перепишем уравнение баланса нулевого и первого порядка для центральных ячеек (1.6.3) и (1.6.49), дополнительные уравнения WLB-WLD схемы (1.6.54) и (1.6.55) на $n+1$ -ой внутренней итерации в виде, более удобном для последующего изложения:

$$\begin{aligned} \mu_m (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2}) + \frac{C_i}{w_m} (\alpha_{m+1/2} \psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2}) + \sigma V_i \psi_{i,m}^{n+1/2} = \\ = V_i \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} P_l(\mu_m) \Phi_{i,l}^n + V_i F_{i,m} = V_i S_{i,m}^n, \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

$$\begin{aligned} \mu_m \left[\frac{\Delta r_i}{2} (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} + A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2}) - V_i \psi_{i,m}^{n+1/2} \right] + \frac{C_i^r}{w_m} (\alpha_{m+1/2} \psi_{i,m+1/2}^{r,n+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{i,m-1/2}^{r,n+1/2}) + \\ + \delta_i^s (\sigma V_i \psi_{i,m}^{n+1/2} - V_i S_{i,m}^n) + \delta_i^c \frac{C_i}{w_m} (\alpha_{m+1/2} \psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2}) + \sigma V_i^r \psi_{i,m}^{r,n+1/2} = \\ = V_i^r \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l} P_l(\mu_m) \Phi_{i,l}^{r,n} + V_i^r F_{i,m}^r \end{aligned}, \quad (2.5.2)$$

$$\psi_{i,m}^{r,n+1/2} = a_{i,m}^{n+1/2} \psi_{i+1/2,m}^{n+1/2} + b_{i,m}^{n+1/2} \psi_{i-1/2,m}^{n+1/2} - (a_{i,m}^{n+1/2} + b_{i,m}^{n+1/2}) \psi_{i,m}^{n+1/2},$$

$$a = \begin{cases} 1/(Q_r + P_r), & \mu > 0 \\ P_r/(Q_r + P_r), & \mu < 0 \end{cases}, \quad b = - \begin{cases} P_r/(Q_r + P_r), & \mu > 0 \\ 1/(Q_r + P_r), & \mu < 0 \end{cases},$$

$$0 \leq P_r \leq 1, \quad Q_r = 1 \text{ или } P_r = 0, \quad 0 \leq Q_r < \infty, \quad (2.5.3)$$

$$\psi_{i,m+1/2}^{n+1/2} = (1 + P_\mu) (\psi_{i,m}^{n+1/2} - \tau \psi_{i,m}^{r,n+1/2}) - P_\mu \psi_{i,m-1/2}^{n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} c_{m'}^{(m)} (\psi_{i,m'}^{n+1/2} - \tau \psi_{i,m'}^{r,n+1/2}),$$

$$\tau = \frac{2}{\Delta r} (\delta^s - \delta^c), \quad 0 \leq P_\mu \leq 1, \quad (2.5.4)$$

$$\psi_{i,m+1/2}^{r,n+1/2} = (1 + P_\mu^r) \psi_{i,m}^{r,n+1/2} - P_\mu^r \psi_{i,m-1/2}^{r,n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} c_{m'}^{(r,m)} \psi_{i,m'}^{r,n+1/2}, \quad P_\mu^r = P_\mu, \quad (2.5.5)$$

К системе уравнений (2.5.1) - (2.5.5) следует также добавить граничные условия при $r = r_{1/2} = r_{int} \geq 0$ и $r = r_{i+1/2} = r_{out}$ (2.2.4).

Для ускорения сходимости внутренних итераций в KP₁ схеме используются линейные поправки к нулевому и первому угловым моментам решения:

$$\begin{aligned}\psi_{i,m}^{n+1} &= \psi_{i,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_i^0 + 3\mu_m f_i^1), & \psi_{i,m}^{r,n+1} &= \psi_{i,m}^{r,n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_i^{r,0} + 3\mu_m f_i^{r,1}), \\ \psi_{i\pm 1/2,m}^{n+1} &= \psi_{i\pm 1/2,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i\pm 1/2}^0 + 3\mu_m f_{i\pm 1/2}^1).\end{aligned}\quad (2.5.6)$$

Для получения системы уравнений для определения ускоряющих поправок f^0 , f^1 , $f^{r,0}$ и $f^{r,1}$ воспользуемся следующей процедурой [48], близкой к "4-step" процедуре Ларсена [71] (см. также [74]). Прежде всего, подействуем на уравнения баланса нулевого и первого порядка (2.5.1) и (2.5.2) операторами проектирования \hat{L}_0 и \hat{L}_1 (2.2.6). В предположении, что используемая квадратура достаточно точно интегрирует на интервале $[-1,1]$ полиномы по μ вплоть до порядка $\max(3, L+1)$, где L - порядок P_L -приближения индикатрисы рассеяния, получим:

$$\begin{aligned}A_{i+1/2} f_{i+1/2}^1 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^1 + \sigma^{00} V_i f_i^0 &= V_i Q_i^0, \\ \frac{1}{3} (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^0) + M_0 C_i (f_i^0 - \tau f_i^{r,0}) + M_1 C_i (f_i^1 - \tau f_i^{r,1}) + \sigma^{11} V_i f_i^1 &= V_i Q_i^1, \\ \frac{\Delta r}{2} (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^1 + A_{i-1/2} f_{i-1/2}^1) - V_i f_i^1 + \delta_i^s (\sigma^{00} V_i f_i^0 - V_i Q_i^0) + \sigma^{00} V_i^r f_i^{r,0} &= V_i^r Q_i^{r,0}, \\ \frac{\Delta r}{6} (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^0 + A_{i-1/2} f_{i-1/2}^0) - \frac{1}{3} V_i f_i^0 + C_i^r (M_0^r f_i^{r,0} + M_1^r f_i^{r,1}) + \delta_i^s (\sigma^{11} V_i f_i^1 - V_i Q_i^1) + \\ + \delta_i^c C_i [M_0 (f_i^0 - \tau f_i^{r,0}) + M_1 (f_i^1 - \tau f_i^{r,1})] + \sigma^{11} V_i^r f_i^{r,1} &= V_i^r Q_i^{r,1}\end{aligned}\quad (2.5.7)$$

где

$$Q_i^l = \sigma_{s,l} (\Phi_i^{l,n+1/2} - \Phi_i^{l,n}), \quad Q_i^{r,l} = \sigma_{s,l} (\Phi_i^{r,l,n+1/2} - \Phi_i^{r,l,n}), \quad l = 0,1, \quad \sigma^{00} = \sigma - \sigma_{s,0}, \quad \sigma^{11} = \sigma - \sigma_{s,1},$$

величины M_0 и M_1 определяются соотношениями (2.2.9) и (2.2.10), аналогично случаю WDD схемы, а величины M_0^r и M_1^r вычисляются по формулам, аналогичным (2.2.9)-(2.2.12) с заменой $P_\mu \rightarrow P_\mu^r$. Учитывая, что согласно предположению (2.5.5) $P_\mu^r = P_\mu$, получим, что

$$M_0^r = M_0 = -1/3 \quad \text{и} \quad M_1^r = M_1.$$

В систему из четырех уравнений (2.5.7) входит шесть неизвестных величины: f_i^0 , f_i^1 , $f_i^{r,0}$, $f_i^{r,1}$, $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$. Для замыкания системы (2.5.7) к ней необходимо добавить два дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные соотношения можно получить из естественного требования инвариантности системы (2.5.7) при замене в уравнении баланса первого порядка (2.5.2) [48, 49]:

$$\psi^r \rightarrow a\psi_{i+1/2} + b\psi_{i-1/2} - (a+b)\psi. \quad (2.5.8)$$

Если используемая квадратура достаточно точна, то полученные таким образом соотношения совпадают с теми, которые получаются применением операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_1 к уравнению (2.5.3):

$$\begin{aligned}
f_i^{r,0} &= A_i^0 f_{i+1/2}^0 + A_i^1 f_{i+1/2}^1 + B_i^0 f_{i-1/2}^0 + B_i^1 f_{i-1/2}^1 - (A_i^0 + B_i^0) f_i^0 - (A_i^1 + B_i^1) f_i^1, \\
f_i^{r,1} &= \frac{1}{3} A_i^1 f_{i+1/2}^0 + A_i^2 f_{i+1/2}^1 + \frac{1}{3} B_i^1 f_{i-1/2}^0 + B_i^2 f_{i-1/2}^1 - \frac{1}{3} (A_i^1 + B_i^1) f_i^0 - (A_i^2 + B_i^2) f_i^1, \quad (2.5.9)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
A_i^0 &= \frac{1}{2} \sum_m w_m a_{i,m}, \quad A_i^1 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m a_{i,m}, \quad A_i^2 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m^2 a_{i,m}, \\
B_i^0 &= \frac{1}{2} \sum_m w_m b_{i,m}, \quad B_i^1 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m b_{i,m}, \quad B_i^2 = \frac{3}{2} \sum_m w_m \mu_m^2 b_{i,m}. \quad (2.5.10)
\end{aligned}$$

Граничные условия для P_1 системы для ускоряющих поправок в случае WLB-WLD схемы совпадают с граничными условиями для случая WDD схемы (2.2.16), (2.2.17).

Численный эксперимент показал, что члены $\sim \tau$ в системе уравнений (2.5.7) не оказывают заметного влияния на эффективность работы рассматриваемой согласованной KP_1 схемы, однако их учет приводит к более громоздким формулам и некоторому увеличению числа арифметических итераций. Учитывая это, ниже в расчетных формулах для KP_1 схемы, согласованной с WLB-WLD схемой, мы будем использовать систему (2.5.7) без членов $\sim \tau$.

Для решения P_1 системы, задаваемой уравнениями (2.5.7), (2.5.9) и (2.2.16), мы должны исключить из нее величины f_i^0 , f_i^1 , $f_i^{r,0}$ и $f_i^{r,1}$ чтобы получить двухточечную систему для величин $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$. Исключая из последних двух уравнений системы (2.5.7) посредством дополнительных уравнений (2.5.9) величины $f_i^{r,0}$ и $f_i^{r,1}$ получим следующую систему линейных уравнений относительно f_i^0 и f_i^1 :

$$\begin{aligned}
a_{11} f_i^0 + a_{12} f_i^1 &= \sum_{j=1}^5 c_1^j f_j = c_1^1 f_{i+1/2}^0 + c_1^2 f_{i-1/2}^0 + c_1^3 f_{i+1/2}^1 + c_1^4 f_{i-1/2}^1 + c_1^5, \\
a_{21} f_i^0 + a_{22} f_i^1 &= \sum_{j=1}^5 c_2^j f_j = c_2^1 f_{i+1/2}^0 + c_2^2 f_{i-1/2}^0 + c_2^3 f_{i+1/2}^1 + c_2^4 f_{i-1/2}^1 + c_2^5, \quad (2.5.11)
\end{aligned}$$

где

$$a_{11} = \sigma^{00} V^r (A^0 + B^0) - \delta^s \sigma^{00} V, \quad a_{12} = \sigma^{00} V^r (A^1 + B^1) + V,$$

$$a_{21} = \frac{1}{3} \left[\Sigma_r^{11} (A^1 + B^1) - C^r (A^0 + B^0) + V + \delta^c C \right],$$

$$a_{22} = \Sigma_r^{11} (A^2 + B^2) - \frac{1}{3} C^r (A^1 + B^1) - \delta^s \sigma^{11} V - \delta^c C M_1,$$

$$c_1^1 = \sigma^{00} V^r A^0, \quad c_1^2 = \sigma^{00} V^r B^0,$$

$$c_1^3 = \sigma^{00} V^r A^1 + 0.5 \Delta r A_{i+1/2}, \quad c_1^4 = \sigma^{00} V^r B^1 + 0.5 \Delta r A_{i-1/2}, \quad c_1^5 = -V^r Q^{r,0} - \delta^s V Q^0,$$

$$c_2^1 = \frac{1}{3} \left[\Sigma_r^{11} A^1 - C^r A^0 + 0.5 \Delta r A_{i+1/2} \right], \quad c_2^2 = \frac{1}{3} \left[\Sigma_r^{11} B^1 - C^r B^0 + 0.5 \Delta r A_{i-1/2} \right],$$

$$c_2^3 = \Sigma_r^{11} A^2 - \frac{1}{3} C^r A^1, \quad c_2^4 = \Sigma_r^{11} B^2 - \frac{1}{3} C^r B^1, \quad c_2^5 = -V^r Q^{r,1} - \delta^s V Q^1, \quad \Sigma_r^{11} = \sigma^{11} V^r + C^r M_1^r. \quad (2.5.12)$$

Из системы (2.5.11) может быть найдена явная зависимость величин f_i^0 и f_i^1 от $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$:

$$\begin{aligned} f_i^0 &= \sum_{j=1}^5 x_1^j f_j = d_0^+ f_{i+1/2}^0 + d_0^- f_{i-1/2}^0 + d_1^+ f_{i+1/2}^1 + d_1^- f_{i-1/2}^1 + d \\ f_i^1 &= \sum_{j=1}^5 x_2^j f_j = e_0^+ f_{i+1/2}^0 + e_0^- f_{i-1/2}^0 + e_1^+ f_{i+1/2}^1 + e_1^- f_{i-1/2}^1 + e \end{aligned}, \quad (2.5.13)$$

где коэффициенты x_1^j и x_2^j , $j = \overline{1,5}$, находятся путем решения пяти систем из двух линейных уравнений для каждой пространственной ячейки расчетной области:

$$\begin{aligned} a_{11} x_1^j + a_{12} x_2^j &= c_1^j, \\ a_{21} x_1^j + a_{22} x_2^j &= c_2^j, \end{aligned} \quad j = \overline{1,5}. \quad (2.5.14)$$

Массивы коэффициентов $x_{1,i}^j$ и $x_{2,i}^j$, $j = \overline{1,5}$, хранятся. Подставляя уравнения (2.5.13) в первые два из уравнений системы (2.5.7), получим двухточечную систему из двух уравнений для определения величин $f_{i\pm 1/2}^0$ и $f_{i\pm 1/2}^1$:

$$f_{i+1/2}^0 a_i^\alpha + f_{i-1/2}^0 b_i^\alpha + f_{i+1/2}^1 c_i^\alpha + f_{i-1/2}^1 d_i^\alpha = q_i^\alpha, \quad \alpha = 0,1, \quad (2.5.15)$$

где

$$\begin{aligned} a^0 &= \sigma^{00} V d_0^+, \quad b^0 = \sigma^{00} V d_0^-, \quad c^0 = A_{i+1/2} + \sigma^{00} V d_1^+, \quad d^0 = -A_{i-1/2} + \sigma^{00} V d_1^-, \quad q^0 = V Q^0 - \sigma^{00} V d, \\ a^1 &= (A_{i+1/2} - C d_0^+) / 3 + \Sigma^{11} e_0^+, \quad b^1 = -(A_{i-1/2} + C d_0^-) / 3 + \Sigma^{11} e_0^-, \quad c^1 = -C d_1^+ / 3 + \Sigma^{11} e_1^+, \\ d^1 &= -C d_1^- / 3 + \Sigma^{11} e_1^-, \quad \Sigma^{11} = \sigma^{11} V + C M_1, \quad q^1 = V Q^1 - C d / 3 - \Sigma^{11} e, \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

которая решается, аналогично случаю WDD схемы, методом прогонки (2.2.20)-(2.2.21) с граничными условиями (2.2.22). После этого посредством явных соотношений (2.5.13) и (2.5.9) вычисляются поправки к нулевым и первым пространственным моментам решения. После этого по формулам (2.5.6) вычисляются решение на $n+1$ -ой итерации, включая альбедо на внешней границе области.

Изложенный алгоритм решения P_1 системы для поправок для KP_1 схемы, согласованной с WLB-WLD схемой [48, 49], реализованный в программе РОЗ-6.6, не налагает каких-либо дополнительных ограничений на веса WLB-WLD схемы и сводит решение достаточно сложной исходной P_1 системы, задаваемой уравнениями (2.5.7), (2.5.9) и (2.2.22) к решению двухточечной системы из двух уравнений (2.5.15) методом прогонки. Дополнительный вычислительный элемент предложенного алгоритма по сравнению со случаем WDD схемы - это необходимость решения вспомогательных систем (2.5.14), которое выполняется по явным формулам Крамера. Данный алгоритм допускает обобщение на более общий случай WLB-WLD схемы в 2D и 3D геометриях.

В заключение параграфа, укажем, как трансформируются приведенные соотношения для KP_1 схемы, согласованной с WLB-WLD схемой, в плоской и цилиндрической геометриях.

В *плоской геометрии* в уравнениях (2.5.1), (2.5.2) и последующих соотношениях (2.5.7), (2.5.13) и (2.5.16) следует положить:

$$A_{i\pm 1/2} = 1, \quad C_i = C_i^r = 0, \quad \delta^s = \delta^c = 0, \quad V_i = \Delta x_i, \quad V^r = (\Delta x)^2 / 6. \quad (2.5.17)$$

В *1D цилиндрической геометрии* в уравнениях (2.5.1)-(2.5.16) следует заменить:

$\mu_m \rightarrow \xi_{l,m}$, $\alpha_{m\pm 1/2} \rightarrow \alpha_{l,m\pm 1/2}$, $w_m \rightarrow w_{l,m}$, $\delta^s \rightarrow \delta^c$, $\delta^c \rightarrow 0$, а также воспользоваться подстановкой (1.6.63) и заменить операторы проектирования (2.2.6) на (2.2.24), что, соответственно, приводит к появлению дополнительного коэффициента $2/\pi$ в соотношениях для M_1 , M_r^1 , A^0 , A^1 , A^2 , B^0 , B^1 и B^2 .

2.6. Результаты использования согласованной KP_1 схема ускорения внутренних итерация для уравнения переноса в 1D геометриях

В данном разделе мы приведем численные результаты использования согласованной KP_1 схемы, реализованной в программе РОЗ-6.6 [56], для набора тестовых задач в 1D геометриях. В качестве критерия сходимости внутренних итераций использовался стандартный поточечный критерий сходимости по нулевому пространственному моменту скалярного потока:

$$\max_i \left| \frac{\Phi_i^{n+1/2} - \Phi_i^{n-1/2}}{\Phi_i^{n+1/2}} \right| < \varepsilon_{in}, \quad (2.6.1)$$

где ε_{in} - заданная точность сходимости внутренних итераций. Следует отметить, что при медленной сходимости итераций, когда спектральный радиус итерационного процесса $\rho \rightarrow 1$, критерий (2.6.1) должен быть усилен [82] путем замены правой части в (2.6.1) на $(1 - \rho)\varepsilon_{in}$. Величина ρ может быть оценена следующим образом:

$$\rho = \|e^n\| / \|e^{n-1}\|, \quad \|e^n\| = \left[\sum_i (\Phi_i^n - \Phi_i^{n-1})^2 \right]^{1/2}. \quad (2.6.2)$$

Использование согласованной KP_1 схемы обычно приводит к возникновению быстросходящегося итерационного процесса, что позволяет, как правило, использовать критерий (2.6.1).

Задача 1 [89]. Одногрупповая модельная задача для однородной пластины толщиной $X = 8$ см (а также сферы и бесконечного цилиндра радиуса $R = 8$ см) с изотропным рассеянием, с условием зеркального отражения на левой границе и вакуумным граничным условием на правой границе, с постоянным изотропным источником F в левой половине пластины (см. Рис. 2.4.1). Расчет проводился с равномерной пространственной сеткой, состоящей из 8 ячеек, при

$\sigma_{s,0} = c\sigma$, где $c = 0.98$, для значений $\sigma = 1.0, 2.0, 4.0, 6.0, 8.0, 9.0, 10.0$ и 20.0 с квадратурой Гаусса S_4 . Использовался критерий сходимости итераций (2.6.1) с $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$. В Табл. 2.4.1 представлено количество итераций для данной задачи в плоской геометрии, полученное с использованием KP_1 схемы в сочетании с AWDD схемой (для двух вариантов, описанных в разделе 1.5), LB/QC и LD схемами, адаптивной WLB/QC-WLD (AWLB) и адаптивной WLD (AWLD) схемами с параметром $u_0^{LD} = 0.8$, LB/QC схемой с “set-to-zero” алгоритмом коррекции (LB/QC₊) [74, 49]. В этой же таблице представлены данные из работы [89] для DSA схемы в сочетании с DD схемой, а также в сочетании с DD схемой с коррекцией по шаговой схеме (DD+St). Результаты использования согласованной KP_1 схемы для решения аналогичной задачи в 1D сферической и цилиндрической геометриях представлены в Табл. 2.4.2 и 2.4.3.

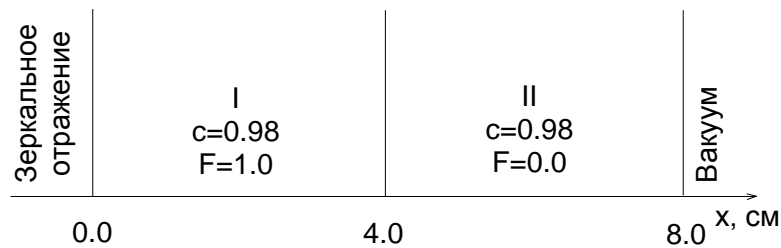


Рисунок 2.4.1. Параметры тестовой задачи Мак-Коя и Ларсена [89]

Таблица 2.4.1. Число итераций в тестовой задаче Мак-Коя и Ларсена [89] в плоской геометрии в зависимости от значения σ для квадратуры Гаусса S_4 и $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$

σ	Без ускорения	DSA		KP_1						
	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 (a)	18	18	6	6	15	30	б
9.0	501	-	a, б	18	18	7	7	12	13	б
10.0	430	5	a, б	18	18	7	8	9	10	б
20.0	297	4	a, б	17	15	8	6	10	11	б

^aВ отсутствие коррекции появляются отрицательные значения в интегральных потоках;

^bОтсутствие сходимости итераций.

Таблица 2.4.2. Число итераций в тестовой задаче Мак-Коя и Ларсена [89] в сферической геометрии в зависимости от значения σ для квадратуры Гаусса S_4 и $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$

	Без ускорения	KP_1						
σ	DD	DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LB	LD	AWLB	AWLD
1.0	115	6	6	6	5	5	5	5
2.0	217	6	7	10	5	5	6	5
4.0	356	6	13	14	5	4	8	7
6.0	434	7	19	15	6	5	17	12
8.0	482	6	21	16	7	6	15	16
9.0	416	6	20	17	7	7	10	11
10.0	354	6	20	17	10	8	9	10
20.0	292	5	16	16	7	6	10	11

Таблица 2.4.3. Число итераций в тестовой задаче Мак-Коя и Ларсена [89] в 1D цилиндрической геометрии в зависимости от значения σ для квадратуры Гаусса типа произведение S_4 и

$$\varepsilon_{in} = 10^{-4}$$

	Без ускорения	KP_1						
σ	DD	DD	AWDD ₁	AWDD ₂	LB	LD	AWLB	AWLD
1.0	147	5	5	6	5	5	5	5
2.0	244	5	6	7	5	5	5	5
4.0	361	6	11	15	6	5	7	7
6.0	497	7	19	18	5	5	12	15
8.0	526	7	21	18	8	6	20	25
9.0	457	6	21	17	9	7	11	12
10.0	392	6	21	17	10	10	9	10
20.0	295	5	16	15	7	6	10	11

Из результатов расчета данной тестовой задачи, представленных в Табл. 2.4.1-2.4.3, следует, что AWDD, AWLB и AWLD схемы за счет достаточно плавного изменения весовых коэффициентов схем в зависимости от степени изменения решения в ячейки обеспечивают сходимость итераций. Использование же алгоритмов коррекции, допускающих резкое изменение весов схемы, а также несогласованных схем ускорения, как следует из Табл. 2.4.1, может приводить к нарушению сходимости итераций.

Вместе с тем, использование чрезмерно грубых пространственных сеток приводит к увеличению числа итераций, т. е. к некоторой деградации согласованной KP_1 схемы ускорения. Более эффективный способ решения задачи - использование достаточно частых пространственных сеток, позволяющих сочетать высокую точность аппроксимации задачи с минимальным числом коррекций и высоким ускоряющим потенциалом согласованной KP_1 схемы ускорения.

Задача 2. Расчет распределения нейтронов и фотонов (в 28-и и 15-и групповом приближении, соответственно) в железобетонной борированной защите (см. Рис. 2.4.2) от изотропного внутреннего источника нейтронов со спектром деления, расположенного в 1-ой зоне. Расчет выполнялся в P_5 приближении с пространственной сеткой по геометрическим зонам из 17+10+2+12+2+10+2+12+2+10+2+12 интервалов (сетка I_1), а также с удвоенной и учетверенной пространственной сеткой (сетки I_2 и I_4), с точностью сходимости внутренних итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$. В плоской геометрии использовалась квадратура двойной гаусс S_{14} , в сферической геометрии - гаусс S_{14} , в цилиндрической геометрии - ES_{14} . В плоской геометрии на левой границе области было задано условие зеркального отражения.

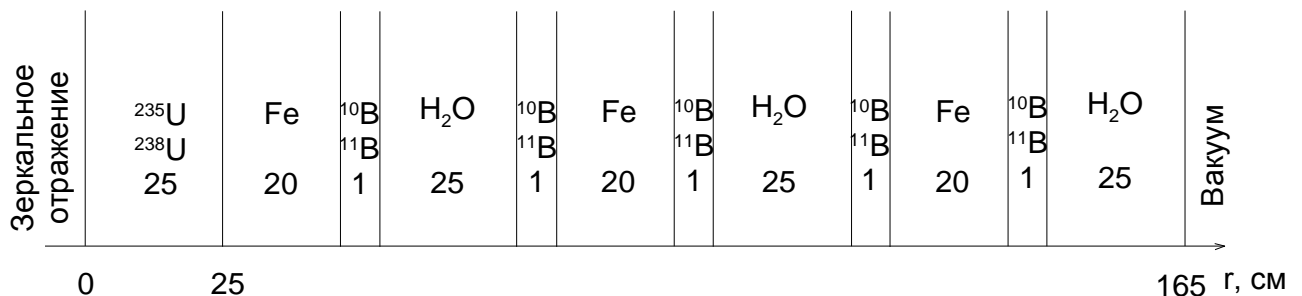


Рисунок 2.4.2. Конфигурация железобетонной борированной защиты [10, 73]. Внутренний изотропный источник нейтронов со спектром деления ^{235}U находится в 1-ой зоне

В вычислительном плане рассмотренная задача предъявляет достаточно высокие требования к разностной схеме и алгоритму ускорения итераций, как в силу резкой гетерогенности среды, приводящей к сильным изменениям решения, особенно, в тепловой области, так и использования достаточно грубой (для AWDD схемы) пространственной сетки I_1 . Следует отметить, что точность, достигаемая на сетке I_1 при использовании AWLB или AWLD схем, сопоставима с точностью AWDD схемы на сетке I_4 . В Табл. 2.4.4 приведено полное число итераций по всем группам и расчетные времена с использованием согласованной KP_1 схемы ускорения внутренних итераций и без ускорения при решении Задачи 2 с применением четырех вариантов адаптивных схем. Как следует из Табл. 2.4.4, для сетки I_1 использование алгоритма ускорения для AWDD₁ схемы приводит к уменьшению времени расчета варианта для плоской, сферической и цилиндрической геометрий, соответственно, в 3.8, 4.5 и 7.8 раз. Для сеток I_2/I_4 , в зависимости от геометрии, выигрыш составляет 4.1, 5.5 и 5.0/5.5, 5.3 и 5.7 раз. Использование AWLB или AWLD схем приводит к дополнительному выигрышу в 2 и более раз в зависимости от требуемой точности расчета.

Таблица 2.4.4. Суммарное число итераций (по всем группам) n и процессорное время t (для ПК Intel Core E750, мин., при расчете железо-водной борированной защиты в 1D геометриях с полным числом групп - 43 и точностью сходимости итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$ [49]). В скобках приведено число итераций для 28-ой (тепловой) группы нейтронов

Геометрия и сетка		без ускорения		KP_1							
		AWDD ₁		AWDD ₁		AWDD ₂		AWLB		AWLD	
		n	t	n	t	n	t	n	t	n	t
I_1	плоская	2874(854)	6.8E-3	318	1.8E-3	326	1.8E-3	359	2.6E-3	359	2.3E-3
I_2		2856(833)	1.2E-2	305	2.9E-3	300	2.6E-3	356	4.2E-3	355	4.2E-3
I_4		2856(829)	2.3E-2	301	4.2E-3	300	4.2E-3	357	6.5E-3	356	7.0E-3
I_1	сфери- ческая	2819(838)	9.4E-3	317	2.1E-3	326	2.3E-3	296	2.9E-3	296	2.9E-3
I_2		2801(816)	1.6E-2	304	2.9E-3	300	3.1E-3	296	4.7E-3	295	4.4E-3
I_4		2798(811)	3.0E-2	301	5.7E-3	298	5.7E-3	296	8.3E-3	296	8.3E-3
I_1	цилиндри- ческая	2848(844)	7.5E-2	317	9.6E-3	322	9.6E-3	360	1.6E-2	359	1.6E-2
I_2		2833(826)	8.1E-2	305	1.6E-2	301	1.6E-2	357	2.9E-2	357	2.9E-2

I_4		2832(821)	1.6E-1	301	2.8E-2	298	2.8E-2	357	5.5E-2	357	5.5E-2
-------	--	-----------	--------	-----	--------	-----	--------	-----	--------	-----	--------

Глава 3. KP1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная со взвешенной алмазной схемой, для уравнения переноса в 2D геометриях.

Введение

В неодномерной геометрии для ускорения внутренних итераций используются, в основном, схемы ускорения, которые для своей реализации не требуют хранения углового распределения решения: KP_1 (или DSA) схема [3, 69, 92] и метод квазидиффузии [83, 84, 93].

Дополнительное усложнение алгоритма ускорения в неодномерной геометрии связано также с необходимостью разработки для этого случая специального итерационного алгоритма решения системы уравнений для ускоряющих поправок. (В одномерном случае для решения указанной системы можно было воспользоваться прямым методом - методом прогонки.)

В работе Алькуффа [69] построена DSA схема для двумерной геометрии, согласованная с DD схемой. В этом частном случае решение P_1 системы для поправок может быть сведено к решению уравнения для поправки к скалярному потоку, аналогичному тому, которое получается при аппроксимации уравнения диффузии посредством 5-ти или 9-ти точечной разностной схемы (последний случай имеет место если воспользоваться согласованными граничными условиями [94]) и для решения которых разработаны эффективные итерационные методы [91, 3, 96].

DSA схема, согласованная с WDD схемой, для случая x, y и x, y, z геометрий построена и исследована в работе [92]. Однако, использованное в этой работе ограничение на выбор весовых коэффициентов значительно снижает практическую ценность предложенного подхода. DSA схема, согласованная с простейшим вариантом нодальной схемы для случая x, y геометрии построена в работе [98].

Более общий подход, не налагающий каких-либо ограничений на выбор весовых коэффициентов WDD схемы (или взвешенной нодальной схемы), состоит в разработке специальных итерационных методов для решения P_1 системы [71, 99, 100]. Предложенный в [99] алгоритм (который можно рассматривать как обобщение алгоритма решения ускоряющей P_1 системы в одномерных геометриях [4, 72, 73, 74], основан на исключении из P_1 системы посредством дополнительных WDD уравнений поправок, относящихся к центру ячейки, и использовании метода прогонки для решения вспомогательных 2-х точечных систем для поправок по каждой из пространственных переменных в рамках выбранного итерационного метода (SLOR в [99]). Близкий подход, но для более общего случая неортогональных регулярных четырехугольных пространственных сеток был предложен в работе [100]. Однако в работах [99, 100] отсутствовал алгоритм оптимизации итерационных параметров.

Использование многосеточного метода [101] и Conjugate Gradient (CG) метода [102] для решения ускоряющей системы для поправок также представляется перспективным, так как оба подхода не накладывают ограничений на веса разностной схемы. Однако, многосеточный метод довольно сложен в реализации, а предложенный в [102] вариант CG метода ограничен случаем изотропного рассеяния.

В работах [76, 77, 78, 50], развивающих подход [99], вместо метода SLOR применен циклический метод переменных направлений (или alternative direction implicit (ADI) метод) с оптимальным выбором шагов [91, 3]. Кроме того, в этих работах был применен улучшенный алгоритм учета криволинейности при построении согласованной KP_1 схемы, использованный ранее в [73, 74] (см. также гл. 2). В настоящей главе мы проведем построение KP_1 схемы ускорения, согласованной с WDD схемой, следуя работе [50].

Со времен работы [69], в которой для простейшего случая плоской геометрии была теоретически обоснована взаимосвязь между сходимостью DSA схемы ускорения внутренних итераций с ее согласованностью с разностной схемой, используемой для аппроксимации уравнения переноса, считалось, что согласованность схемы ускорения достаточна для ее безусловной сходимости. Однако впоследствии было обнаружено [15], что в сильногетерогенных задачах с малым поглощением (small absorption highly heterogeneous (SAHH) задачи) в 2D и 3D геометриях имеет место снижение эффективности согласованной KP_1 схемы ускорения (возрастает число итераций, зависимость эффективности ускорения от точности решения P_1 системы для ускоряющих поправок, и т. д.). Предложенный в [15] подход к решению этой проблемы, основанный на использовании GMRES алгоритма с применением DSA схемы ускорения в качестве предобусловливателя, позволяет добиться существенного уменьшения числа итераций, если достаточна сходимость решения в L_2 норме. Однако если используется поточечный критерий сходимости итераций (C норма), выигрыш в использовании GMRES алгоритма минимален, если вообще имеется [14, 90, 17]. Эффективным средством достижения быстрой поточечной сходимости итераций согласованной KP_1 схемы ускорения при решении SAHH задач является улучшение свойств монотонности разностной схемы, используемой для аппроксимации уравнения переноса [14, 90, 17]. Приводимые ниже в Главе 4 (Раздел 4.6) численные результаты использования согласованной KP_1 схемы для решения SAHH задач в 2D и 3D геометриях подтверждают данный вывод.

Последовательность изложения следующая. В разделе 3.1 рассмотрено построение согласованной KP_1 схемы на примере уравнения переноса в двумерной r, z геометрии. В разделе 3.2 сформулирован ADI метод для решения P_1 системы для поправок. В разделе 3.3 рассмотре-

ны алгоритмы оценки границ спектра радиальной (\hat{R}) и аксиальной (\hat{Z}) компонент P_1 оператора, которые необходимы для выбора оптимальных шагов ADI алгоритма. Формулы для расчета этих шагов приведены в разделе 3.4. В этом же разделе рассмотрен вопрос о выборе критерия сходимости ADI итераций, длины ADI цикла и т. п. В разделе 3.5 указаны изменения, которые нужно внести в алгоритм ускорения для случая уравнения переноса в двумерных x, z и r, ϑ геометриях. В разделе 3.6 представлены численные результаты использования KP_1 схемы при решении типичных задач переноса излучения в двумерной геометрии. Обсуждению результатов данного исследования посвящен раздел 3.7.

3.1. Построение KP_1 схемы ускорения внутренних итераций в r, z геометрии

Вывод расчетных формул KP_1 схемы, согласованной с WDD схемой, для случая 2D геометрий мы проведем на примере уравнения переноса в 2D r, z геометрии (1.10.23). Следуя [50], перепишем уравнение баланса для центральных ячеек (1.10.25), дополнительные уравнения WDD схемы (1.10.27) на $n+1$ -ой внутренней итерации в виде, более удобном для последующего изложения:

$$\begin{aligned} & \mu_l v_i (\psi_{i,k+1/2,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,k-1/2,l,m}^{n+1/2}) + \Delta z_k [\xi_{l,m} (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,k,l,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,k,l,m}^{n+1/2}) + \\ & + \frac{C_i}{w_{l,m}} (\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,k,l,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,k,l,m-1/2}^{n+1/2})] + \sigma V_{i,k} \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} = \\ & = V_{i,k} \sum_{p=0}^P \frac{2p+1}{4\pi} \sigma_{s,p} \sum_{q=0}^p Y_p^q(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{p,i,k}^{q,n} + V_{i,k} F_{i,k,l,m}, \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

$$\psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} = a_{i,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i+1/2,k,l,m}^{n+1/2} + (1 - a_{i,k,l,m}^{n+1/2}) \psi_{i-1/2,k,l,m}^{n+1/2}, \quad a = \begin{cases} 1/(1+P_r), & \xi > 0 \\ P_r/(1+P_r), & \xi < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (3.1.2)$$

$$\psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} = b_{i,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i,k+1/2,l,m}^{n+1/2} + (1 - b_{i,k,l,m}^{n+1/2}) \psi_{i,k-1/2,l,m}^{n+1/2}, \quad b = \begin{cases} 1/(1+P_z), & \mu > 0 \\ P_z/(1+P_z), & \mu < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_z \leq 1, \quad (3.1.3)$$

$$\psi_{i,k,l,m+1/2}^{n+1/2} = (1 + P_\xi) \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} - P_\xi \psi_{i,k,l,m-1/2}^{n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} c_{m'}^{(l,m)} \psi_{i,k,l,m'}^{n+1/2}, \quad 0 \leq P_\xi \leq 1, \quad (3.1.4)$$

где

$$\alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} = -w_{l,m} \xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_l+1/2} = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L,$$

$$A_{i\pm 1/2} = r_{i\pm 1/2}, \quad v_i = \frac{1}{2} (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}, \quad V_{i,k} = \Delta z_k v_i.$$

К системе уравнений (3.1.1)-(3.1.4) следует также добавить граничные условия при

$$r = r_{1/2} = r_{int} \geq 0, \quad r = r_{l+1/2} = r_{out}, \quad z = z_{1/2} = 0 \quad \text{и} \quad z = z_{K+1/2} = H:$$

$$\begin{aligned}\psi_{1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{k,l,m}^{int} + \sum_{\xi_{l,m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{int} \psi_{1/2,k,l'm'}^{n+1/2}, & \xi_{l,m} > 0, \\ \psi_{1+1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{k,l,m}^{out} + \sum_{\xi_{l,m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{out} \psi_{1+1/2,k,l'm'}^n, & \xi_{l,m} < 0,\end{aligned}\quad (3.1.5)$$

$$\begin{aligned}\psi_{i,1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,l,m}^{bot} + \sum_{\mu_l < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{bot} \psi_{i,1/2,l'm'}^{n+1/2}, & \mu_l > 0, \\ \psi_{i,K+1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,l,m}^{top} + \sum_{\mu_l > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{top} \psi_{i,K+1/2,l'm'}^n, & \mu_l < 0,\end{aligned}\quad (3.1.6)$$

где коэффициенты R^{int} , R^{out} , R^{bot} и R^{top} задают, соответственно, закон отражения, а F^{int} , F^{out} , F^{bot} и F^{top} - поверхностный источник на внутренней ($r = r_{int}$), внешней ($r = r_{out}$), нижней ($z = 0$) и верхней ($z = H$) границах области.

Для расчета весовых коэффициентов P_r , P_z и P_ξ в дополнительных WDD уравнениях (3.1.2), (3.1.3) и (3.1.4) целесообразно использовать AWDD схему, рассмотренную в Главе 1, которая обеспечивает положительность и приемлемый уровень монотонности разностного решения с сохранением высокой точности расчета интегральных величин, не препятствует сходимости внутренних итераций [74].

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

$$\begin{aligned}\psi_{i,k,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,k}^r + 3\mu_l f_{i,k}^z), \\ \psi_{i\pm 1/2,k,l,m}^{n+1} &= \psi_{i\pm 1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i\pm 1/2,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i\pm 1/2,k}^r + 3\mu_l f_{i\pm 1/2,k}^z), \\ \psi_{i,k\pm 1/2,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,k\pm 1/2,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,k\pm 1/2}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,k\pm 1/2}^r + 3\mu_l f_{i,k\pm 1/2}^z).\end{aligned}\quad (3.1.7)$$

В стандартной KP_1 схеме поправки $f_{i\pm 1/2,k}^z$ и $f_{i,k\pm 1/2}^r$, полагаются равными нулю, так как они не входят в балансные уравнения KP_1 схемы (см. ниже уравнение (3.1.9)). В работе [76] рассмотрен также более общий случай *полной* KP_1 схемы, где эти поправки учитываются. Здесь мы ограничимся изложением построения более простой стандартной KP_1 схемы, использование которой, как показал численный эксперимент, в силу ее экономичности, дает больший выигрыш во времени по сравнению с *полной* KP_1 схемой.

Для получения системы уравнений для определения ускоряющих поправок f^0 , f^r и f^z воспользуемся следующей процедурой, близкой к "4-step" процедуре Ларсена [71, 92] (см. также [74, 75]). Прежде всего, подействуем на уравнение баланса (2.2.1) операторами проектирования \hat{L}_0 , \hat{L}_r и \hat{L}_z .

$$\hat{L}_0 \psi = 2 \sum_{l,m} w_{l,m} \psi_{i,k,l,m}, \quad \hat{L}_r \psi = 2 \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} \psi_{i,k,l,m}, \quad \hat{L}_z \psi = 2 \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l \psi_{i,k,l,m}, \quad (3.1.8)$$

где интегрирование производится по четырем октантам. В предположении, что используемая квадратура достаточно точно интегрирует соответствующие сферические гармоники, получим:

$$\begin{aligned} v_i (f_{i,k+1/2}^z - f_{i,k-1/2}^z) + \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^r) + \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^0 &= V_{i,k} Q_{i,k}^0, \\ \frac{1}{3} \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^0) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k f_{i,k}^0 + (\sigma^{11} V_{i,k} + M_r C_i \Delta z_k) f_{i,k}^r &= V_{i,k} Q_{i,k}^r, \\ \frac{1}{3} v_i (f_{i,k+1/2}^0 - f_{i,k-1/2}^0) + \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^z &= V_{i,k} Q_{i,k}^z, \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{i,k}^0 &= \sigma_{s,0} (\Phi_{i,k}^{0,n+1/2} - \Phi_{i,k}^{0,n}), & Q_{i,k}^r &= \sigma_{s,1} (\Phi_{i,k}^{r,n+1/2} - \Phi_{i,k}^{r,n}), & Q_{i,k}^z &= \sigma_{s,1} (\Phi_{i,k}^{z,n+1/2} - \Phi_{i,k}^{z,n}), \\ \sigma^{00} &= \sigma - \sigma_{s,0}, & \sigma^{11} &= \sigma - \sigma_{s,1}, & \Phi_{i,k}^0 &= \Phi_{0,i,k}^0, & \Phi_{i,k}^r &= \Phi_{1,i,k}^r, & \Phi_{i,k}^z &= \Phi_{1,i,k}^z, \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

$$M_r = \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} \xi_{l,m} (\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^r - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^r), \quad \pi_{l,m+1/2}^r = \sum_{m' \leq m} c_m^{(l,m)} \xi_{l,m'}. \quad (3.1.11)$$

Величина $\pi_{l,m+1/2}^r$ в (3.1.11) может быть вычислена с помощью следующего рекуррентного соотношения:

$$\pi_{l,m+1/2}^r = (1 + P_{l,m}^\xi) \xi_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^r, \quad \pi_{l,1/2}^r = \xi_{l,1/2}. \quad (3.1.12)$$

В систему из трех уравнений (3.1.9) входит семь неизвестных величин: $f_{i,k}^0$, $f_{i,k}^r$, $f_{i,k}^z$, $f_{i,\pm 1/2,k}^0$, $f_{i,\pm 1/2,k}^r$, $f_{i,k,\pm 1/2}^0$ и $f_{i,k,\pm 1/2}^z$. (Как уже отмечалось выше, в уравнениях (3.1.9) отсутствуют величины $f_{i,\pm 1/2,k}^z$ и $f_{i,k,\pm 1/2}^r$). Для замыкания системы (3.1.9) к ней необходимо добавить четыре дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные соотношения можно получить из естественного требования инвариантности системы (3.1.9) при заменах в уравнении баланса (3.1.1) [4, 72, 11, 74, 75]:

$$\psi \rightarrow a \psi_{i+1/2} + (1-a) \psi_{i-1/2}, \quad \psi \rightarrow b \psi_{k+1/2} + (1-b) \psi_{k-1/2}. \quad (3.1.13)$$

Если используемая квадратура достаточно точна, то полученные таким образом соотношения совпадают с теми, которые получаются применением операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_r к уравнению (3.1.2) и операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_z к уравнению (3.1.3) (как это рекомендуется в "4-step" процедуре Ларсена):

$$\begin{aligned} f_{i,k}^0 &= A_{i,k}^0 f_{i+1/2,k}^0 + (1 - A_{i,k}^0) f_{i-1/2,k}^0 + A_{i,k}^1 (f_{i+1/2,k}^r - f_{i-1/2,k}^r), \\ f_{i,k}^r &= A_{i,k}^2 f_{i+1/2,k}^r + (1 - A_{i,k}^2) f_{i-1/2,k}^r + A_{i,k}^1 (f_{i+1/2,k}^0 - f_{i-1/2,k}^0) / 3, \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

$$\begin{aligned} f_{i,k}^0 &= B_{i,k}^0 f_{i,k+1/2}^0 + (1 - B_{i,k}^0) f_{i,k-1/2}^0 + B_{i,k}^1 (f_{i,k+1/2}^z - f_{i,k-1/2}^z), \\ f_{i,k}^z &= B_{i,k}^2 f_{i,k+1/2}^z + (1 - B_{i,k}^2) f_{i,k-1/2}^z + B_{i,k}^1 (f_{i,k+1/2}^0 - f_{i,k-1/2}^0) / 3, \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

где

$$\begin{aligned} A_{i,k}^0 &= \frac{1}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} a_{i,k,l,m}, & A_{i,k}^1 &= \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} a_{i,k,l,m}, & A_{i,k}^2 &= \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m}^2 a_{i,k,l,m}, \\ B_{i,k}^0 &= \frac{1}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} b_{i,k,l,m}, & B_{i,k}^1 &= \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l b_{i,k,l,m}, & B_{i,k}^2 &= \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l^2 b_{i,k,l,m}. \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

Вопрос о граничных условиях для DSA метода в двумерной геометрии рассматривался в работе [94]. Для получения граничных условий для P_1 системы воспользуемся следующей процедурой [76], обобщающей использованную ранее для случая одномерной геометрии [72, 73, 74, 75]. Домножим уравнения (3.1.5), определяющие закон отражения при $r = r_{int}$ и $r = r_{out}$, на $w_{l,m} \xi_{l,m}$ и просуммируем их по направлениям $\xi_{l,m} > 0$ и $\xi_{l,m} < 0$, соответственно. С учетом вида поправок (3.1.7), получим:

$$l_0 f_{1/2,k}^0 + 3l_1 f_{1/2,k}^r = 0, \quad m_0 f_{I+1/2,k}^0 + 3m_1 f_{I+1/2,k}^r = \lambda_k^r, \quad (3.1.17)$$

где

$$\begin{aligned} l_p &= \sum_{\xi_{l,m} > 0} w_{l,m} \xi_{l,m} (\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{int}), \\ m_p &= \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} (\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{out}), \\ p = 0, 1, \quad \lambda_k^r &= 4\pi \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{out} (\psi_{I+1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{I+1/2,k,l',m'}^n). \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

Аналогично поступим для определения граничных условий для поправок на нижней и верхней границах области. Домножим уравнения (3.1.6), задающие закон отражения при $z = 0$ и $z = H$, на $w_{l,m} \mu_l$ и просуммируем их по направлениям $\mu_l > 0$ и $\mu_l < 0$, соответственно. С учетом вида ускоряющих поправок (3.1.7), получим:

$$u_0 f_{i,1/2}^0 + 3u_1 f_{i,1/2}^z = 0, \quad d_0 f_{i,K+1/2}^0 + 3d_1 f_{i,K+1/2}^z = \lambda_i^z, \quad (3.1.19)$$

где

$$\begin{aligned} u_p &= \sum_{\mu_l > 0} w_{l,m} \mu_l (\mu_l^p - \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{bot}), & d_p &= \sum_{\mu_l < 0} w_{l,m} \mu_l (\mu_l^p - \sum_{\mu_{l'} > 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{top}), \\ p = 0, 1, \quad \lambda_i^z &= 4\pi \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} \mu_{l'} \sum_{\mu_l > 0} w_{l,m} \mu_l R_{lm,l'm'}^{top} (\psi_{i,K+1/2,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{i,K+1/2,l',m'}^n). \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

Численный эксперимент показывает [77, 78], что в задачах с существенной ролью анизотропии рассеяния при $\sigma_{s,1} > 0.5\sigma_{s,0}$, в отличие от одномерного случая, в двумерной геометрии как стандартная, так и полная KP_1 схема становятся неустойчивыми. Этот результат согласуется с результатами Фурье анализа устойчивости этой схемы [3, 103], который показал, что в x, y

геометрии при наличии линейно-анизотропного рассеяния DSA схема становится неустойчивой при

$$\lambda = \mu_0 c / (1 - \mu_0 c) > 1, \quad \text{где} \quad \mu_0 = \sigma_{s1} / \sigma_{s0}, \quad c = \sigma_{s0} / \sigma_t, \quad (3.1.21)$$

и для обеспечения устойчивости алгоритма на одну P_1 итерацию требуется дополнительно K "чистых" (без ускорения) кинетических итераций, где K зависит от $\mu_0 c$.

Для обеспечения устойчивости KP_1 схемы в задачах переноса нейтрального излучения нами используется следующий простой прием [77]: на четных внутренних итерациях ускоряющая коррекция, в соответствии с (3.1.7), производится для трех угловых моментов решения, включая нулевой, на нечетных - только для скалярного потока. Ясно, что такое решение не является оптимальным, но оно обеспечивает устойчивость KP_1 схемы для широкого класса практических задач.

По-видимому, для обеспечения устойчивости KP_1 схемы в двумерной геометрии в задачах с сильной анизотропией рассеяния, следует прежде всего улучшить аппроксимацию рассеяния, что достигается декомпозицией сечения рассеяния на регулярную и сингулярную компоненты. (Для задач переноса электронов указанная декомпозиция приводит к трансформации уравнения переноса в уравнение Больцмана-Фоккера-Планка.) Сингулярная компонента, описывающая рассеяние на малые углы, порождает мало-диагональную матрицу рассеяния, для обращения которой можно воспользоваться прямым методом; регулярная компонента, описывающая рассеяние на большие углы, может быть хорошо аппроксимирована в невысоком P_L приближении и для обращения соответствующей компоненты матрицы рассеяния может быть использована согласованная KP_1 схема.

3.2. ADI метод для решения P_1 системы для ускоряющих поправок

P_1 система для стандартной KP_1 схемы в r, z геометрии состоит из трех балансных уравнений (3.1.9), четырех дополнительных уравнений (3.1.14) и (3.1.15), и граничных уравнений (3.1.17) и (3.1.19). Эта система может быть решена итерационно, с использованием, например, ADI метода.

При построении ADI алгоритма используется принцип установления [91, 95, 96], который был впервые сформулирован и использован в 30-х годах А. Н. Тихоновым [95]. Согласно этому принципу решение рассматриваемой нами P_1 системы для поправок является пределом при $t \rightarrow \infty$ решения соответствующей нестационарной P_1 системы. Для аппроксимации произ-

водной по времени в этой системе используется разностная схема метода переменных направлений.

Будем исходить из нестационарного уравнения переноса в r, z геометрии, которое получается путем добавления к уравнению (1.10.24) слагаемого $r \partial \psi / \partial t$, где t - безразмерное время. В соответствии с общим подходом метода переменных направлений [96], дифференциальная часть исходного оператора переноса и соответствующего ему P_1 оператора \hat{A} представляется в виде суммы:

$$\hat{A} = \hat{R} + \hat{Z}, \quad (3.2.1)$$

где \hat{R} и \hat{Z} - компоненты оператора \hat{A} , определяющие изменение решения по переменным r и z соответственно (более подробно о структуре операторов \hat{R} и \hat{Z} будет сказано ниже). Шаг $\tau^{(s+1)} = \Delta t^{(s+1)}$ по времени, где $s = 0, 1, 2, \dots$, разбивается на два шага: $\tau_r^{(s+1)}$ и $\tau_z^{(s+1)}$, $\tau_r^{(s+1)} + \tau_z^{(s+1)} = \tau^{(s+1)}$. (Мы будем также использовать обозначения $\omega_\alpha^s = 1/\tau_\alpha^s$, $\alpha = r, z$). На шаге $\tau_r^{(s+1)}$ оператор \hat{R} учитывается по явной схеме, а оператор \hat{Z} - по неявной схеме. На шаге $\tau_z^{(s+1)}$ - наоборот: оператор \hat{Z} учитывается по явной схеме, а оператор \hat{R} - по неявной схеме.

Обозначим через ψ^s , $\psi^{s+1/2}$ и ψ^{s+1} значения потока при $t = t_s$, $t_{s+1/2} = t_s + \tau_r^{(s+1)}$ и $t_{s+1} = t_{s+1/2} + \tau_z^{(s+1)}$. Добавки к уравнению баланса (3.1.1) на шагах $\tau_r^{(s+1)}$ и $\tau_z^{(s+1)}$, возникающие в результате аппроксимации производной по времени, имеют, соответственно, вид:

$$V_{i,k} \frac{\psi_{i,k,l,m}^{n+1/2,s+1/2} - \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2,s}}{\tau_r^{(s+1)}}, \quad V_{i,k} \frac{\psi_{i,k,l,m}^{n+1/2,s+1} - \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2,s+1/2}}{\tau_z^{(s+1)}}. \quad (3.2.2)$$

Учитывая вид поправок (3.1.7), используемых в KP_1 алгоритме, и применяя стандартную двухшаговую процедуру метода переменных направлений [96], получим следующую систему для поправок на шаге $\tau_r^{(s+1)}$:

$$\begin{aligned} & V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{0,s+1/2} - f_{i,k}^{0,s}}{\tau_r^{(s+1)}} + \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^{r,s+1/2} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^{r,s+1/2}) + \frac{1}{2} \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^{0,s+1/2} = \\ & = V_{i,k} Q_{i,k}^0 - v_i (f_{i,k+1/2}^{z,s} - f_{i,k-1/2}^{z,s}) - \frac{1}{2} \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^{0,s}, \\ & V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{r,s+1/2} - f_{i,k}^{r,s}}{\tau_r^{(s+1)}} + \frac{1}{3} \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^{0,s+1/2} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^{0,s+1/2}) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k f_{i,k}^{0,s+1/2} + \\ & + \left(\frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} + M_r C_i \Delta z_k \right) f_{i,k}^{r,s+1/2} = V_{i,k} Q_{i,k}^r - \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{r,s}, \end{aligned}$$

$$V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{z,s+1/2} - f_{i,k}^{z,s}}{\tau_r^{(s+1)}} + \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{z,s+1/2} = V_{i,k} Q_{i,k}^z - \frac{1}{3} v_i (f_{i,k+1/2}^{0,s} - f_{i,k-1/2}^{0,s}) - \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{z,s}. \quad (3.2.3)$$

Отметим, что в уравнении (3.2.3) нами использована симметричная декомпозиция членов $\sim \sigma^{00}$ и σ^{11} на явную и неявную компоненты.

Система (3.2.3), дополненная двумя дополнительными уравнениями (3.1.14) и граничными условиями (3.1.17), (3.1.18), отнесенными к моменту времени $t_{s+1/2}$, решается методом прогонки по переменной r в предположении, что величины с индексом s известны с предыдущего шага. Исключая из первых двух уравнений системы (3.2.3) величины $f_{i,k}^{0,s+1/2}$ и $f_{i,k}^{r,s+1/2}$ посредством дополнительных уравнений (3.1.14) (отнесенных к моменту времени $t_{s+1/2}$), получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $f_{i\pm 1/2,k}^{0,s+1/2}$ и $f_{i\pm 1/2,k}^{r,s+1/2}$:

$$f_{i+1/2,k}^{0,s+1/2} a_{i,k}^{r,\alpha} + f_{i-1/2,k}^{0,s+1/2} b_{i,k}^{r,\alpha} + f_{i+1/2,k}^{r,s+1/2} c_{i,k}^{r,\alpha} + f_{i-1/2,k}^{r,s+1/2} d_{i,k}^{r,\alpha} = q_{i,k}^{r,\alpha}, \quad \alpha = 0, r, \quad (3.2.4)$$

где

$$a^{r,0} = \Sigma_r^{0,0} A_0, \quad b^{r,0} = \Sigma_r^{0,0} (1 - A_0), \quad c^{r,0} = A_{i+1/2} \Delta z + \Sigma_r^{0,0} A_1, \quad d^{r,0} = -A_{i-1/2} \Delta z - \Sigma_r^{0,0} A_1,$$

$$\Sigma_r^{0,0} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{0,0} + \omega_r \right) V, \quad q^{r,0} = V Q^0 - v (f_{k+1/2}^{z,s} - f_{k-1/2}^{z,s}) - \left(\frac{1}{2} \sigma^{0,0} - \omega_r \right) V f^{0,s},$$

$$a^{r,r} = \left[A_{i+1/2} \Delta z - C \Delta z A_0 + \tilde{\Sigma}_r^{1,1} A_1 \right] / 3, \quad b^{r,r} = - \left[A_{i-1/2} \Delta z + C \Delta z (1 - A_0) + \tilde{\Sigma}_r^{1,1} A_1 \right] / 3,$$

$$c^{r,r} = -C \Delta z A_1 / 3 + \tilde{\Sigma}_r^{1,1} A_2, \quad d^{r,r} = C \Delta z A_1 / 3 + \tilde{\Sigma}_r^{1,1} (1 - A_2),$$

$$\tilde{\Sigma}_r^{1,1} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} + \omega_r \right) V + C \Delta z M_r, \quad q^{r,r} = V Q^r - \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} - \omega_r \right) V f^{r,s}. \quad (3.2.5)$$

Для каждого слоя k система (3.2.4), (3.2.5) решается методом прогонки (см. раздел 2.2, уравнения (2.2.20)-(2.2.22)):

$$f_{i+1/2}^0 = \xi_i^0 f_{i-1/2}^0 + \eta_i^0, \quad f_{i-1/2}^r = \xi_i^r f_{i-1/2}^0 + \eta_i^r, \quad (3.2.6)$$

с граничными условиями:

$$f_{I+1/2}^r = \xi_{I+1}^r f_{I+1/2}^0 + \eta_{I+1}^r, \quad \xi_{I+1}^r = -\frac{m_0}{3m_1}, \quad \eta_{I+1}^r = \frac{\lambda^r}{3m_1}, \quad f_{1/2}^0 = -\frac{l_1 \eta_1^r}{l_1 \xi_1^r + l_0 / 3}. \quad (3.2.7)$$

После нахождения величин поправок для потоков на гранях ячейки $f_{i\pm 1/2,k}^{0,s+1/2}$ и $f_{i\pm 1/2,k}^{r,s+1/2}$, поправки $f_{i,k}^{0,s+1/2}$ и $f_{i,k}^{r,s+1/2}$ для средних значений потока вычисляются по явным формулам (3.1.14). Величина $f_{i,k}^{z,s+1/2}$ находится по явной формуле из последнего уравнения системы (3.2.3):

$$f_{i,k}^{z,s+1/2} = \frac{V_{i,k} Q_{i,k}^z - v_i (f_{i,k+1/2}^{0,s} - f_{i,k-1/2}^{0,s}) / 3 + (\omega_r - \sigma^{11} / 2) V_{i,k} f_{i,k}^{z,s}}{\Sigma_r^{1,1} V_{i,k}}, \quad \Sigma_r^{1,1} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} + \omega_r \right) V. \quad (3.2.8)$$

Аналогично, на шаге $\tau_z^{(s+1)}$ ADI алгоритма решается следующая система:

$$\begin{aligned}
& V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{0,s+1} - f_{i,k}^{0,s+1/2}}{\tau_z^{(s+1)}} + v_i (f_{i,k+1/2}^{z,s+1} - f_{i,k-1/2}^{z,s+1}) + \frac{1}{2} \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^{0,s+1} = \\
& = V_{i,k} Q_{i,k}^0 - \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^{r,s+1/2} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^{r,s+1/2}) - \frac{1}{2} \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^{0,s+1/2}, \\
& V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{r,s+1} - f_{i,k}^{r,s+1/2}}{\tau_z^{(s+1)}} + \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{r,s+1} = V_{i,k} Q_{i,k}^r - \frac{1}{3} \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^{0,s+1/2} - \\
& - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^{0,s+1/2}) + \frac{1}{3} C_i \Delta z_k f_{i,k}^{0,s+1/2} - \left(\frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} + M_r C_i \Delta z_k \right) f_{i,k}^{r,s+1/2}, \\
& V_{i,k} \frac{f_{i,k}^{z,s+1} - f_{i,k}^{z,s+1/2}}{\tau_z^{(s+1)}} + \frac{1}{3} v_i (f_{i,k+1/2}^{0,s+1} - f_{i,k-1/2}^{0,s+1}) + \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{z,s+1} = V_{i,k} Q_{i,k}^z - \frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f_{i,k}^{z,s+1/2}. \quad (3.2.9)
\end{aligned}$$

Система (3.2.9), дополненная граничными условиями (3.1.19), (3.1.20), отнесенными к моменту времени t_{s+1} , решается методом прогонки по переменной z . Исключая из первого и последнего уравнений системы (3.2.9) величины $f_{i,k}^{0,s+1}$ и $f_{i,k}^{z,s+1}$ посредством дополнительных уравнений (3.1.15), отнесенных к моменту времени t_{s+1} , получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $f_{i,k\pm 1/2}^{0,s+1}$ и $f_{i,k\pm 1/2}^{z,s+1}$:

$$f_{i,k+1/2}^{0,s+1} a_{i,k}^{z,\alpha} + f_{i,k-1/2}^{0,s+1} b_{i,k}^{z,\alpha} + f_{i,k+1/2}^{z,s+1} c_{i,k}^{z,\alpha} + f_{i,k-1/2}^{z,s+1} d_{i,k}^{z,\alpha} = q_{i,k}^{z,\alpha}, \quad \alpha = 0, z, \quad (3.2.10)$$

где

$$\begin{aligned}
& a^{z,0} = \Sigma_z^{0,0} B_0, \quad b^{z,0} = \Sigma_z^{0,0} (1 - B_0), \quad c^{z,0} = v + \Sigma_z^{0,0} B_1, \quad d^{z,0} = -v - \Sigma_z^{0,0} B_1, \\
& \Sigma_z^{0,0} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{0,0} + \omega_z \right) V, \quad q^{z,0} = V Q^0 - \Delta z (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^{r,s+1/2} - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^{r,s+1/2}) - \left(\frac{1}{2} \sigma^{0,0} - \omega_z \right) V f_{i,k}^{0,s+1/2}, \\
& a^{z,z} = (v + \Sigma_z^{1,1} B_1) / 3, \quad b^{z,z} = -(v + \Sigma_z^{1,1} B_1) / 3, \quad c^{z,z} = \Sigma_z^{1,1} B_2, \quad d^{z,z} = \Sigma_z^{1,1} (1 - B_2), \\
& \Sigma_z^{1,1} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} + \omega_z \right) V, \quad q^{z,z} = V Q^z - \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} - \omega_z \right) V f_{i,k}^{z,s+1/2}. \quad (3.2.11)
\end{aligned}$$

Для каждого слоя i система (3.2.10), (3.2.11) решается методом прогонки:

$$f_{k+1/2}^0 = \xi_k^0 f_{k-1/2}^0 + \eta_k^0, \quad f_{k-1/2}^z = \xi_k^z f_{k-1/2}^0 + \eta_k^z \quad (3.2.12)$$

с граничными условиями:

$$f_{K+1/2}^z = \xi_{K+1}^z f_{K+1/2}^0 + \eta_{K+1}^z, \quad \xi_{K+1}^z = -\frac{d_0}{3d_1}, \quad \eta_{K+1}^z = \frac{\lambda^z}{3d_1}, \quad f_{1/2}^0 = -\frac{u_1 \eta_1^z}{u_1 \xi_1^z + u_0 / 3}. \quad (3.2.13)$$

После нахождения величин $f_{i,k\pm 1/2}^{0,s+1}$ и $f_{i,k\pm 1/2}^{z,s+1}$ для каждого слоя по i , величины $f_{i,k}^{0,s+1}$ и $f_{i,k}^{z,s+1}$ находятся по явным формулам (3.1.15), отнесенным к моменту времени t_{s+1} . Величина $f_{i,k}^{r,s+1}$ находится по явной формуле из второго уравнения системы (3.2.9):

$$f_{i,k}^{r,s+1} = \{VQ_{i,k}^r - \Delta z_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^{0,s+1/2} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^{0,s+1/2}) / 3 + C_i \Delta z_k f_{i,k}^{0,s+1/2} / 3 - \left[\left(\frac{1}{2} \sigma^{11} - \omega_z \right) V + M_r C_i \Delta z_k \right] f_{i,k}^{r,s+1/2} \} / \Sigma_z^{1,1}. \quad (3.2.14)$$

Эффективность ADI алгоритма весьма существенно зависит от выбора параметров $\omega_r^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$ [3, 91, 96]. В случае, когда операторы \hat{R} и \hat{Z} (3.2.1) являются самосопряженными, имеют положительный (отрицательный) спектр, а также перестановочны:

$$\hat{R}\hat{Z} = \hat{Z}\hat{R}, \quad (3.2.15)$$

на основании знания границ спектра λ_x и Λ_x , $x = r, z$ этих операторов можно указать оптимальный набор параметров $\omega_r^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$ [3, 91, 96].

Однако, в рассматриваемом нами общем случае гетерогенной задачи операторы \hat{R} и \hat{Z} , вообще говоря, неперестановочны. Следовательно, результаты общей теории по выбору параметров $\omega_r^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$ в данном случае применимы лишь приближенно.

В следующих разделах мы рассмотрим алгоритм для оценки минимального и максимального собственных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} , используемых в ADI методе, и приведем соотношения для расчета итерационных параметров $\omega_r^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$.

3.3. Оценка границ спектра радиальной и аксиальной компонент P_1 оператора

Достаточно рассмотреть случай оператора \hat{R} , так-как для оператора \hat{Z} используется аналогичная процедура. Прежде всего, оператор \hat{R} заменяется на оператор \hat{R}_a , полученный путем усреднения оператора \hat{R} по переменной z . Для этого вычисляются средние по z значения коэффициентов $a_{i,k}^{r,\alpha}$, $b_{i,k}^{r,\alpha}$, $c_{i,k}^{r,\alpha}$ и $d_{i,k}^{r,\alpha}$, $\alpha = 0, r$, из системы (3.2.4), (3.2.5) в точке $\omega_r = 0$, а также величин $A_{i,k}^0$, $A_{i,k}^1$ и $A_{i,k}^2$ из уравнений (3.1.14) и величины $\sigma^{11} V_{i,k} / 2$ из уравнения (3.2.8). Указанные величины определяют элементы матрицы оператора \hat{R}_a .

Оператор \hat{R}_a имеет блочную структуру и может быть представлен в виде:

$$\hat{R}_a = \begin{pmatrix} \hat{C}\hat{G}^{-1} & 0 \\ 0 & \nu\hat{E}_z \end{pmatrix}, \quad \nu = \frac{1}{2} \sum_k \sigma^{11} V_{i,k} / \sum_k V_{i,k}. \quad (3.3.1)$$

Здесь оператор \hat{C} преобразует вектор $\vec{g}_{i\pm 1/2,up} = col\{g_{i\pm 1/2}^0, g_{i\pm 1/2}^r\}$, определенный на гранях $r_{i\pm 1/2}$ ячеек, в вектор $\vec{q}_{i,up}$, состоящий из двух компонент вектора правой части $\vec{q}_{i,up} = col\{q_i^0, q_i^r\}$, от-

несенных к центрам ячеек: $\hat{C}\vec{g}_{up} = \vec{q}_{up}$. Матрица оператора \hat{C} получается усреднением по z матрицы системы (3.2.4). Оператор \hat{G} преобразует вектор $\vec{g}_{i\pm 1/2, up}$ в вектор $\vec{f}_{i, up} = col\{f_i^0, f_i^r\}$, определенный в центрах ячеек: $\vec{f}_{up} = \hat{G}\vec{g}_{up}$. Матрица оператора \hat{G} состоит из усредненной по z матрицы системы (3.1.14). Оператор \hat{E}_z представляет собой единичный оператор, действующий только на f_i^z компоненту вектора \vec{f}_i .

Для определения минимального и максимального собственных чисел λ_r и Λ_r оператора \hat{R}_a может быть использован степенной метод [96, 97]:

$$\Lambda_r = \lim_{s \rightarrow \infty} \lambda'_{(s)}, \quad \lambda'_{(s+1)} = \frac{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}{\|\vec{f}^{(s)}\|}, \quad \vec{y}^{(s+1)} = \hat{R}_a \vec{f}^{(s)}, \quad \vec{f}^{(s+1)} = \frac{\vec{y}^{(s+1)}}{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}, \quad (3.3.2)$$

$$1/\lambda_r = \lim_{s \rightarrow \infty} \lambda''_{(s)}, \quad \lambda''_{(s+1)} = \frac{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}{\|\vec{f}^{(s)}\|}, \quad \vec{y}^{(s+1)} = \hat{R}_a^{-1} \vec{f}^{(s)}, \quad \vec{f}^{(s+1)} = \frac{\vec{y}^{(s+1)}}{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}, \quad (3.3.3)$$

где $\vec{f}_i = col\{f_i^0, f_i^r, f_i^z\}$ и $\|\vec{f}\| = [\sum_i v_i ((f_i^0)^2 + (f_i^r)^2 + (f_i^z)^2)]^{1/2}$. Начальное приближение $\vec{f}^{(0)}$

также предполагается нормированным: $\|\vec{f}^{(0)}\| = 1$. (В качестве $\vec{f}^{(0)}$ можно выбрать, например, $\vec{f}^{(0)} = \vec{y}^{(0)} / \|\vec{y}^{(0)}\|$, где $\vec{y}_i^{(0)} = col\{1, 1, 1\}$.)

Для обращения операторов \hat{G} и \hat{C} (входящих в состав оператора \hat{R}_a), которое сводится к решению 2-х точечных систем вида (3.2.4), используется метод прогонки.

Как показал опыт расчетов, компонента f_i^z собственных векторов, отвечающих минимальному и максимальному собственным значениям оператора \hat{R}_a стремится к нулю и ей можно пренебречь. Соответственно, можно также пренебречь вкладом оператора \hat{E}_z (которому соответствует изолированное собственное значение), положив $\hat{R}_a = \hat{C}\hat{G}^{-1}$.

При использовании AWDD схемы выбор весов WDD схемы уточняется в процессе итераций. Поэтому границы спектра собственных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} должны, вообще говоря, переоцениваться на каждой внутренней итерации n . В этом случае собственные значения и собственные вектора с предыдущей $(n-1)$ -ой внутренней итерации используются как начальное приближение. В итоге, среднее число итераций степенного метода при точности расчета собственных значений $\varepsilon_\lambda = 10^{-3}$ обычно не велико.

Ускорение скорости сходимости степенного метода может быть достигнуто, например, за счет уточнения границ спектра посредством степенного метода со сдвигом спектра. Применительно к конкретному виду оператора \hat{R}_a этот алгоритм был применен в работе [77]. Числен-

ный эксперимент показал, что указанный алгоритм работает достаточно эффективно в том случае, когда имеется хорошее начальное приближение для границ спектра.

3.4. Определение оптимальных параметров ADI алгоритма

После оценки границ собственных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} , для циклического ADI метода с длиной цикла J рассчитываются следующие величины [91]:

$$a = \sqrt{\frac{(\Lambda_r - \lambda_r)(\Lambda_z - \lambda_z)}{(\Lambda_r + \lambda_z)(\Lambda_z + \lambda_r)}}, \quad \eta = \frac{1-a}{1+a}, \quad b = \frac{\Lambda_z + \lambda_r}{\Lambda_r - \lambda_r} a, \quad t = \frac{1-b}{1+b}, \quad r = \frac{\Lambda_z + \Lambda_r b}{1+b}, \quad s = \frac{\Lambda_z - \Lambda_r b}{1+b}, \quad (3.4.1)$$

$$\omega_{r,j} = \frac{r\kappa_j + s}{1+t\kappa_j}, \quad \omega_{z,j} = \frac{r\kappa_j - s}{1-t\kappa_j}, \quad j = 1, 2, \dots, J, \quad (3.4.2)$$

где $\kappa_j = \kappa_j(\eta, J)$ - известная функция [91] (в случае $J = 1$ $\kappa = \sqrt{\eta}$).

Величины $\omega_{r,j}$ и $\omega_{z,j}$ в уравнении (3.4.2) определяют искомые оптимальные значения ADI алгоритма.

Наряду со стандартным ADI алгоритмом с оптимальными параметрами (3.4.1), (3.4.2), рассмотрим также и симметризованный ADI (SADI) алгоритм с $\omega_{r,j} = \omega_{z,j}$, вычисляемыми по формулам (3.4.1), (3.4.2), в которых в качестве λ_r и λ_z используется $\lambda_{min} = \min(\lambda_r, \lambda_z)$, а в качестве Λ_r и Λ_z - $\Lambda_{max} = \max(\Lambda_r, \Lambda_z)$. Такой выбор шагов, как показывает численный эксперимент, часто оказывается полезным при решении гетерогенных задач в тех случаях, когда стандартный ADI алгоритм оказывается неустойчивым или малоэффективным. В качестве мотивации использования SADI отметим, что в гетерогенных задачах границы спектра оцениваются приближенно для усредненных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} . Использование SADI несколько раздвигает эти границы. Кроме того, спектральный анализ устойчивости ADI метода показывает (см. [96], стр. 136), что безусловная устойчивость алгоритма имеет место, вообще говоря, только при $\omega_{r,j} = \omega_{z,j}$.

Теория не дает четких рекомендаций относительно выбора оставшихся "свободных" параметров: длины цикла ADI алгоритма J , критерия и точности сходимости ADI итераций, необходимой точности расчета границ спектра операторов \hat{R} и \hat{Z} и т. д., позволяющих минимизировать время расчета варианта. Проведенное в [50] численное исследование, а также последующее использование алгоритма в практических расчетах, позволили определить значения этих параметров, которые могут быть рекомендованы для практического применения.

Использование KP_1 схемы, естественно, увеличивает стоимость одной внутренней итерации. Кроме того, используемый стандартный вариант KP_1 схемы дополнительно требует приблизительно $18IK$ действительных ячеек памяти для размещения рабочих массивов, где I и K - число пространственных интервалов по переменным r и z , соответственно. Поэтому, основным критерием при оптимизации KP_1 алгоритма являлось не только уменьшение числа внутренних итераций, но и существенное уменьшение полного времени расчета варианта.

Численный эксперимент показал, что использование по-точечного критерия сходимости ADI итераций для каждой из компонент f^0 , f^r и f^z P_1 системы является чрезмерным. Более приемлемым является критерий сходимости вида:

$$\max_{\tilde{i}, \tilde{k}, \alpha} \left| \frac{f_{\tilde{i}, \tilde{k}}^{\alpha, s+1} - f_{\tilde{i}, \tilde{k}}^{\alpha, s}}{f_{\tilde{i}, \tilde{k}}^{\alpha, s+1}} \right| < \varepsilon_{ADI}, \quad f_{\tilde{i}, \tilde{k}}^{\alpha, s} = \sqrt{\sum_{i \in \tilde{i}, k \in \tilde{k}} V_{i,k} (f_{i,k}^{\alpha, s})^2}, \quad \alpha = 0, r, z, \quad (3.4.3)$$

где (\tilde{i}, \tilde{k}) - "грубая" сетка с коэффициентом огрубления N (обычно $N = 4$) по отношению к сетке (i, k) , ε_{ADI} - заданная точность сходимости ADI итераций.

Численный эксперимент также показал, что желательно использовать циклический ADI метод с достаточно большой длиной цикла J (хорошим выбором для большого класса задач является значение $J = 16$) с возрастающей последовательностью κ_j : $\kappa_j < \kappa_{j+1}$. Предложенная в [3] оптимальная последовательность шагов κ_j , которая для случая $J = 9$ имеет вид:

$j = (5, 2, 8, 6, 1, 7, 4, 3, 9)$, как показал численный эксперимент, в силу специфики данной задачи, когда происходит чередование циклического ADI процесса и кинетической части итерации, не дает вычислительного выигрыша. Известно [82, 106], что кинетическая часть итерации хорошо подавляет высокие гармоники в спектре ошибки. Основное назначение P_1 части итерации - это подавление низких гармоник спектра ошибки, что согласуется с выбором критерия сходимости ADI итераций (3.4.3) и вышеуказанной последовательностью шагов в ADI цикле.

Численный эксперимент показал, что при $J \geq 8$ достаточно задать $\varepsilon_{ADI} = 0.5$ для AWDD схемы с корректирующей функцией (1.11.22), (1.11.30) и $\varepsilon_{ADI} = 0.6$ для более "мягких" корректирующих функций (1.11.23), (1.11.24), (1.11.31), (1.11.32). При $J < 8$ следует повысить точность сходимости ADI итераций, например, до $\varepsilon_{ADI} = 0.2$. Использование более высоких точностей ε_{ADI} может лишь незначительно уменьшить число внутренних итераций, но при этом возрастает число ADI итераций и, соответственно, стоимость одной внутренней итерации и полное время расчета.

Численное исследование также показало, что приемлемая точность расчета границ спектра ε_λ составляет 10^{-3} . Дальнейшее повышение точности расчета границ спектра практически не влияет на число ADI итераций. Выход из итерационного цикла происходит либо по достижению заданной точности, либо если число итераций превосходит некоторое предельное значение N_{max}^λ (обычно $N_{max}^\lambda = 300$).

Существуют задачи (обычно это сильно-гетерогенные задачи с наличием пустот), когда выбор $J = 16$ не гарантирует сходимости ADI итераций. Если в некоторой группе стандартный ADI метод оказывается неустойчивым или неэффективным (обычно это происходит в сильно гетерогенных задачах с большими вакуумными (воздушными) пустотами) - число ADI итераций превышает максимально допустимое значение $N_{max}^{ADI} = \max(32, J)$, где J - выбранная длина ADI цикла, то в этой группе осуществляется коррекция выбора шагов ADI алгоритма – сначала путем перехода к SADI с той же длиной цикла J , а в случае повторной неудачи – исходная верхняя граница спектра Λ увеличивается (что бы обеспечить затухание всех имеющихся гармоник ошибки) в $10 \cdot 2^n$ раз, где $n = 1, 2, \dots$ - номер корректировки границ спектра. После корректировки верхней границы спектра SADI итерации продолжают (с использованием ранее полученного приближения для поправок) до сходимости, если не возникает необходимости в дополнительной корректировке. Корректировка верхней границы спектра производится до сходимости SADI итераций, но не более 10 раз, после чего ускорение в группе отключается и используются чистые кинетические итерации.

Как показал опыт расчетов, такая корректировка ("fix-up") границ спектра P_1 оператора обеспечивает быструю сходимость ADI итераций при решении сложных практических задач.

Для предотвращения возможных переполнений целесообразно также осуществлять проверку значения прогоночного коэффициента ξ^0 в уравнениях (3.2.6) и (3.2.12). Если абсолютное значение этого коэффициента в некоторой ячейке существенно больше 1.0 (обычно используется критерий $|\xi^0| > 2.0$), то производятся действия, аналогичные случаю достижения максимального числа ADI итераций N_{max}^{ADI} .

3.5. KP_1 схема ускорения внутренних итераций в x, z и r, ϑ геометриях

Односкоростное уравнение переноса в x, z геометрии имеет вид (1.10.1), где переменные ξ , μ и φ меняются в тех же пределах: $-1 \leq \xi, \mu \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq \pi$, что и в случае r, z геометрии.

Все расчетные формулы KP_1 схемы для x, z геометрии получаются из соответствующих формул для r, z геометрии путем замены:

$$A_{i\pm 1/2} \rightarrow 1, \quad C_i \rightarrow 0, \quad v_i \rightarrow x_{i+1/2} - x_{i-1/2}, \quad M_r \rightarrow 0.$$

Односкоростное уравнение переноса в r, ϑ геометрии имеет вид:

$$\eta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \xi \frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi}(\eta\psi) + \sigma r\psi(r, \vartheta, \mu, \varphi) = rS(r, \vartheta, \mu, \varphi). \quad (3.5.1)$$

С учетом имеющейся в данной геометрии симметрии: $\psi(r, z, \mu, \varphi) = \psi(r, z, -\mu, \varphi)$, единичный вектор направления $\vec{\Omega}$ скорости частицы изменяется в пределах 4-х октантов: $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$, $0 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Предполагается также, что: $0 \leq r_{int} \leq r \leq r_{out}$, $0 \leq \vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_{end} \leq 2\pi$.

Для разностной ячейки $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \times (\vartheta_{k-1/2}, \vartheta_{k+1/2}) \times (\varphi_{l,m-1/2}, \varphi_{l,m+1/2}) \times (\mu_{l-1/2}, \mu_{l+1/2})$ уравнение баланса на $(n+1)$ -ой внутренней итерации имеет вид:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i (\psi_{i,k+1/2,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,k-1/2,l,m}^{n+1/2}) + \Delta \vartheta_k [\xi_{l,m} (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,k,l,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,k,l,m}^{n+1/2}) + \\ & + \frac{C_i}{w_{l,m}} (\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,k,l,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,k,l,m-1/2}^{n+1/2})] + \sigma V_{i,k} \psi_{i,k,l,m}^{n+1/2} = \\ & = V_{i,k} \sum_{p=0}^p \frac{2p+1}{4\pi} \sigma_{s,p} \sum_{q=-p}^p Y_p^q(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{p,i,k}^{q,n} + V_{i,k} F_{i,k,l,m}, \quad p+q=2n, \quad n=0,1,2,\dots, \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

где $V_{i,k} = \Delta \vartheta_k v_i$, а остальные обозначения аналогичны использованным в уравнении (3.1.1).

Первые три сферические гармоники в интеграле рассеяния (3.5.2) имеют вид: $Y_0^0 = 1$, $Y_1^{-1} = \eta$, $Y_1^1 = \xi$.

KP_1 схема в r, ϑ геометрии строится аналогично случаю r, z геометрии с заменой в уравнениях (3.1.7) и (3.1.8) $\mu_l \rightarrow \eta_{l,m}$, $f^z \rightarrow f^\vartheta$, $\hat{L}_z \rightarrow \hat{L}_\vartheta$. Балансные уравнения для определения поправок f^0 , f^r и f^ϑ в этой геометрии имеют вид:

$$\begin{aligned} & \Delta r_i (f_{i,k+1/2}^\vartheta - f_{i,k-1/2}^\vartheta) + \Delta \vartheta_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^r) + \sigma^{00} V_{i,k} f_{i,k}^0 = V_{i,k} Q_{i,k}^0, \\ & \frac{1}{3} \Delta \vartheta_k (A_{i+1/2} f_{i+1/2,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,k}^0) - \frac{1}{3} C_i \Delta \vartheta_k f_{i,k}^0 + (\sigma^{11} V_{i,k} + M_r C_i \Delta \vartheta_k) f_{i,k}^r = V_{i,k} Q_{i,k}^r, \\ & \frac{1}{3} \Delta r_i (f_{i,k+1/2}^0 - f_{i,k-1/2}^0) + (\sigma^{11} V_{i,k} + M_\vartheta C_i \Delta \vartheta_k) f_{i,k}^\vartheta = V_{i,k} Q_{i,k}^\vartheta, \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

где

$$Q_{i,k}^\vartheta = \sigma_{s,1} (\Phi_{i,k}^{\vartheta,n+1/2} - \Phi_{i,k}^{\vartheta,n}), \quad \Phi_{i,k}^\vartheta = \Phi_{i,k}^{-1}, \quad M_\vartheta = \frac{3}{2\pi} \sum_{l,m} \eta_{l,m} (\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^\vartheta - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^\vartheta), \quad (3.5.4)$$

а остальные обозначения определены в уравнениях (3.1.10) и (3.1.11). Величина $\pi_{l,m+1/2}^g$ в (3.5.4) может быть вычислена с помощью рекуррентного соотношения:

$$\pi_{l,m+1/2}^g = (1 + P_{l,m}^\xi) \eta_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^g, \quad \pi_{l,1/2}^g = \eta_{l,1/2} = 0. \quad (3.5.5)$$

Все остальные расчетные формулы для KP_1 схемы в r, g геометрии получаются путем замены в соответствующих формулах из разделов 2 - 4 для r, z геометрии:

$$v_i \rightarrow \Delta r_i, \quad \mu_l \rightarrow \eta_{l,m}, \quad f^z \rightarrow f^g, \quad \Delta z_k \rightarrow \Delta g_k, \quad \omega_z \rightarrow \omega_g,$$

$$\frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} f^z \rightarrow \left(\frac{1}{2} \sigma^{11} V_{i,k} + M_g C_i \Delta g_k \right) f^g, \quad \Sigma_z^{1,1} \rightarrow \Sigma_g^{1,1} = \left(\frac{1}{2} \sigma^{1,1} + \omega_z \right) V + M_g C_i \Delta g_k.$$

3.6. Численные результаты использования согласованной KP_1 схемы в 2D геометрии

В данном подразделе мы приведем некоторые численные результаты, позволяющие оценить эффективность вышеописанного варианта согласованной KP_1 схемы, реализованной в программе КАСКАД-С. Во всех приводимых результатах для внутренних итераций использовался по-точечный критерий сходимости по скалярному потоку $\varepsilon = 10^{-4}$, а также, для сравнения, $(1 - \rho)10^{-4}$, где ρ - спектральный радиус итерационного процесса. Использование последнего критерия обеспечивает достижение заданной точности сходимости итераций $\varepsilon = 10^{-4}$ при наличии медленно сходящегося итерационного процесса [83, 82]. Значение спектрального радиуса оценивалось по следующей формуле [82]:

$$\rho = \frac{\|\epsilon^n\|}{\|\epsilon^{n-1}\|}, \quad \|\epsilon^n\| = \left[\sum_{i,k} (\Phi_{i,k}^n - \Phi_{i,k}^{n-1})^2 \right]^{1/2}. \quad (3.6.1)$$

Кроме того, использовались по-точечный критерий сходимости (3.4.3), с $\varepsilon_{ADI} = 0.2$ и 0.5 для обычных ($J = 1$) и циклических ADI итераций, соответственно (если не оговорен иной критерий сходимости), а также критерий сходимости $\varepsilon_\lambda = 10^{-3}$ при оценке границ собственных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} посредством степенного метода.

При расчете тестовых задач использовались DD схема, шаговая (Step) схема с $P_r = P_z = P_\xi = 0$, а также AWDD схема с параметрами монотонизации по переменным r, z и φ в уравнениях (1.11.29), (1.11.21) и (1.11.33) $b_r = b_z = 2$, $b_\xi = 1$, что соответствует стандартному выбору значения этих параметров для расчетов в двумерной геометрии. Все расчетные времена приведены для PC Pentium-233.

Прежде всего, представим результаты использования KP_1 схемы для расчета двух тестовых задач из работы [98] в r, z геометрии. Геометрия и состав зон для этих задач определены на Рис. 3.6.1 (задача EIR-2) и Рис. 3.6.2 (железо-водная композиция).

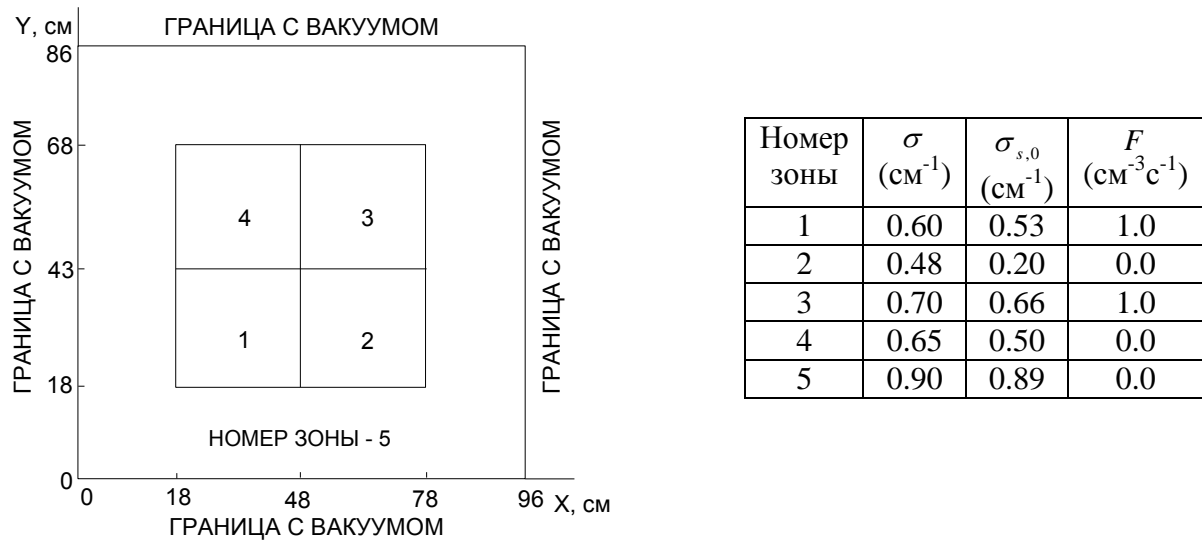


Рисунок 3.6.1. Тестовая задача EIR-2 [98] в x, y геометрии.

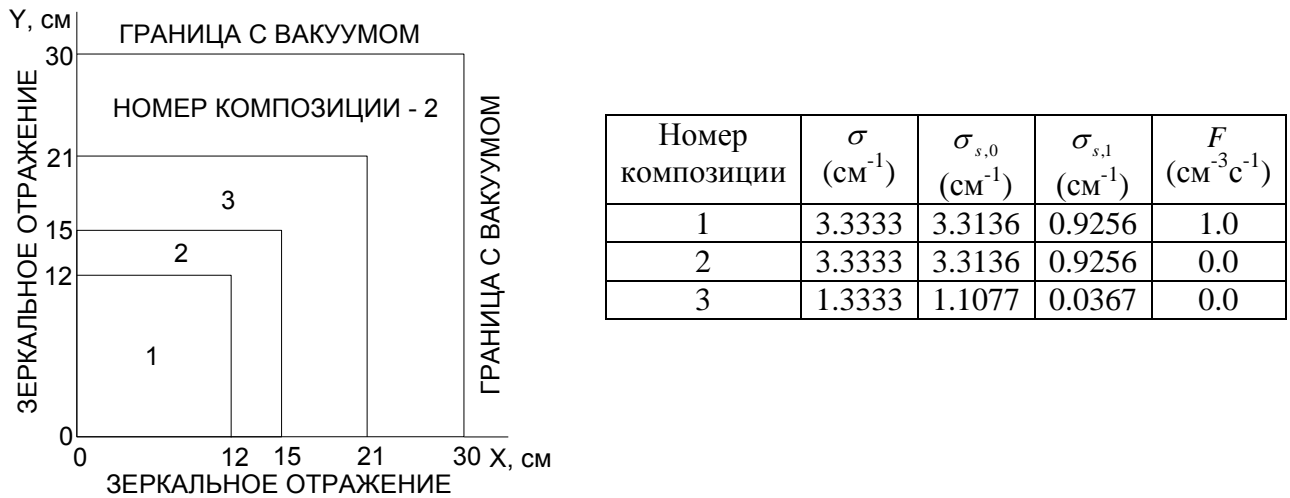


Рисунок 3.6.2. Железо-водная композиция [98, 89] в x, y геометрии

Тестовая *Задача 3* представляет собой тепловую группу для цилиндра из свинца ($\sigma_t = 0.3789$, $\sigma_{s0} = 0.3733$, $\sigma_{s1} = 0.001207$), радиусом 4.5 см и длиной 50.3 см, в котором в области $20.0 < z < 20.3$ имеется вставка слоя из полиэтилена ($\sigma_t = 2.951$, $\sigma_{s0} = 2.932$, $\sigma_{s1} = 0.02939$), толщиной 0.3 см. На нижний торец цилиндра падает перпендикулярно мононаправленный поток нейтронов. В расчетах использовался источник рассеянного излучения первой кратности от этого источника, рассчитанный по аналитическим формулам.

В табл. 3.6.1 приведено число внутренних итераций, требуемое для решения Задач 1-3 в r, z геометрии при использовании KP_1 схемы (в сочетании со стандартным и симметризованным ADI (SADI) алгоритмом для решения P_1 системы для ускоряющих поправок). В этой и последующих таблицах J - длина ADI цикла; в квадратных, круглых и фигурных скобках приведены, соответственно, среднее (по внутренним итерациям) число ADI итераций, процессорное время (сек.) и число внутренних итераций при выполнении критерия сходимости $(1 - \rho)10^{-4}$; индексом b отмечено значение спектрального радиуса сходимости итераций ρ , символом c - отсутствие сходимости ADI итераций. Следует отметить, что замена в Задаче 3 прослойки из полиэтилена на свинец приводит к быстрой сходимости ADI итераций для всех рассматриваемых разностных схем.

Таблица 3.6.1. Число внутренних итераций при решении Задач 1-3 в r, z геометрии

Задача	Метод							
	Без ускорения		J	ε_{ADI}	KP_1			
	DD	AWDD			ADI			SADI
			Step	DD	AWDD	AWDD		
Задача 1, EIR-2 (Рис. 3.6.1), сетка 54×46, S_8P_0	154 (55.2) {173}	139 (78) {160}	1	0.2	5[4.8] (3.2)	10[16.8] (9.8)	10[10.1] (9.8)	10[10.9] (9.8)
	0.883 ^b	0.878	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 ₂ O композиция, (Рис. 3.6.2), сетка 20×20, S_6P_1	1333 (50.9) {2015}	856 (50.4) {1489}	1	0.2	6[4.6] (0.44)	22[8.1] (1.7)	19[18.1] (2.7)	18[20.5] (2.8)
	0.9927	0.9924	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)
Задача 3, Pb-CH ₂ , комп. сетка 13×53, S_8P_1	76 (7.7) {83}	60 (8.3) {68}	1	0.2	6[8.2] (1.3)	[c]	[c]	6[8] (1.9)
	0.7949	0.7933	32	0.5	7[15.7]	[c]	[c]	8[17.1] (2.6)

В табл. 3.6.2 представлено число итераций при решении тестовых Задач 4-6. Длина цикла ADI итераций J при использовании KP_1 схемы была выбрана равной 32. *Задача 4* представляет собой гомогенный изотропно рассеивающий цилиндр радиуса 10 см и высотой 10 см с $\sigma_t = 1.0$ и $\sigma_{s_0} = 0.95$, на нижнем торце которого задано условие зеркального отражения. Предполагается также, что во всей расчетной области имеется внутренний изотропный источник $F = 1.0$. *Задача 5* отличается от задачи 4 наличием анизотропии рассеяния: $\sigma_t = 1.0$, $\sigma_{s_0} = 0.95$, $\sigma_{s_1} = 0.7$. *Задача 6* представляет собой квадратную пространственную область размерами 10см \times 10см с зеркальным отражением на левой и нижней границах, внутренним изотропным источником $F = 1.0$ и сечениями: $\sigma_t = \sigma_{s_0} = 6.0$, $\sigma_{s_1} = 5.0$ и $\sigma_{s_2} = 3.0$, что соответствует Фоккер-Планковскому закону рассеяния:

$$\sigma_{s,0} = 0.5\sigma_{tr}L(L+1), \sigma_{s,l} = \sigma_{s,0} - 0.5\sigma_{tr}l(l+1), l = 1, \dots, L, \sigma_{tr} = 1, \sigma_a = \sigma_t - \sigma_{s,0} = 0 \quad (3.6.2)$$

при $L = 3$. Задачи 4 и 5 решались с пространственной сеткой 30×30 , а Задача 6 - с сеткой 20×20 . Использовалась квадратура S_6 .

Следует отметить, что если в Задаче 5 увеличить первый момент индикатрисы рассеяния σ_{s_1} до значения $\sigma_{s_1} = 0.95$, либо в задаче 6 увеличить порядок L Фоккер-Планковского закона рассеяния, то алгоритм ускорения становится неустойчивым и для его стабилизации необходимо добавить на одну "полную" KP_1 итерацию (с корректировкой трех первых угловых моментов решения) несколько дополнительных итераций с корректировкой только скалярного потока.

Таблица 3.6.2. Число внутренних итераций при решении Задач 4-6

Задача	Гео мет- рия	λ	Метод					
			Без ускорения			KP_1 схема		
			Step	DD	AWDD	Step	DD	AWDD
Задача 4 $\sigma = 1, \sigma_{s,0} = 0.95$	r, z	0	89 (8.2)	94 (7.7)	94 (10.4)	5[5.0] (0.87)	5[6.2] (0.77)	5[5.6] (0.93)
Задача 5 $\sigma = 1, \sigma_{s,0} = 0.95$	r, z	7/3	62 (5.6)	62 (5.2)	62 (6.9)	9[4.1] (1.4)	9[4.7] (1.3)	9[4.0] (1.5)
Задача 5, корректируется только скалярный поток	r, z	7/3				17[2.6] (2.2)	18[2.6] (2.2)	18[2.6] (2.7)

Задача 6, Фоккер-Планковское рассеяние, $L = 3$	x, z	5	1135 (37) {2944}	1384 (42) {3876}	1376 (48) {3846}	23[2] (1.1) {27}	29[2] (1.4) {33}	28[2] (1.5) {35}
Задача 6, полная KP_1 итерация чередуется с кинетической	x, z	5				19[8] (1.1)	35[2] (1.7)	34[2] (1.9)

Приведем далее численные результаты, позволяющие судить об эффективности KP_1 схемы при расчете реальных композиций. В табл. 3.6.3 представлены сравнительные данные по суммарному (по всем группам) числу итераций и времени решения задачи (мин.) при расчете радиационной защиты реактора ВВЭР-440 в r, ϑ геометрии с заданным внутренним источником со спектром деления в активной зоне. Отметим, что в этой задаче имеются существенные воздушные полости. Расчет проводился для сектора симметрии 30° (на границах которого при $\vartheta_0 = 0$ и $\vartheta_{end} = \pi / 6$ задавалось условие зеркального отражения) с использованием AWDD схемы, 22-х группового приближения и $r \times \vartheta$ сетки $51 \times 46 = 2346$ при точности сходимости итераций 10^{-3} и длине ADI цикла $J=32$. При использовании KP_1 схемы в сочетании с циклическими ADI итерациями в группах 11-22 по причине отсутствия сходимости последних либо появления значений прогоночных коэффициентов $|\xi^0| > 1.3$ осуществлялся переход к использованию циклических SADI итераций.

Таблица 3.6.3. Суммарное (по всем группам) числу итераций и время решения задачи (мин.) при расчете радиационной защиты реактора ВВЭР-440 в r, ϑ геометрии

Приближение	Метод		
	Без ускорения	$KP_1 + ADI$	$KP_1 + SADI$
$S_6 P_3$	1377(18.6)	247(7.3)	219 (6.9)
$S_8 P_3$	1379(29.1)	245(7.3)	214(7.7)

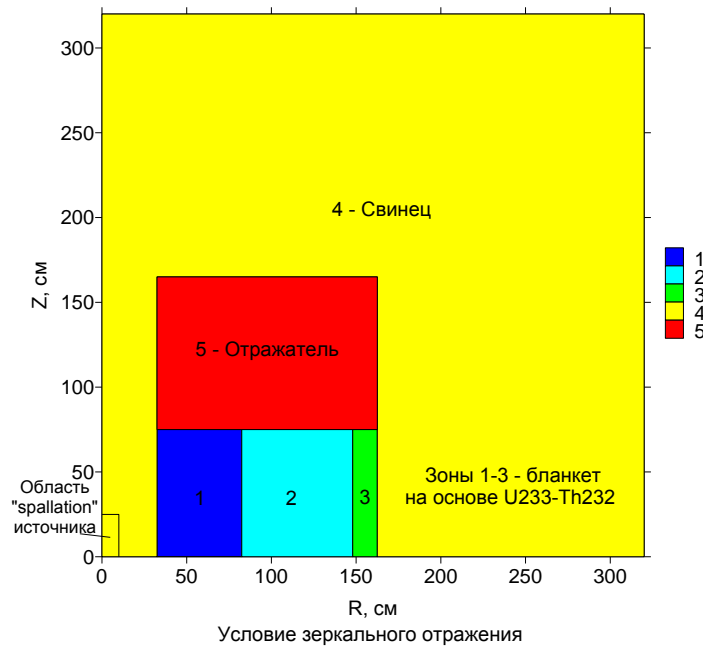
В табл. 3.6.4 представлены сравнительные данные по суммарному (по всем группам) числу итераций и времени расчета (мин.) ADS бенчмарка [104] в r, z геометрии (см. Рис. 3.6.3). Расчет проводился с заданным внутренним источником со спектром в области мишени, характерным для вторичных нейтронов, порождаемых пучком протонов с энергией 1 ГэВ, падающим перпендикулярно на нижний торец мишени из свинца. Данная композиция является подкрити-

ческой с $k_{eff} = 0.9455$. Расчет проводился с использованием AWDD схемы, 28-и группового приближения, пространственной сетки $51 \times 46 = 2346$ и P_5S_6 приближения при точности сходимости внутренних и внешних итераций 10^{-4} и длине ADI цикла $J=64$.

Следует отметить, что так как в рассчитываемой композиции отсутствовал замедлитель, число итераций без ускорения в этой задаче весьма велико для большинства групп. Так как без ускорения итерации в этой задаче сходятся весьма медленно, критерий сходимости 10^{-4} по скалярному потоку в данном случае не гарантирует необходимой точности сходимости итераций и должен быть усилен до $(1 - \rho)10^{-4} \approx 10^{-6}$. Использование же для ускорения внутренних итераций согласованной KP_1 схемы снимает эту проблему.

Таблица 3.6.4. Суммарное (по всем группам) число внутренних итераций и времени расчета (мин.) ADS бенчмарка [104] в r, z геометрии

Номер внешней итерации	Метод			
	Без ускорения		KP_1 схема	
	Суммарное число внутренних итераций	Время (мин.)	Суммарное число внутренних итераций	Время (мин)
0	10053{17920}	74.4	325{336}	3.7
1	9140	204.	311	7.2
2	8512	265.	293	10.4
3	8053	366	288	13.5
4			280	16.5
5			274	19.6
6			270	22.5
-			-	-
71			28	134.0

Рисунок 3.6.3. ADS бенчмарк в r, z геометрии

3.7. Обсуждение результатов

Как показало проведенное тестирование, согласованная KP_1 схема, используемая в сочетании с циклическим ADI методом для решения P_1 системы для ускоряющих поправок и AWDD схемой, работает достаточно стабильно и эффективно в широком классе задач, если для коррекции ADI алгоритма при решении гетерогенных задач используется симметризованный ADI алгоритм. Вместе с тем, проведенное исследование показало, что выбор шагов ADI алгоритма в гетерогенных задачах нуждается в дальнейшей оптимизации.

Результаты использования KP_1 схемы в двумерной геометрии в задачах с существенной ролью анизотропией рассеяния, когда $\sigma_{s,1} \sim \sigma_{s,0}$ (задача 6), представляются не вполне удовлетворительными (см. также замечание в конце раздела 2). Сравнение с аналогичными результатами для KP_1 схемы в задаче с Фоккер-Планковским законом рассеяния в плоской геометрии показало, что число ускоренных итераций в задаче 6 должно быть в 2-3 раза меньше, чем это имеет место (табл. 2) для реализованного варианта KP_1 схемы.

Это обстоятельство, в сочетании с имеющимся опытом использования KP_1 схемы в задачах переноса электронов в одномерных геометриях [74, 75], говорит о необходимости регуляризации алгоритма ускорения для данного класса задач путем использования прямого метода для обращения слабозаполненной матрицы рассеяния, порождаемой сингулярной компонентой

интеграла рассеяния, и использования KP_1 схемы для ускорения итераций по части интеграла рассеяния, порождаемой регулярной компонентой интеграла рассеяния.

Предложенный алгоритм построения согласованной KP_1 схемы и ADI метода для решения P_1 системы для ускоряющих поправок в двумерной геометрии допускает обобщение на случай семейства нодальных WLB-WLD схем 2-4-ого порядка точности.

Глава 4. KP_1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная со взвешенной алмазной схемой, для уравнения переноса в 3D геометриях

Введение

В данной главе, следуя работам [13, 14, 17], нами будет построена KP_1 схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в 3D геометрии, согласованная с WDD схемой. Предлагаемый алгоритм ускорения внутренних итераций, реализованный в 3D S_n программе КАТРИН [58], включенной в пакет программ CNCSN [59, 60], является развитием на случай 3D геометрии KP_1 схемы ускорения внутренних итераций, согласованной с WDD схемой, предложенной ранее в работах [72, 73, 76, 78, 50], рассмотренной выше в Главах 2 и 3 данной работы и реализованной в 1D и 2D S_n программах РОЗ-6.6 [56] и КАСКАД-С [57] из пакета CNCSN. В данной работе описывается версия алгоритма, прошедшая отработку при решении практических задач, в том числе, с использованием практически важного случая периодических граничных условий [16, 17]. Построение KP_1 схемы ускорения мы проведем на примере уравнения переноса в r, ϑ, z геометрии. Изменения в алгоритме для случая x, y, z геометрии будут также указаны.

Последовательность изложения в данной главе следующая. В разделе 4.1 рассмотрено построение согласованной KP_1 схемы ускорения на примере уравнения переноса в r, ϑ, z геометрии. В разделе 4.2 сформулирован МР для решения P_1 системы для поправок, включая метод прогонки для решения вспомогательных 2-х точечных уравнений (обычный и циклический). В разделе 4.3 рассмотрен алгоритм оценки границ спектра радиальной (\hat{R}), азимутальной ($\hat{\Theta}$) и аксиальной (\hat{Z}) компонент P_1 оператора, которые используются для выбора шагов метода расщепления. В разделе 4.4 рассмотрен вопрос о выборе итерационных параметров циклического метода расщепления, а также предложен алгоритм коррекции этих параметров, обеспечивающий сходимость итераций при решении сложных гетерогенных задач. В разделе 4.5 указаны изменения, которые нужно внести в алгоритм ускорения для случая x, y, z геометрии. В разделе 4.6 представлены численные результаты использования KP_1 схемы ускорения при решении типичных задач переноса излучения в трехмерной геометрии.

4.1. Построение KP_1 схемы ускорения внутренних итераций в r, ϑ, z геометрии

Перепишем уравнение баланса (1.11.3) и систему дополнительных уравнений WDD схемы (1.11.5) в r, ϑ, z геометрии на $(n+1)$ -ой внутренней итерации в более удобном для последующего изложения виде:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k (\psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{n+1/2}) + \mu_l v_i \Delta \vartheta_j (\psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{n+1/2}) + \\ & + \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left[\xi_{l,m} \left(A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} \right) + \frac{C_i}{w_{l,m}} \left(\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{n+1/2} \right) \right] + \\ & + \sigma_i V_{i,j,k} \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = V_{i,j,k} \sum_{\kappa=0}^{\kappa} \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa} \sum_{v=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^v(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{v,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m}, \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = a_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} + (1 - a_{i,j,k,l,m}^{n+1/2}) \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{n+1/2}, \quad a = \begin{cases} 1/(1+P_r), & \xi > 0 \\ P_r/(1+P_r), & \xi < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (4.1.2)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = b_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{n+1/2} + (1 - b_{i,j,k,l,m}^{n+1/2}) \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{n+1/2}, \quad b = \begin{cases} 1/(1+P_g), & \eta > 0 \\ P_g/(1+P_g), & \eta < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_g \leq 1, \quad (4.1.3)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = c_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{n+1/2} + (1 - c_{i,j,k,l,m}^{n+1/2}) \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{n+1/2}, \quad c = \begin{cases} 1/(1+P_z), & \mu > 0 \\ P_z/(1+P_z), & \mu < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_z \leq 1, \quad (4.1.4)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{n+1/2} = (1 + P_{\xi}) \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} - P_{\xi} \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} d_{m'}^{l,m} \psi_{i,j,k,l,m'}^{n+1/2}, \quad 0 \leq P_{\xi} \leq 1. \quad (4.1.5)$$

К системе уравнений (4.1.1)-(4.1.5) следует также добавить граничные условия при

$$r = r_{1/2} = r_{\text{int}} \geq 0, \quad r = r_{i+1/2} = r_{\text{ext}}, \quad \vartheta = \vartheta_{1/2} = \vartheta_0, \quad \vartheta = \vartheta_{J+1/2} = \vartheta_{\text{end}}, \quad z = z_{1/2} = z_{\text{bot}}, \quad z = z_{K+1/2} = z_{\text{top}} :$$

$$\begin{aligned} \psi_{1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{\text{int}} + \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{int}} \psi_{1/2,j,k,l',m'}^{n+1/2}, \quad \xi_{l,m} > 0, \\ \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{\text{ext}} + \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \psi_{i+1/2,j,k,l',m'}^n, \quad \xi_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

$$\begin{aligned} \psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^0 + \sum_{\eta_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^0 \psi_{i,1/2,k,l',m'}^{n+1/2}, \quad \eta_{l,m} > 0, \\ \psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{\text{end}} + \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n, \quad \eta_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,j,l,m}^{\text{bot}} + \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{bot}} \psi_{i,j,1/2,l',m'}^{n+1/2}, \quad \mu_l > 0, \\ \psi_{i,j,K+1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,j,l,m}^{\text{top}} + \sum_{\mu_{l'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{top}} \psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^n, \quad \mu_l < 0, \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

При использовании периодических граничных условий, например, по переменной ϑ , что имеет место при наличии поворотной симметрии для сектора симметрии $(\vartheta_0, \vartheta_{\text{end}})$, граничные условия (4.1.7) заменяются следующими:

$$\psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1/2} = \psi_{i,J+1/2,k,l,m}^n, \quad \eta_{l,m} > 0,$$

$$\psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{n+1/2} = \psi_{i,1/2,k,l,m}^n, \quad \eta_{l,m} < 0, \quad (4.1.9)$$

Для расчета весовых коэффициентов P_r , P_g , P_z и P_ξ в дополнительных WDD уравнениях (4.1.2)-(4.1.5) в программе используется адаптивная WDD (AWDD) схема [6, 4, 11, 12], которая определяет эти веса в результате оценки градиентов решения по каждой из переменных. AWDD схема обеспечивает положительность и приемлемый (регулируемый) уровень монотонности разностного решения с сохранением достаточно высокой точности расчета интегральных величин, не препятствует сходимости внутренних итераций.

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

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,j,k}^r + 3\eta_{l,m} f_{i,j,k}^g + 3\mu_l f_{i,j,k}^z \right), \\ \psi_{i,\pm 1/2,j,k,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,\pm 1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,\pm 1/2,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,\pm 1/2,j,k}^r \right), \\ \psi_{i,j,\pm 1/2,k,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,j,\pm 1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,\pm 1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,j,\pm 1/2,k}^g \right), \\ \psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{n+1} &= \psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k\pm 1/2}^0 + 3\mu_l f_{i,j,k\pm 1/2}^z \right). \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Для получения системы уравнений для определения ускоряющих поправок f^0 , f^r , f^g и f^z воспользуемся следующей процедурой, близкой к “4-step” процедуре Ларсена [71, 64] (см. также [74]). Прежде всего, подействуем на уравнение баланса (1.11.3) операторами проектирования \hat{L}_0 , \hat{L}_r , \hat{L}_g и \hat{L}_z :

$$\begin{aligned} \hat{L}_0 \psi &= \sum_{l,m} w_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}, \quad \hat{L}_r \psi = \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}, \quad \hat{L}_g \psi = \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}, \\ \hat{L}_z \psi &= \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l \psi_{i,j,k,l,m}, \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

где интегрирование производится по восьми октантам. В предположении, что используемая квадратура достаточно точно интегрирует соответствующие сферические гармоники, получим:

$$\begin{aligned} \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^g - f_{i,j-1/2,k}^g \right) + v_i \Delta g_j \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right) + \Delta z_k \Delta g_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^r \right) + \\ + \sigma^{00} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^0 = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^0, \\ \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta g_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^0 \right) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta g_j f_{i,j,k}^0 + \\ + \left(\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_r C_i \Delta z_k \Delta g_j \right) f_{i,j,k}^r = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^r, \\ \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) + \left(\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_g C_i \Delta z_k \Delta g_j \right) f_{i,j,k}^g = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^g, \end{aligned}$$

$$\frac{1}{3}v_i\Delta g_j(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0) + \sigma^{11}V_{i,j,k}f_{i,j,k}^z = V_{i,j,k}Q_{i,j,k}^z, \quad (4.1.12)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{i,j,k}^0 &= \sigma_{s,0}(\Phi_{i,j,k}^{0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{0,n}), \quad Q_{i,j,k}^r = \sigma_{s,1}(\Phi_{i,j,k}^{r,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{r,n}), \quad Q_{i,j,k}^g = \sigma_{s,1}(\Phi_{i,j,k}^{g,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{g,n}), \\ Q_{i,j,k}^z &= \sigma_{s,1}(\Phi_{i,j,k}^{z,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{z,n}), \quad \sigma^{00} = \sigma - \sigma_{s,0}, \quad \sigma^{11} = \sigma - \sigma_{s,1}, \\ \Phi_{i,j,k}^0 &\equiv \Phi_{0,i,j,k}^0, \quad \Phi_{i,j,k}^r \equiv \Phi_{1,i,j,k}^1, \quad \Phi_{i,j,k}^g \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{-1}, \quad \Phi_{i,j,k}^z \equiv \Phi_{1,i,j,k}^0, \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

$$M_r = \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} \xi_{l,m} (\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^r - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^r), \quad M_g = \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} \eta_{l,m} (\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^g - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^g). \quad (4.1.14)$$

Величины $\pi_{l,m\pm 1/2}^r$, $\pi_{l,m\pm 1/2}^g$ в (4.1.14) могут быть вычислены с помощью следующих рекуррентных соотношений:

$$\begin{aligned} \pi_{l,m+1/2}^r &= (1 + P_{l,m}^\xi) \xi_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^r, \quad \pi_{l,1/2}^r = \xi_{l,1/2}, \\ \pi_{l,m+1/2}^g &= (1 + P_{l,m}^\xi) \eta_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^g, \quad \pi_{l,1/2}^g = \eta_{l,1/2} = 0. \end{aligned} \quad (4.1.15)$$

В систему из четырех уравнений (4.1.12) входит десять неизвестных величин: $f_{i,j,k}^0$, $f_{i,j,k}^r$, $f_{i,j,k}^g$, $f_{i,j,k}^z$, $f_{i\pm 1/2,j,k}^0$, $f_{i\pm 1/2,j,k}^r$, $f_{i,j\pm 1/2,k}^0$, $f_{i,j\pm 1/2,k}^g$, $f_{i,j,k\pm 1/2}^0$ и $f_{i,j,k\pm 1/2}^z$. Для замыкания системы (4.1.12) к ней необходимо добавить шесть дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные уравнения можно получить из естественного требования [74] инвариантности системы (4.1.12) при заменах в уравнении баланса (1.11.3):

$$\psi \rightarrow a\psi_{i+1/2} + (1-a)\psi_{i-1/2}, \quad \psi \rightarrow b\psi_{j+1/2} + (1-b)\psi_{j-1/2}, \quad \psi \rightarrow c\psi_{k+1/2} + (1-c)\psi_{k-1/2}. \quad (4.1.16)$$

Если используемая квадратура достаточно точна, то полученные таким образом соотношения совпадают с теми, которые получаются применением операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_r к уравнению (4.1.2), операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_g к уравнению (4.1.3) и операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_z к уравнению (4.1.4) (как это рекомендуется в “4-step” процедуре Ларсена [71, 64]):

$$\begin{aligned} f_{i,j,k}^0 &= A_{i,j,k}^0 f_{i+1/2,j,k}^0 + (1 - A_{i,j,k}^0) f_{i-1/2,j,k}^0 + A_{i,j,k}^1 (f_{i+1/2,j,k}^r - f_{i-1/2,j,k}^r), \\ f_{i,j,k}^r &= A_{i,j,k}^2 f_{i+1/2,j,k}^r + (1 - A_{i,j,k}^2) f_{i-1/2,j,k}^r + A_{i,j,k}^1 (f_{i+1/2,j,k}^0 - f_{i-1/2,j,k}^0)/3, \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

$$\begin{aligned} f_{i,j,k}^0 &= B_{i,j,k}^0 f_{i,j+1/2,k}^0 + (1 - B_{i,j,k}^0) f_{i,j-1/2,k}^0 + B_{i,j,k}^1 (f_{i,j+1/2,k}^g - f_{i,j-1/2,k}^g), \\ f_{i,j,k}^g &= B_{i,j,k}^2 f_{i,j+1/2,k}^g + (1 - B_{i,j,k}^2) f_{i,j-1/2,k}^g + B_{i,j,k}^1 (f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0)/3, \end{aligned} \quad (4.1.18)$$

$$\begin{aligned} f_{i,j,k}^0 &= C_{i,j,k}^0 f_{i,j,k+1/2}^0 + (1 - C_{i,j,k}^0) f_{i,j,k-1/2}^0 + C_{i,j,k}^1 (f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z), \\ f_{i,j,k}^z &= C_{i,j,k}^2 f_{i,j,k+1/2}^z + (1 - C_{i,j,k}^2) f_{i,j,k-1/2}^z + C_{i,j,k}^1 (f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0)/3, \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

где

$$\begin{aligned}
A_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} a_{i,j,k,l,m}, & A_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} a_{i,j,k,l,m}, & A_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m}^2 a_{i,j,k,l,m}, \\
B_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} b_{i,j,k,l,m}, & B_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} b_{i,j,k,l,m}, & B_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m}^2 b_{i,j,k,l,m}, \\
C_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} c_{i,j,k,l,m}, & C_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_{l,m} c_{i,j,k,l,m}, & C_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_{l,m}^2 c_{i,j,k,l,m}.
\end{aligned} \quad (4.1.20)$$

Для получения граничных условий для P_1 системы для ускоряющих поправок воспользуемся следующей процедурой, обобщающей использованную ранее для случая одномерных [72, 73] и двумерных [50] геометрий. Домножим уравнения (4.1.6), определяющие закон отражения при $r = r_{\text{int}}$ и $r = r_{\text{ext}}$, на $w_{l,m} \xi_{l,m}$ и просуммируем их по направлениям $\xi_{l,m} > 0$ и $\xi_{l,m} < 0$, соответственно. С учетом вида поправок (4.1.10), получим:

$$l_0^r f_{1/2,j,k}^0 + 3l_1^r f_{1/2,j,k}^r = 0, \quad m_0^r f_{1+1/2,j,k}^0 + 3m_1^r f_{1+1/2,j,k}^r = \lambda_{j,k}^r, \quad (4.1.21)$$

где

$$\begin{aligned}
l_p^r &= \sum_{\xi_{l,m} > 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \left(\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{int}} \right), & m_p^r &= \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \left(\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \right), \\
p &= 0, 1, & \lambda_{j,k}^r &= 4\pi \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \left(\psi_{1+1/2,j,k,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{1+1/2,j,k,l',m'}^n \right).
\end{aligned} \quad (4.1.22)$$

Для определения граничных условий для поправок на границах $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0$ и $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{\text{end}}$ домножим уравнения (4.1.7), определяющие закон отражения на этих границах, на $w_{l,m} \eta_{l,m}$ и просуммируем их по направлениям $\eta_{l,m} > 0$ и $\eta_{l,m} < 0$, соответственно. С учетом вида поправок (4.1.10), получим:

$$l_0^\mathcal{G} f_{i,1/2,k}^0 + 3l_1^\mathcal{G} f_{i,1/2,k}^\mathcal{G} = 0, \quad m_0^\mathcal{G} f_{i,J+1/2,k}^0 + 3m_1^\mathcal{G} f_{i,J+1/2,k}^\mathcal{G} = \lambda_{i,k}^\mathcal{G}, \quad (4.1.23)$$

где

$$\begin{aligned}
l_p^\mathcal{G} &= \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\eta_{l,m}^p - \sum_{\eta_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \eta_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^0 \right), & m_p^\mathcal{G} &= \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\eta_{l,m}^p - \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \eta_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \right), \\
p &= 0, 1, & \lambda_{i,k}^\mathcal{G} &= 4\pi \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \left(\psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n \right).
\end{aligned} \quad (4.1.24)$$

При использовании по переменной \mathcal{G} периодических граничных условий, применяя аналогичную процедуру к уравнениям (4.1.9), получим:

$$\begin{aligned}
l_0^\mathcal{G} \left(f_{i,1/2,k}^0 - f_{i,J+1/2,k}^0 \right) + 3l_1^\mathcal{G} \left(f_{i,1/2,k}^\mathcal{G} - f_{i,J+1/2,k}^\mathcal{G} \right) &= \lambda_{i,k}^{\mathcal{G},\text{end}}, \\
m_0^\mathcal{G} \left(f_{i,J+1/2,k}^0 - f_{i,1/2,k}^0 \right) + 3m_1^\mathcal{G} \left(f_{i,J+1/2,k}^\mathcal{G} - f_{i,1/2,k}^\mathcal{G} \right) &= \lambda_{i,k}^{\mathcal{G},0},
\end{aligned} \quad (4.1.25)$$

где

$$l_p^{\mathcal{G}} = \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \eta_{l,m}^p, \quad m_p^{\mathcal{G}} = \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \eta_{l,m}^p, \quad p = 0, 1,$$

$$\lambda_{i,k}^{\mathcal{G},0} = 4\pi \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\psi_{i,1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{i,1/2,k,l',m'}^n \right), \quad \lambda_{i,k}^{\mathcal{G},end} = 4\pi \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n \right).$$
(4.1.26)

Для определения граничных условий для поправок на границах $z = z_{bot}$ и $z = z_{top}$ домножим уравнения (4.1.8), определяющие закон отражения на этих границах, на $w_{l,m} \mu_l$ и просуммируем их по направлениям $\mu_l > 0$ и $\mu_l < 0$, соответственно. С учетом вида поправок (4.1.10), получим:

$$l_0^z f_{i,j,1/2}^0 + 3l_1^z f_{i,j,1/2}^z = 0, \quad m_0^z f_{i,j,K+1/2}^0 + 3m_1^z f_{i,j,K+1/2}^z = \lambda_{i,j}^z, \quad (4.1.27)$$

где

$$l_p^z = \sum_{\mu_l > 0} w_{l,m} \mu_l \left(\mu_l^p - \sum_{\mu_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{bot} \right), \quad m_p^z = \sum_{\mu_l < 0} w_{l,m} \mu_l \left(\mu_l^p - \sum_{\mu_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{top} \right),$$

$$p = 0, 1, \quad \lambda_{i,k}^z = 4\pi \sum_{\mu_l < 0} w_{l,m} \mu_l \sum_{\mu_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{top} \left(\psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^{n+1/2} - \psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^n \right).$$
(4.1.28)

Следует отметить, что в уравнениях (4.1.21), (4.1.23), (4.1.25) и (4.1.27) величины $\lambda_{j,k}^r$, $\lambda_{i,k}^{\mathcal{G}}$, $\lambda_{i,k}^{\mathcal{G},0}$, $\lambda_{i,k}^{\mathcal{G},end}$ и $\lambda_{i,j}^z$ стремятся к нулю по мере сходимости итераций. По этой причине возможно использование также и упрощенных граничных условий на границах $r = r_{ext}$, $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0$, $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{end}$ и $z = z_{top}$, отличающихся от вышеприведенных тем, что правые части в них полагаются равными нулю:

$$\lambda_{j,k}^r = \lambda_{i,k}^{\mathcal{G}} = \lambda_{i,j}^z = 0, \quad \lambda_{i,k}^{\mathcal{G},0} = \lambda_{i,k}^{\mathcal{G},end} = 0. \quad (4.1.29)$$

В частности, условия поворотной симметрии (4.1.25) по переменной \mathcal{G} приобретают вид:

$$f_{i,1/2,k}^0 = f_{i,J+1/2,k}^0, \quad f_{i,1/2,k}^{\mathcal{G}} = f_{i,J+1/2,k}^{\mathcal{G}}. \quad (4.1.30)$$

Использование упрощенных граничных условий, в свою очередь, позволяет упростить постановку граничных условий в методе расщепления (которому посвящен следующий раздел), используемому для нахождения решения KP_1 системы для ускоряющих поправок.

Учитывая, что в 2D и 3D геометриях в задачах с существенной ролью анизотропии рассеяния, когда выполняется неравенство (3.1.21), сходимость KP_1 схемы нарушается [3, 103], для обеспечения сходимости KP_1 схемы в задачах переноса нейтрального излучения нами используется следующий простой прием [76, 78, 50]: на четных внутренних итерациях ускоряющая коррекция, в соответствии с (4.1.10) производится для четырех угловых моментов решения, включая нулевой, на нечетных – только для скалярного потока. Ясно, что такое решение не яв-

ляется оптимальным, но оно обеспечивает сходимость KP_1 схемы для широкого класса практических задач.

4.2. Алгоритм решения P_1 системы для ускоряющих поправок в r, ϑ, z геометрии

P_1 система для ускоряющих поправок для KP_1 схемы в r, ϑ, z геометрии состоит из четырех балансных уравнений (4.1.12), шести дополнительных уравнений (4.1.17)-(4.1.19) и граничных условий (4.1.21)-(4.1.28). Эта система может быть решена итерационно с использованием, например, метода расщепления (MP) [3, 105]. Следует отметить, что ADI метод, успешно использованный в работе [50] и главе 3 для решения P_1 системы в случае 2D геометрии, становится условно устойчивым при попытке его обобщения на случай 3D геометрии [105].

В соответствии с общим подходом MP [3, 105], оператор P_1 системы для ускоряющих поправок

$$\hat{A}f = q \quad (4.2.1)$$

\hat{A} представляется в виде суммы:

$$\hat{A} = \hat{R} + \hat{\Theta} + \hat{Z} \quad (4.2.2)$$

где \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} - компоненты оператора \hat{A} , определяющие изменение решения P_1 системы по переменным r , ϑ и z , соответственно. Более подробно о структуре операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} будет сказано ниже. Предположим, также, что указанные операторы являются положительно определенными. В MP сложился следующий конструктивный способ построения итерационной схемы. Для приближенного решения уравнения (4.2.1) рассмотрим неявную двухслойную итерационную схему вида [3, 105]:

$$B_{s+1} \frac{f^{s+1} - f^s}{\tau_{s+1}} + Af^s = q, \quad B_s = (E + \tau_r^{(s)} \hat{R})(E + \tau_\vartheta^{(s)} \hat{\Theta})(E + \tau_z^{(s)} \hat{Z}), \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (4.2.3)$$

Здесь τ_{s+1} , $\tau_\alpha^{(s+1)}$, $\alpha = r, \vartheta, z$ - итерационные параметры, B - регуляризирующий оператор, s - номер итерации. Если операторы \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} коммутируют, имеют положительные собственные значения и итерационные параметры не зависят от номера итерации s , то достаточным условием сходимости итерационного процесса (4.2.3) является выполнение неравенства [3, 105]:

$$2\tau_\alpha \geq \tau > 0, \quad \alpha = r, \vartheta, z. \quad (4.2.4)$$

Стандартный выбор параметров $\tau_\alpha = \tau / 2$ обеспечивает второй порядок аппроксимации по времени [105], если рассматривать итерационный процесс (4.2.3), как решение на установление нестационарной задачи:

$$\partial f / \partial t + Af = q. \quad (4.2.5)$$

Наряду с параметрами τ_α введем также величины $\omega_\alpha^{(s)} \equiv 1/\tau_\alpha^{(s)}$. Используя эти величины перепишем уравнение (4.2.3) в виде:

$$\tilde{B}_{s+1} \frac{f^{s+1} - f^s}{\tilde{\tau}_{s+1}} + Af^s = q, \quad \tilde{B}_s = (\omega_z^{(s)} E + \hat{R})(\omega_g^{(s)} E + \hat{\Theta})(\omega_r^{(s)} E + \hat{Z}), \quad \tilde{\tau}_{s+1} = \tau_{s+1} \omega_r^{(s+1)} \omega_g^{(s+1)} \omega_z^{(s+1)},$$

$$s = 0, 1, 2, \dots \quad (4.2.6)$$

Отметим, что при $\tau_\alpha^{(s)} = \tau^{(s)} / 2$ величина $\tilde{\tau}_s = 2\omega_s^2$. Схема реализации алгоритма (4.2.6) имеет следующий вид [105, 3, 91]:

$$\begin{aligned} (\omega_r^{(s+1)} E + \hat{R}) \zeta^{s+1/3} &= q - Af^s, & (\omega_g^{(s+1)} E + \hat{\Theta}) \zeta^{s+2/3} &= \zeta^{s+1/3}, \\ (\omega_z^{(s+1)} E + \hat{Z}) \zeta^{s+1} &= \zeta^{s+2/3}, & f^{s+1} &= f^s + \tilde{\tau}_{s+1} \zeta^{s+1}. \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Следует подчеркнуть, что исключая из оператора \hat{A} с помощью дополнительных уравнений (4.1.17)-(4.1.19) и граничных условий (4.1.21), (4.1.23) и (4.1.27) поправки, относящиеся к граням ячеек, можно представить его в виде, в котором присутствуют только значения поправок, отнесенные к центру ячейки. Соответственно, в (4.2.7) можно считать, что единичный оператор \hat{E} действует только на поправки, отнесенные к центру ячейки.

Учитывая вид поправок (4.1.10), используемых в KP_1 алгоритме, и применяя трехшаговую процедуру метода расщепления (4.2.7), получим следующую систему для поправок на 1-ом шаге $\tau_r^{(s+1)}$:

$$\begin{aligned} V_{i,j,k} \omega_r^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{0,s+1/3} + \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j (A_{i+1/2} \zeta_{i+1/2,j,k}^{r,s+1/3} - A_{i-1/2} \zeta_{i-1/2,j,k}^{r,s+1/3}) + \frac{1}{3} \sigma^{00} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{0,s+1/3} &= V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^0 - \\ - \Delta r_i \Delta z_k (f_{i,j+1/2,k}^{g,s} - f_{i,j-1/2,k}^{g,s}) - v_i \Delta \mathcal{G}_j (f_{i,j,k+1/2}^{z,s} - f_{i,j,k-1/2}^{z,s}) - \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j (A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^{r,s} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^{r,s}) &- \\ - \sigma^{00} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^{0,s}, \\ V_{i,j,k} \omega_r^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{r,s+1/3} + \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j (A_{i+1/2} \zeta_{i+1/2,j,k}^{0,s+1/3} - A_{i-1/2} \zeta_{i-1/2,j,k}^{0,s+1/3}) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j \zeta_{i,j,k}^{0,s+1/3} &+ \\ + \left(\frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} + M_r C_i \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j \right) \zeta_{i,j,k}^{r,s+1/3} = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^r - \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j (A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^{0,s} - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^{0,s}) &+ \\ + \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j f_{i,j,k}^{0,s} - (\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_r C_i \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j) f_{i,j,k}^{r,s}, \\ V_{i,j,k} \omega_r^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{g,s+1/3} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{g,s+1/3} &= \\ = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^g - \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k (f_{i,j+1/2,k}^{0,s} - f_{i,j-1/2,k}^{0,s}) - (\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_g C_i \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j) f_{i,j,k}^{g,s}, \\ V_{i,j,k} \omega_r^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{z,s+1/3} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{z,s+1/3} = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^z - \frac{1}{3} v_i \Delta \mathcal{G}_j (f_{i,j,k+1/2}^{0,s} - f_{i,j,k-1/2}^{0,s}) - \sigma^{11} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^{z,s}. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

Отметим, что в системе уравнений (4.2.8) и ниже, как и в реализациях ADI алгоритма [50, 97], используется симметричная декомпозиция членов $\sim \sigma^{00}$ и σ^{11} по операторам \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} (шагам $\tau_r^{(s+1)}$, $\tau_g^{(s+1)}$ и $\tau_z^{(s+1)}$). Это позволяет сохранить вид операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} подобным виду P1 оператора для ускоряющих поправок в одномерной геометрии [73].

Далее мы будем говорить, что величина относится к слою s , $s+1/3$ и т. д., если она имеет соответствующий индекс. Следует отметить, что в рассматриваемом нами случае 3D геометрии величины ζ для дробных шагов $s+1/3$ и $s+2/3$ не аппроксимируют исходную нестационарную задачу (4.2.5) [96]. Для получения граничных условий по радиальной переменной для поправок ζ отметим, что из граничных условий (4.1.21) для величин f в предположении (4.1.29), а также уравнения (4.2.7) следует, что:

$$\begin{aligned} l_0^r \zeta_{1/2,j,k}^{0,s+1/3} + 3l_1^r \zeta_{1/2,j,k}^{r,s+1/3} &= -l_0^r f_{1/2,j,k}^{0,s} - 3l_1^r f_{1/2,j,k}^{r,s}, \\ m_0^r \zeta_{1+1/2,j,k}^{0,s+1/3} + 3m_1^r \zeta_{1+1/2,j,k}^{r,s+1/3} &= -m_0^r f_{1+1/2,j,k}^{0,s} - 3m_1^r f_{1+1/2,j,k}^{r,s}, \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

Учитывая, что на шаге $s=0$ поправки f равны нулю, а на последующих шагах граничные соотношения для поправок f выполняются точно, можно считать, что:

$$l_0^r \zeta_{1/2,j,k}^{0,s+1/3} + 3l_1^r \zeta_{1/2,j,k}^{r,s+1/3} = 0, \quad m_0^r \zeta_{1+1/2,j,k}^{0,s+1/3} + 3m_1^r \zeta_{1+1/2,j,k}^{r,s+1/3} = 0, \quad (4.2.10)$$

Система (4.2.8), дополненная двумя дополнительными уравнениями для величин $\zeta^{s+1/3}$, аналогичным (4.1.17), а также граничными условиями (4.2.9), может быть решена методом прогонки по переменной r в предположении, что величины с индексом s известны с предыдущего шага.

Исключая из первых двух уравнений системы (4.2.8) величины $\zeta_{i,j,k}^{0,s+1/3}$ и $\zeta_{i,j,k}^{r,s+1/3}$ посредством дополнительных уравнений (4.1.17) (отнесенных к слою $s+1/3$), получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $\zeta_{i\pm 1/2,j,k}^{0,s+1/3}$ и $\zeta_{i\pm 1/2,j,k}^{r,s+1/3}$:

$$\zeta_{i+1/2,j,k}^{0,s+1/3} a_{i,j,k}^{r,\alpha} + \zeta_{i-1/2,j,k}^{0,s+1/3} b_{i,j,k}^{r,\alpha} + \zeta_{i+1/2,j,k}^{r,s+1/3} c_{i,j,k}^{r,\alpha} + \zeta_{i-1/2,j,k}^{r,s+1/3} d_{i,j,k}^{r,\alpha} = q_{i,j,k}^{r,\alpha}, \quad \alpha = 0, r, \quad (4.2.11)$$

где

$$a^{r,0} = \Sigma_r^{00} A_0, \quad b^{r,0} = \Sigma_r^{00} (1 - A_0), \quad c^{r,0} = A_{i+1/2} \Delta z \Delta \vartheta + \Sigma_r^{00} A_1, \quad d^{r,0} = -A_{i-1/2} \Delta z \Delta \vartheta - \Sigma_r^{00} A_1,$$

$$\Sigma_r^{00} = V \left(\frac{1}{3} \sigma^{00} + \omega_r \right),$$

$$q^{r,0} = V Q^0 - \Delta r \Delta z (f_{j+1/2}^{g,s} - f_{j-1/2}^{g,s}) - \nu \Delta \vartheta (f_{k+1/2}^{z,s} - f_{k-1/2}^{z,s}) - \Delta z \Delta \vartheta (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^{r,s} - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^{r,s}) - \sigma^{00} V f^{0,s},$$

$$a^{r,r} = \left[(A_{i+1/2} - C A_0) \Delta z \Delta \vartheta + \tilde{\Sigma}_r^{11} A_1 \right] / 3, \quad b^{r,r} = - \left[(A_{i-1/2} + C (1 - A_0)) \Delta z \Delta \vartheta + \tilde{\Sigma}_r^{11} A_1 \right] / 3,$$

$$c^{r,r} = -C \Delta z \Delta \vartheta A_1 / 3 + \tilde{\Sigma}_r^{11} A_2, \quad d^{r,r} = C \Delta z \Delta \vartheta A_1 / 3 + \tilde{\Sigma}_r^{11} (1 - A_2),$$

$$\tilde{\Sigma}_r^{11} = \Sigma_r^{11} + CM_r \Delta z \Delta \vartheta, \quad \Sigma_r^{11} = V \left(\frac{1}{3} \sigma^{11} + \omega_r \right),$$

$$q^{r,r} = VQ^r - \frac{1}{3} \Delta z \Delta \vartheta (A_{i+1/2} f_{i+1/2}^{0,s} - A_{i-1/2} f_{i-1/2}^{0,s}) + \frac{1}{3} C \Delta z \Delta \vartheta f^{0,s} - (\sigma^{11} V + M_r C \Delta z \Delta \vartheta) f^{r,s}. \quad (4.2.12)$$

Для каждой плоскости (j, k) система (4.2.11)-(4.2.12) решается методом прогонки [91, 3, 72, 73], рассмотренным в разделе 2.2:

$$\zeta_{i+1/2}^0 = \xi_i^0 \zeta_{i-1/2}^0 + \eta_i^0, \quad \zeta_{i-1/2}^r = \xi_i^r \zeta_{i-1/2}^0 + \eta_i^r, \quad (4.2.13)$$

где коэффициенты $\vec{\xi}_i = \text{col}\{\xi_i^0, \xi_i^r\}$ и $\vec{\eta}_i = \text{col}\{\eta_i^0, \eta_i^r\}$ вычисляются посредством рекуррентных соотношений (2.2.21). К рекуррентным соотношениям (4.2.13), (2.2.21) следует также добавить граничные условия на внешней $r = r_{ext}$ и внутренней $r = r_{int}$ границах области:

$$\zeta_{I+1/2}^r = \xi_{I+1}^r \zeta_{I+1/2}^0 + \eta_{I+1}^r, \quad \xi_{I+1}^r = -\frac{m_0^r}{3m_1^r}, \quad \eta_{I+1}^r = 0, \quad \zeta_{1/2}^0 = \frac{-3l_1^r \eta_1^r}{3l_1^r \xi_1^r + l_0^r}. \quad (4.2.14)$$

Достаточным условием устойчивости этого алгоритма прогонки является выполнение неравенства: $|\xi_i^0| < 1$. После нахождения величин поправок для потоков на гранях ячейки $\zeta_{i\pm 1/2, j, k}^{0, s+1/3}$ и $\zeta_{i\pm 1/2, j, k}^{r, s+1/3}$, поправки $\zeta_{i, j, k}^{0, s+1/3}$ и $\zeta_{i, j, k}^{r, s+1/3}$ для средних значений потока вычисляются по явным формулам (4.1.17). Величины $\zeta_{i, j, k}^{\vartheta, s+1/3}$ и $\zeta_{i, j, k}^{z, s+1/3}$ находятся по явным формулам из последних двух уравнений системы (4.2.8):

$$\begin{aligned} \zeta_{i, j, k}^{\vartheta, s+1/3} &= \left\{ VQ^{\vartheta} - \frac{1}{3} \Delta r \Delta z (f_{j+1/2}^{0,s} - f_{j-1/2}^{0,s}) - (\sigma^{11} V + M_{\vartheta} C \Delta z \Delta \vartheta) f^{\vartheta, s} \right\} / \Sigma_r^{11}, \\ \zeta_{i, j, k}^{z, s+1/3} &= \left\{ VQ^z - \frac{1}{3} v \Delta \vartheta (f_{k+1/2}^{0,s} - f_{k-1/2}^{0,s}) - \sigma^{11} V f^{z, s} \right\} / \Sigma_r^{11}. \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

На 2-ом шаге $\tau_g^{(s+1)}$ алгоритма МР решается следующая система:

$$\begin{aligned} V_{i, j, k} \omega_g^{(s+1)} \zeta_{i, j, k}^{0, s+2/3} + \Delta r_i \Delta z_k (\zeta_{i, j+1/2, k}^{\vartheta, s+2/3} - \zeta_{i, j-1/2, k}^{\vartheta, s+2/3}) + \frac{1}{3} \sigma^{00} V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{0, s+2/3} &= V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{0, s+1/3}, \\ V_{i, j, k} \omega_g^{(s+1)} \zeta_{i, j, k}^{r, s+2/3} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{r, s+2/3} &= V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{r, s+1/3}, \\ V_{i, j, k} \omega_g^{(s+1)} \zeta_{i, j, k}^{\vartheta, s+2/3} + \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k (\zeta_{i, j+1/2, k}^{0, s+2/3} - \zeta_{i, j-1/2, k}^{0, s+2/3}) + \left(\frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i, j, k} + M_{\vartheta} C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j \right) \zeta_{i, j, k}^{\vartheta, s+2/3} &= V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{\vartheta, s+1/3}, \\ V_{i, j, k} \omega_g^{(s+1)} \zeta_{i, j, k}^{z, s+2/3} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{z, s+2/3} &= V_{i, j, k} \zeta_{i, j, k}^{z, s+1/3}. \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

Граничные условия для системы (4.2.16) имеют вид:

$$l_0^{\vartheta} \zeta_{i, 1/2, k}^{0, s+2/3} + 3l_1^{\vartheta} \zeta_{i, 1/2, k}^{\vartheta, s+2/3} = 0, \quad m_0^{\vartheta} \zeta_{i, J+1/2, k}^{0, s+2/3} + 3m_1^{\vartheta} \zeta_{i, J+1/2, k}^{\vartheta, s+2/3} = 0. \quad (4.2.17)$$

Первое и третье уравнения системы (4.2.16), дополненные двумя дополнительными уравнениями (4.1.18), решаются методом прогонки по переменной ϑ в предположении, что величины с индексом $s+1/3$ известны с предыдущего шага. Исключая из первого и третьего уравнений системы (4.2.16) величины $\zeta_{i,j,k}^{0,s+2/3}$ и $\zeta_{i,j,k}^{\vartheta,s+2/3}$ посредством дополнительных уравнений (4.1.18) (отнесенных к слою $s+2/3$), получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $\zeta_{i,j\pm 1/2,k}^{0,s+2/3}$ и $\zeta_{i,j\pm 1/2,k}^{\vartheta,s+2/3}$:

$$\zeta_{i,j+1/2,k}^{0,s+2/3} a_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha} + \zeta_{i,j-1/2,k}^{0,s+2/3} b_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha} + \zeta_{i,j+1/2,k}^{\vartheta,s+2/3} c_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha} + \zeta_{i,j-1/2,k}^{\vartheta,s+2/3} d_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha} = q_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha}, \quad \alpha = 0, \vartheta, \quad (4.2.18)$$

где

$$\begin{aligned} a^{\vartheta,0} &= \Sigma_g^{00} B_0, \quad b^{\vartheta,0} = \Sigma_g^{00} (1 - B_0), \quad c^{\vartheta,0} = \Delta r \Delta z + \Sigma_g^{00} B_1, \quad d^{\vartheta,0} = -c^{\vartheta,0}, \quad \Sigma_g^{00} = V \left(\frac{1}{3} \sigma^{00} + \omega_g \right), \\ q^{\vartheta,0} &= V \zeta^{0,s+1/3}, \quad a^{\vartheta,\vartheta} = \left[\Delta r \Delta z + \tilde{\Sigma}_g^{11} B_1 \right] / 3, \quad b^{\vartheta,\vartheta} = -a^{\vartheta,\vartheta}, \quad c^{\vartheta,\vartheta} = \tilde{\Sigma}_g^{11} B_2, \quad d^{\vartheta,\vartheta} = \tilde{\Sigma}_g^{11} (1 - B_2), \\ \tilde{\Sigma}_g^{11} &= \Sigma_g^{11} + CM_g \Delta z \Delta \vartheta, \quad \Sigma_g^{11} = V \left(\frac{1}{3} \sigma^{11} + \omega_g \right), \quad q^{\vartheta,\vartheta} = V \zeta^{\vartheta,s+1/3}. \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

Для каждой плоскости (i,k) система (4.2.18)-(4.2.19) решается методом прогонки:

$$\zeta_{j+1/2}^0 = \xi_j^0 \zeta_{j-1/2}^0 + \eta_j^0, \quad \zeta_{j-1/2}^{\vartheta} = \xi_j^{\vartheta} \zeta_{j-1/2}^0 + \eta_j^{\vartheta} \quad (4.2.20)$$

с граничными условиями на границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{end}$ области:

$$\zeta_{J+1/2}^{\vartheta} = \xi_{J+1}^{\vartheta} \zeta_{J+1/2}^0 + \eta_{J+1}^{\vartheta}, \quad \xi_{J+1}^{\vartheta} = -\frac{m_0^{\vartheta}}{3m_1^{\vartheta}}, \quad \eta_{J+1}^{\vartheta} = 0, \quad \zeta_{1/2}^0 = \frac{-3l_1^{\vartheta} \eta_1^{\vartheta}}{3l_1^{\vartheta} \xi_1^{\vartheta} + l_0^{\vartheta}}. \quad (4.2.21)$$

При наличии *периодического граничного условия* на границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{end}$ (4.1.30)

вместо граничных условий (4.2.17) следует воспользоваться периодическими граничными условиями для поправок:

$$\zeta_{i,1/2,k}^{0,s+2/3} = \zeta_{i,J+1/2,k}^{0,s+2/3}, \quad \zeta_{i,1/2,k}^{\vartheta,s+2/3} = \zeta_{i,J+1/2,k}^{\vartheta,s+2/3}. \quad (4.2.22)$$

Для решения системы (4.2.18), (4.2.22) воспользуемся методом *циклической прогонки*. В [91] описан метод циклической прогонки для решения трехточечного уравнения при наличии периодических граничных условий. Построим его обобщение для решения двухточечной системы (4.2.18), (4.2.22) [16]. Для упрощения обозначений ниже индекс $s+2/3$ будем опускать. Будем искать решение системы (4.2.18), (4.2.22) в виде линейной комбинации решения системы (4.2.18) с правой частью $q_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha}$ с граничными условиями зеркального отражения:

$$\zeta_{i,1/2,k}^{\vartheta,\alpha} = \zeta_{i,J+1/2,k}^{\vartheta,\alpha} = 0, \quad (4.2.23)$$

которое обозначим $\zeta_{i,j,k}^{\vartheta,\alpha}$, и решения этой же системы с нулевой правой частью, удовлетворяющее граничным условиям

$$\zeta_{i,1/2,k}^{g,b} = \zeta_{i,J+1/2,k}^{g,b} = 1, \quad (4.2.24)$$

которое мы обозначим $\zeta_{i,j,k}^{g,b}$. Искомое решение имеет вид:

$$\zeta_{i,j,k}^g = \zeta_{i,j,k}^{g,a} + \lambda \zeta_{i,j,k}^{g,b}, \quad (4.2.25)$$

где λ - параметр, выбираемый из условия

$$\zeta_{i,1/2,k}^0 = \zeta_{i,J+1/2,k}^0. \quad (4.2.26)$$

Подстановка уравнения (4.2.25) в уравнение (4.2.26) дает для параметра λ следующее значение:

$$\lambda = - \frac{\zeta_{i,J+1/2,k}^{0,a} - \zeta_{i,1/2,k}^{0,a}}{\zeta_{i,J+1/2,k}^{0,b} - \zeta_{i,1/2,k}^{0,b}}. \quad (4.2.27)$$

Таким образом, для получения искомого решения системы (4.2.18) с граничными условиями (4.2.22) методом циклической прогонки систему (4.2.18) придется решать дважды с граничными условиями (4.2.23) и (4.2.24) с использованием обычной прогонки для двухточечных систем, а искомое решение получается в результате линейной комбинации (4.2.25) полученных решений. Это приводит к некоторому увеличению объема вычислений по сравнению со случаем наличия условий зеркального отражения, когда достаточно воспользоваться обычной двухточечной прогонкой.

После нахождения величин поправок для потоков на гранях ячейки $\zeta_{i,j\pm 1/2,k}^{0,s+2/3}$ и $\zeta_{i,j\pm 1/2,k}^{g,s+2/3}$, поправки $\zeta_{i,j,k}^{0,s+2/3}$ и $\zeta_{i,j,k}^{g,s+2/3}$ для средних значений потока вычисляются по явным формулам (4.1.18). Величины $\zeta_{i,j,k}^{r,s+2/3}$ и $\zeta_{i,j,k}^{z,s+2/3}$ находятся по явным формулам из второго и последнего уравнений системы (4.2.16):

$$\zeta_{i,j,k}^{r,s+2/3} = V \zeta_{i,j,k}^{r,s+1/3} / \Sigma_g^{11}, \quad \zeta_{i,j,k}^{z,s+2/3} = V \zeta_{i,j,k}^{z,s+1/3} / \Sigma_g^{11}. \quad (4.2.28)$$

Аналогично, на 3-ем шаге $\tau_z^{(s+1)}$ алгоритма МР решается следующая система:

$$\begin{aligned} V_{i,j,k} \omega_z^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{0,s+1} + v_i \Delta \mathcal{G}_j \left(\zeta_{i,j,k+1/2}^{z,s+1} - \zeta_{i,j,k-1/2}^{z,s+1} \right) + \frac{1}{3} \sigma^{00} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{0,s+1} &= V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{0,s+2/3}, \\ V_{i,j,k} \omega_z^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{r,s+1} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{r,s+1} &= V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{r,s+2/3}, \\ V_{i,j,k} \omega_z^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{g,s+1} + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{g,s+1} &= V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{g,s+2/3}, \\ V_{i,j,k} \omega_z^{(s+1)} \zeta_{i,j,k}^{z,s+1} + \frac{1}{3} v_i \Delta \mathcal{G}_j \left(\zeta_{i,j,k+1/2}^{0,s+1} - \zeta_{i,j,k-1/2}^{0,s+1} \right) + \frac{1}{3} \sigma^{11} V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{z,s+1} &= V_{i,j,k} \zeta_{i,j,k}^{z,s+2/3}. \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

Для данного шага, с учетом последнего из уравнений алгоритма (4.2.7), можно воспользоваться граничными условиями:

$$l_0^z \zeta_{i,j,1/2}^{0,s+1} + 3l_1^z \zeta_{i,j,1/2}^{z,s+1} = 0, \quad m_0^z \zeta_{i,j,K+1/2}^{0,s+1} + 3m_1^z \zeta_{i,j,K+1/2}^{z,s+1} = 0. \quad (4.2.30)$$

Первое и последнее уравнения системы (4.2.29), дополненные двумя дополнительными уравнениями (4.1.19), отнесенными к слою $s+1$, решается методом прогонки по переменной z в предположении, что величины с индексом $s+2/3$ известны с предыдущего шага. Исключая из первого и четвертого уравнений системы (4.2.29) величины $\zeta_{i,j,k}^{0,s+1}$ и $\zeta_{i,j,k}^{\vartheta,s+1}$ посредством дополнительных уравнений (4.1.19) (отнесенных к слою $s+1$), получим следующую двухточечную систему уравнений относительно величин $\zeta_{i,j,k\pm 1/2}^{0,s+1}$ и $\zeta_{i,j,k\pm 1/2}^{z,s+1}$:

$$\zeta_{i,j,k+1/2}^{0,s+1} a_{i,j,k}^{z,\alpha} + \zeta_{i,j,k-1/2}^{0,s+1} b_{i,j,k}^{z,\alpha} + \zeta_{i,j,k+1/2}^{r,s+1} c_{i,j,k}^{z,\alpha} + \zeta_{i,j,k-1/2}^{r,s+1} d_{i,j,k}^{z,\alpha} = q_{i,j,k}^{z,\alpha}, \quad \alpha = 0, z, \quad (4.2.31)$$

где

$$\begin{aligned} a^{z,0} &= \Sigma_z^{00} C_0, \quad b^{z,0} = \Sigma_z^{00} (1 - C_0), \quad c^{z,0} = \nu \Delta \vartheta + \Sigma_z^{00} C_1, \quad d^{z,0} = -c^{z,0}, \quad \Sigma_z^{00} = V \left(\frac{1}{3} \sigma^{00} + \omega_z \right), \\ q^{z,0} &= V \zeta^{0,s+2/3}, \quad a^{z,z} = \left[\nu \Delta \vartheta + \Sigma_z^{11} C_1 \right] / 3, \quad b^{z,z} = -a^{z,z}, \quad c^{z,z} = \Sigma_z^{11} C_2, \quad d^{z,z} = \Sigma_z^{11} (1 - C_2), \\ \Sigma_z^{11} &= V \left(\frac{1}{3} \sigma^{11} + \omega_z \right), \quad q^{z,z} = V \zeta^{z,s+2/3}. \end{aligned} \quad (4.2.32)$$

Для каждой плоскости (i, j) система (4.2.31)-(4.2.32) решается методом прогонки:

$$\zeta_{k+1/2}^0 = \xi_k^0 \zeta_{k-1/2}^0 + \eta_k^0, \quad \zeta_{k-1/2}^z = \xi_k^z \zeta_{k-1/2}^0 + \eta_k^z \quad (4.2.33)$$

с граничными условиями на границах $z = z_{bot}$ и $z = z_{top}$ области:

$$\zeta_{K+1/2}^z = \xi_{K+1}^z \zeta_{K+1/2}^0 + \eta_{K+1}^z, \quad \xi_{K+1}^z = -\frac{m_0^z}{3m_1^z}, \quad \eta_{K+1}^z = 0, \quad \zeta_{1/2}^0 = \frac{-3l_1^z \eta_1^z}{3l_1^z \xi_1^z + l_0^z}. \quad (4.2.34)$$

После нахождения величин поправок для потоков на гранях ячейки $\zeta_{i,j,k\pm 1/2}^{0,s+1}$ и $\zeta_{i,j,k\pm 1/2}^{z,s+1}$, поправки $\zeta_{i,j,k}^{0,s+1}$ и $\zeta_{i,j,k}^{z,s+1}$ для средних значений потока вычисляются по явным формулам (4.1.19). Для расчета величин $f_{i,j,k\pm 1/2}^{0,s+1}$ и $f_{i,j,k\pm 1/2}^{z,s+1}$, в соответствии с уравнением (4.2.7), используются соотношения:

$$f_{k\pm 1/2}^{\alpha,s+1} = f_{k\pm 1/2}^{\alpha,s} + \tilde{\tau}_{s+1} \zeta_{k\pm 1/2}^{\alpha,s+1}, \quad \alpha = 0, z, r, \vartheta. \quad (4.2.35)$$

Величины $\zeta_{i,j,k}^{r,s+1}$ и $\zeta_{i,j,k}^{\vartheta,s+1}$ находятся по явным формулам из второго и третьего уравнений системы (4.2.29):

$$\zeta_{i,j,k}^{r,s+1} = V \zeta_{i,j,k}^{r,s+2/3} / \Sigma_z^{11}, \quad \zeta_{i,j,k}^{\vartheta,s+1} = V \zeta_{i,j,k}^{\vartheta,s+2/3} / \Sigma_z^{11}. \quad (4.2.36)$$

Далее, согласно уравнению (4.2.7), вычисляются величины $f^{\alpha,s+1}$ по формулам:

$$f^{\alpha,s+1} = f^{\alpha,s} + \tilde{\tau}_{s+1} \zeta^{\alpha,s+1}, \quad \alpha = 0, r, \vartheta, z. \quad (4.2.37)$$

Для расчета величин $f_{i\pm 1/2}^{\alpha, s+1}$, $\alpha = 0, r$ и $f_{i\pm 1/2}^{\beta, s+1}$, $\beta = 0, g$, используемых, в частности, на следующем шаге алгоритма МР, воспользуемся системами дополнительных уравнений (4.1.17) и (4.1.18), соответственно. Для определения величин $f_{i\pm 1/2, j, k}^{0, s+1}$ и $f_{i\pm 1/2, j, k}^{r, s+1}$ решается система:

$$f_{i+1/2, j, k}^{0, s+1} a_{i, j, k}^{r, \alpha} + f_{i-1/2, j, k}^{0, s+1} b_{i, j, k}^{r, \alpha} + f_{i+1/2, j, k}^{r, s+1} c_{i, j, k}^{r, \alpha} + f_{i-1/2, j, k}^{r, s+1} d_{i, j, k}^{r, \alpha} = q_{i, j, k}^{r, \alpha}, \quad \alpha = 0, r, \quad (4.2.38)$$

где

$$\begin{aligned} a_{i, j, k}^{r, 0} &= A_{i, j, k}^0, & b_{i, j, k}^{r, 0} &= (1 - A_{i, j, k}^0), & c_{i, j, k}^{r, 0} &= A_{i, j, k}^1, & d_{i, j, k}^{r, 0} &= -c_{i, j, k}^{r, 0}, & q_{i, j, k}^{r, 0} &= f_{i, j, k}^{0, s+1}, \\ a_{i, j, k}^{r, r} &= A_{i, j, k}^1 / 3, & b_{i, j, k}^{r, r} &= -a_{i, j, k}^{r, r}, & c_{i, j, k}^{r, r} &= A_{i, j, k}^2, & d_{i, j, k}^{r, r} &= (1 - A_{i, j, k}^2), & q_{i, j, k}^{r, r} &= f_{i, j, k}^{r, s+1}. \end{aligned} \quad (4.2.39)$$

Для каждой плоскости (j, k) система (4.2.38)-(4.2.39) решается методом прогонки:

$$f_{i+1/2}^0 = \xi_i^0 f_{i-1/2}^0 + \eta_i^0, \quad f_{i-1/2}^r = \xi_i^r f_{i-1/2}^0 + \eta_i^r, \quad (4.2.40)$$

К рекуррентным соотношениям (4.2.40) следует также добавить граничные условия на внешней $r = r_{ext}$ и внутренней $r = r_{int}$ границах области:

$$f_{l+1/2}^r = \xi_{l+1}^r f_{l+1/2}^0 + \eta_{l+1}^r, \quad \xi_{l+1}^r = -\frac{m_0^r}{3m_1^r}, \quad \eta_{l+1}^r = 0, \quad f_{l/2}^0 = -\frac{3l_1^r \eta_1^r}{3l_1^r \xi_1^r + l_0^r}. \quad (4.2.41)$$

При использовании алмазной схемы и зеркального условия отражения на обеих границах по радиальной переменной $\xi_1^r = \eta_1^r = l_0^r = 0$. В этом случае величина $f_{l/2}^0$ в уравнении (4.2.41) оказывается неопределенной. Регуляризация неопределенности достигается путем перехода в этом случае на использование по радиальной переменной взвешенной схемы со значением веса $P_r \leq 1 - \varepsilon$, где $\varepsilon \sim 0.01$. Альтернативный (менее эффективный вариант): при $3l_1^r \xi_1^r + l_0^r = 0$ положить $f_{l/2}^0 = 0$, а при $l_0^r = 0$ дополнительно положить $\eta_1^r = 0$.

Аналогично, для определения величин $f_{i, j\pm 1/2, k}^{0, s+1}$ и $f_{i, j\pm 1/2, k}^{g, s+1}$ решается система:

$$f_{i, j+1/2, k}^{0, s+1} a_{i, j, k}^{g, \alpha} + f_{i, j-1/2, k}^{0, s+1} b_{i, j, k}^{g, \alpha} + f_{i, j+1/2, k}^{r, s+1} c_{i, j, k}^{g, \alpha} + f_{i, j-1/2, k}^{r, s+1} d_{i, j, k}^{g, \alpha} = q_{i, j, k}^{g, \alpha}, \quad \alpha = 0, r, \quad (4.2.42)$$

где

$$\begin{aligned} a_{i, j, k}^{g, 0} &= B_{i, j, k}^0, & b_{i, j, k}^{g, 0} &= (1 - B_{i, j, k}^0), & c_{i, j, k}^{g, 0} &= B_{i, j, k}^1, & d_{i, j, k}^{g, 0} &= -c_{i, j, k}^{g, 0}, & q_{i, j, k}^{g, 0} &= f_{i, j, k}^{0, s+1}, \\ a_{i, j, k}^{g, g} &= B_{i, j, k}^1 / 3, & b_{i, j, k}^{g, g} &= -a_{i, j, k}^{g, g}, & c_{i, j, k}^{g, g} &= B_{i, j, k}^2, & d_{i, j, k}^{g, g} &= (1 - B_{i, j, k}^2), & q_{i, j, k}^{g, g} &= f_{i, j, k}^{g, s+1}. \end{aligned} \quad (4.2.43)$$

Для каждой плоскости (i, k) система (4.2.42)-(4.2.43) решается методом прогонки:

$$f_{j+1/2}^0 = \xi_j^0 f_{j-1/2}^0 + \eta_j^0, \quad f_{j-1/2}^g = \xi_j^g f_{j-1/2}^0 + \eta_j^g, \quad (4.2.44)$$

с граничными условиями на границах $g = g_0$ и $g = g_{end}$ области:

$$f_{j+1/2}^g = \xi_{j+1}^g f_{j+1/2}^0 + \eta_{j+1}^g, \quad \xi_{j+1}^g = -\frac{m_0^g}{3m_1^g}, \quad \eta_{j+1}^g = 0, \quad f_{j/2}^0 = -\frac{3l_1^g \eta_1^g}{3l_1^g \xi_1^g + l_0^g}. \quad (4.2.45)$$

При использовании алмазной схемы и зеркального условия отражения на обеих границах по переменной ϑ имеют место соотношения: $\xi_1^\vartheta = \eta_1^\vartheta = l_0^\vartheta = 0$. В этом случае величина $f_{1/2}^0$ в уравнении (4.2.45) оказывается неопределенной. Регуляризация расчета $f_{1/2}^0$ производится аналогично вышеописанному случаю радиальной переменной.

При использовании периодических граничных условий:

$$f_{i,1/2,k}^0 = f_{i,J+1/2,k}^0, \quad f_{i,1/2,k}^\vartheta = f_{i,J+1/2,k}^\vartheta. \quad (4.2.46)$$

для решения системы (4.2.42)-(4.2.43) используется метод циклической прогонки.

Для улучшения сходимости итерационного процесса при наличии граничного условия зеркального отражения или периодического граничного условия на границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{end}$ расчетной области, целесообразно использовать вариант AWDD схемы, в котором расчет веса P_g в экстраполяционном соотношении по переменной ϑ выбираются на основе оценки градиента решения по этой переменной по взвешенной схеме с $P_g = P_g^{cut} = 0.95$.

Кроме того, следует отметить, что в случае использования периодического граничного решения по переменной ϑ перенормировка решения с использованием ускоряющих поправок, в соответствии с уравнениями (4.1.10), должна производиться на обеих границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{end}$ расчетной области:

$$\psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1} = \psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,1/2,k}^\vartheta), \quad (4.2.47)$$

$$\psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{n+1} = \psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,J+1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,J+1/2,k}^\vartheta). \quad (4.2.48)$$

В случае же использования условий зеркального отражения на границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{end}$ расчетной области достаточно произвести перенормировку решения только на границе $\vartheta = \vartheta_{end}$ согласно уравнению (4.2.48).

Эффективность МР весьма существенно зависит от выбора параметров $\omega_r^{(s+1)}$, $\omega_g^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$. В отличие от метода переменных направлений для двумерной геометрии [3, 91, 96], теоретически обоснованный оптимальный выбор этих параметров отсутствует даже для случая, когда операторы \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} являются самосопряженными, имеют положительный (отрицательный) спектр, а также перестановочны.

Однако, в рассматриваемом нами общем случае гетерогенной задачи операторы \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} , вообще говоря, неперестановочны. Следовательно, результаты общей теории по выбору параметров $\omega_r^{(s+1)}$, $\omega_g^{(s+1)}$ и $\omega_z^{(s+1)}$ в данном случае будут применимы лишь приближенно. Вместе с тем, можно попытаться воспользоваться для выбора указанных параметров алгоритмом, анало-

гичным использованному ранее в симметризованном ADI алгоритме [50], который формально применим и в рассматриваемом нами случае 3D геометрии.

В следующих разделах мы рассмотрим алгоритм для оценки минимального и максимального собственных значений операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} , используемых в этом подходе, и приведем соотношения для расчета итерационных параметров.

4.3. Оценка границ спектра r , ϑ и z компонент P_1 оператора

Достаточно рассмотреть случай оператора \hat{R} , так как для операторов $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} используется аналогичная процедура. Прежде всего, оператор \hat{R} заменяется на оператор \hat{R}_a , полученный путем усреднения оператора \hat{R} по переменным ϑ и z . Для этого вычисляются средние по переменным ϑ и z значения коэффициентов $a_{i,j,k}^{r,\alpha}$, $b_{i,j,k}^{r,\alpha}$, $c_{i,j,k}^{r,\alpha}$ и $d_{i,j,k}^{r,\alpha}$, $\alpha = 0, r$, из системы (4.2.11)-(4.2.12) в точке $\omega_r = 0$, а также величин $A_{i,j,k}^0$, $A_{i,j,k}^1$ и $A_{i,j,k}^2$ из уравнений (4.1.17). Указанные величины определяют элементы матрицы оператора \hat{R}_a , который имеет блочную структуру и может быть представлен в виде:

$$\hat{R}_a = \begin{pmatrix} \hat{C}\hat{G}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \nu_\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & \nu_z \end{pmatrix}, \quad \nu_\vartheta = 3/\sigma^{11}, \quad \nu_z = 3/\sigma^{11}. \quad (4.3.1)$$

Здесь оператор \hat{C} преобразует вектор $\vec{g}_{i\pm 1/2,up} = col\{g_{i\pm 1/2}^0, g_{i\pm 1/2}^r\}$ определенный на гранях $r_{i\pm 1/2}$ ячеек, в вектор $\vec{q}_{i,up}$, состоящий из двух компонент вектора правой части $\vec{q}_{i,up} = col\{q_i^0, q_i^r\}$, отнесенных к центрам ячеек: $\hat{C}\vec{g}_{i,up} = \vec{q}_{i,up}$. Матрица оператора \hat{C} получается усреднением по переменным ϑ и z матрицы системы (4.2.11). Оператор \hat{G} преобразует вектор $\vec{g}_{i\pm 1/2,up}$ в вектор $\vec{f}_{i,up} = col\{f_i^0, f_i^r\}$, определенный в центрах ячеек: $\vec{f}_{i,up} = \hat{G}\vec{g}_{i,up}$. Матрица оператора \hat{G} состоит из усредненной по переменным ϑ и z матрицы системы (4.1.17).

Для определения минимального и максимального собственных чисел λ_r и Λ_r оператора \hat{R}_a может быть использован степенной метод [96, 97]:

$$\Delta_r = \lim_{s \rightarrow \infty} \lambda'_{(s)}, \quad \lambda'_{(s+1)} = \frac{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}{\|\vec{f}^{(s)}\|}, \quad \vec{y}^{(s+1)} = \hat{R}_a \vec{f}^{(s)}, \quad \vec{f}^{(s+1)} = \frac{\vec{y}^{(s+1)}}{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}, \quad (4.3.2)$$

$$1/\lambda_r = \lim_{s \rightarrow \infty} \lambda_{(s)}'', \quad \lambda_{(s+1)}'' = \frac{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}{\|\vec{f}^{(s)}\|}, \quad \vec{y}^{(s+1)} = \hat{R}_a^{-1} \vec{f}^{(s)}, \quad \vec{f}^{(s+1)} = \frac{\vec{y}^{(s+1)}}{\|\vec{y}^{(s+1)}\|}, \quad (4.3.3)$$

где $\vec{f}_i = \text{col}\{f_i^0, f_i^r, f_i^g, f_i^z\}$ и $\|\vec{f}\| = \left[\sum_i v_i \left((f_i^0)^2 + (f_i^r)^2 + (f_i^g)^2 + (f_i^z)^2 \right) \right]^{1/2}$. Начальное приближение $\vec{f}^{(0)}$ также предполагается нормированным: $\|\vec{f}^{(0)}\| = 1$. (В качестве $\vec{f}^{(0)}$ можно выбрать, например, $\vec{f}^{(0)} = \vec{y}^{(0)} / \|\vec{y}^{(0)}\|$, где $\vec{y}_i^{(0)} = \text{col}\{1, 1, 1, 1\}$).

Для обращения операторов \hat{G} и \hat{C} входящих в состав оператора \hat{R}_a , которое сводится к решению 2-х точечных систем вида (4.2.11), используется метод прогонки.

Как показал опыт расчетов, компоненты f^g и f^z собственных векторов, отвечающих минимальному и максимальному собственным значениям оператора \hat{R}_a стремятся к нулю и ими можно пренебречь. Соответственно, можно также пренебречь вкладом соответствующих компонент оператора \hat{R}_a , положив $\hat{R}_a \approx \hat{C}\hat{G}^{-1}$.

При использовании AWDD схемы выбор весов WDD схемы уточняется в процессе итераций. Поэтому границы спектра собственных значений операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} должны, вообще говоря, переоцениваться на каждой внутренней итерации n . В этом случае собственные значения и собственные вектора с предыдущей $n-1$ -ой внутренней итерации используются как начальное приближение. В итоге, среднее число итераций степенного метода при точности расчета собственных значений $\varepsilon_\lambda = 10^{-3}$ обычно не велико.

4.4. Определение итерационных параметров циклического МР

В двумерном случае (см. раздел 3.4, [50]) после оценки границ собственных значений операторов \hat{R} и \hat{Z} для циклического ADI метода с длиной цикла J рассчитываются величины, определяемые соотношениями (3.4.1) и (3.4.2). Величины $\omega_{r,j}$ и $\omega_{z,j}$ в уравнении (3.4.2) определяют искомые оптимальные значения параметров ADI алгоритма.

В случае, когда $\lambda_r = \lambda_z = \lambda$, $\Lambda_r = \Lambda_z = \Lambda$ соотношения (3.4.1)-(3.4.2) приобретают вид:

$$a = \frac{\Lambda - \lambda}{\Lambda + \lambda}, \quad \eta = \frac{\lambda}{\Lambda}, \quad b = 1, \quad t = 0, \quad r = \Lambda, \quad s = 0, \quad \omega_{r,j} = \omega_{z,j} = \omega_j = r\kappa_j. \quad (4.4.1)$$

В используемом нами для случая 3D геометрии варианте МР полагается $\omega_{r,j} = \omega_{g,j} = \omega_{z,j} \equiv \omega_j$ с $\lambda = \lambda_{\min} = \min(\lambda_r, \lambda_g, \lambda_z)$ и $\Lambda = \Lambda_{\max} = \max(\Lambda_r, \Lambda_g, \Lambda_z)$, $\tilde{\tau}_j = 2\omega_j^2$. Такой выбор шагов, как показывает численный эксперимент, является приемлемым для достаточно широкого класса задач.

В качестве мотивации использования МР с симметризованными границами спектра отметим, что в гетерогенных задачах границы спектра оцениваются приближенно для усредненных значений операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} . Использование симметризованной оценки границ спектра раздвигает эти границы, позволяя гасить более широкий спектр ошибок.

При выборе остальных параметров алгоритма: длины цикла J , критерия и точности сходимости итераций МР, точности расчета границ спектра операторов \hat{R} , $\hat{\Theta}$ и \hat{Z} и т. д., позволяющих минимизировать время расчета варианта, использовался опыт задания аналогичных параметров для ADI метода в 2D геометрии (см. раздел 3.4, [50]), а также результаты численного эксперимента, в котором в качестве критерия оптимизации KP_1 алгоритма выбиралось уменьшение полного времени расчета варианта. В частности, проведенное исследование показало, что использование поточечного критерия сходимости итераций МР для каждой из компонент f^0 , f^r , f^g и f^z P_1 системы является чрезмерным. Более приемлемым является критерий сходимости вида:

$$\max_{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}, \alpha} \left| \frac{f_{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}}^{\alpha, s+1} - f_{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}}^{\alpha, s}}{f_{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}}^{\alpha, s+1}} \right| < \varepsilon_{P_1}, \quad f_{\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k}}^{\alpha, s} = \sqrt{\sum_{i \in \tilde{i}, j \in \tilde{j}, k \in \tilde{k}} V_{i,j,k} (f_{i,j,k}^{\alpha, s})^2}, \quad \alpha = 0, r, g, z, \quad (4.4.2)$$

где $(\tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k})$ - “трубая” сетка с коэффициентом огрубления N (в 3D геометрии обычно $N = 3$) по отношению к сетке (i, j, k) . Блок ячеек, по которому производится суммирование в (4.4.2), состоит из N^3 ячеек. В уравнении (4.4.2) ε_{P_1} - заданная точность сходимости итераций МР.

Численный эксперимент показал, что желательно использовать циклический МР с достаточно большой длиной цикла J (хорошим выбором для большого класса задач является значение $J = 16$) с возрастающей последовательностью κ_j : $\kappa_j < \kappa_{j+1}$. Известно [82, 106], что кинетическая часть итерации хорошо подавляет быстроменяющиеся по пространственной переменной компоненты в спектре ошибки. Основное назначение P_1 части итерации - это подавление медленно меняющихся по пространственной переменной компонент спектра ошибки, что согласуется с выбором критерия сходимости итераций МР (4.4.2) и вышеуказанной последовательностью шагов в цикле МР.

Оптимальный выбор ε_{P_1} зависит от степени монотонности используемой разностной схемы и длины цикла J . Численный эксперимент показал, что при $J \geq 8$ для DD схемы и для AWDD схемы с корректирующей функцией (1.11.22), (1.11.26) и (1.11.30) из семейства (1.7.9); в 3D расчете достаточно задать $\varepsilon_{P_1} = 0.4$, а для шаговой схемы и для AWDD схемы с корректирующей функцией (1.11.23), (1.11.27) и (1.11.31) из семейства (1.7.10), можно несколько осла-

бить критерий сходимости итераций МР, задав $\varepsilon_{p_1} = 0.5$. При $J < 8$ следует повысить точность сходимости итераций МР, например, до $\varepsilon_{p_1} = 0.2$. Использование более высоких точностей ε_{p_1} может лишь незначительно уменьшить число внутренних итераций, но при этом возрастает число итераций МР, соответственно, стоимость одной внутренней итерации и полное время расчета.

Численное исследование также показало, что приемлемая точность расчета границ спектра $\varepsilon_\lambda = 10^{-3}$. Дальнейшее повышение точности расчета границ спектра практически не влияет на число итераций МР. Выход из итерационного цикла происходит либо по достижению заданной точности, либо если число итераций степенного метода превосходит некоторое предельное значение N_{\max}^λ (обычно, $N_{\max}^\lambda = 300$).

Если число итераций МР превосходит некоторое предельное значение N_{\max}^{split} (обычно $N_{\max}^{split} = \max(32, J)$ при $J \geq 8$ и $N_{\max}^{split} = 180$ при $J < 8$), то осуществляется корректировка выбора шагов алгоритма МР – исходная верхняя граница спектра¹ Λ увеличивается в $10 \cdot 2^n$ раз, где $n = 1, 2, \dots$ - номер корректировки границ спектра. После корректировки верхней границы спектра итерации МР продолжают (с использованием ранее полученного приближения для поправок) до сходимости, если не возникает необходимости в дополнительной корректировке. Корректировка верхней границы спектра производится до сходимости итераций МР, но не более 10 раз, после чего ускорение в группе отключается и используются чистые кинетические итерации. Как показал численный эксперимент, указанная коррекция границ спектра является эффективным средством обеспечения сходимости итераций МР при решении сложных гетерогенных задач.

При решении многогрупповой задачи целесообразно сохранить достигнутый при расчете 1-ой группы коэффициент увеличения верхней границы спектра в качестве начального приближения при расчете последующих групп. Вышеописанный алгоритм коррекции шагов МР является уточненной, более эффективной версией алгоритма коррекции параметров ADI алгоритма в двумерной геометрии, рассмотренного в главе 3.

Ускорение в группе отключается также по достижению некоторого максимально допустимого числа внутренних итераций (обычно, 40) в группе.

Для предотвращения возможных переполнений целесообразно также осуществлять проверку значения прогоночного коэффициента ξ^0 в уравнениях (4.2.13), (4.2.20) и (4.2.33). Если абсолютное значение этого коэффициента в некоторой ячейке существенно больше 1 (в 3D

¹ На достаточность ограничиться при корректировке границ спектра корректировкой только верхней его границы внимание автора было обращено В. И. Лебедевым.

программе обычно используется критерий $|\xi^0| > 2.5$), то производятся действия, аналогичные случаю достижения максимального числа итераций МР N_{\max}^{split} .

Если на обеих границах расчетной области по какой-либо пространственной переменной используется условие зеркального отражения, то при использовании по этой переменной взвешенной алмазной схемы с весом P максимальное собственное значение компоненты P_1 оператора по этой переменной при $P \rightarrow 1$ (т. е. при переходе к алмазной схеме) неограниченно возрастает. Это дестабилизирует алгоритм ускорения (возможно, в этом случае нарушаются условия применимости МР, этот вопрос нуждается в дальнейшем исследовании).

Для стабилизации алгоритма ускорения по указанной переменной можно воспользоваться взвешенной схемой с весом P , несколько меньшим 1, что делает спектр компоненты P_1 оператора по этой переменной ограниченным. В обобщенном варианте AWDD схемы, изложенном в Разделе 1.7, это достигается выбором начального веса P^0 , используемого для оценки градиента решения по указанной переменной, несколько меньшим 1, например, $P^0 = P^{cut} = 0.95$. Как показал численный эксперимент, это стабилизирует алгоритм ускорения, улучшает монотонность решения по соответствующей переменной и практически не влияет на точность расчета. Аналогичный выбор веса P используется также в случае наличия периодических граничных условий.

4.5. KP_1 схема ускорения внутренних итераций в x, y, z геометрии

Односкоростное уравнение переноса в x, y, z геометрии имеет вид (1.1.15). Все расчетные формулы KP_1 схемы для x, y, z геометрии получаются из соответствующих формул для r, ϑ, z геометрии путем замены:

$$r \rightarrow x, \quad \vartheta \rightarrow y, \quad A_{i\pm 1/2} \rightarrow 1, \quad C_i \rightarrow 0, \quad v_i \rightarrow \Delta x_i, \quad M_r \rightarrow 0, \quad M_\vartheta \rightarrow 0. \quad (4.5.1)$$

4.6. Численные примеры использования KP_1 схема ускорения внутренних итераций в 3D геометрии

В данном разделе мы приведем некоторые численные результаты, позволяющие оценить эффективность вышеописанного варианта согласованной KP_1 схемы, реализованной в программе КАТРИН [58]. Использовался поточечный критерий сходимости внутренних итераций по скалярному потоку $\varepsilon = 10^{-4}$. Для решения P_1 системы использовался циклический МР с длиной цикла $J = 16$.

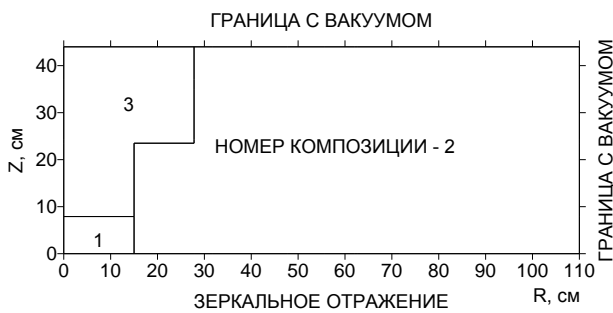
При расчете тестовых задач 1-5 использовались DD схема, шаговая (Step) схема с $P_r = P_g = P_z = P_\xi = 0$, два варианта AWDD схемы с корректирующими функциями (1.11.22), (1.11.26) и (1.11.30) из семейства (1.7.9); (1.11.23), (1.11.27) и (1.11.31) из семейства (1.7.10), параметрами монотонизации $b_r = b_g = b_z = 2$, $b_\xi = 1$ и $b_r = b_g = b_z = 1.6$, $b_\xi = 1$, обозначенные как AWDD₁ и AWDD₂, соответственно. В качестве критерия сходимости итераций МР использовался поблочный критерий (4.4.2) с размером ребра блока $N = 3$ и $\varepsilon_{P_1} = 0.4$ для DD и AWDD₁ схем и $\varepsilon_{P_1} = 0.5$ для Step и AWDD₂ схем. В r, g, z геометрии (в целях стабилизации алгоритма ускорения) использовались варианты AWDD схемы с начальным значения веса $P_g^0 = 0.95$. Расчетные времена приведены для ПК Intel Core 2 Duo E6750.

Прежде всего, представим результаты использования KP_1 схемы для расчета двух тестовых задач из работы [98], обобщенных на случай x, y, z геометрии. Геометрия и состав зон для этих задач для случая x, y геометрии определены на Рис. 3.6.1 (Задача 1, EIR-2) и Рис. 3.6.2 (Задача 2, железо-водная композиция). При переходе к x, y, z геометрии в Задаче 1 полагалось, что поперечное сечение 3D расчетной области при $18 < z < 78$ совпадает с приведенным на Рис. 3.6.1, а области $0 < z < 18$ и $78 < z < 96$ заполнены материалом 5 (т. е., материалом отражателя) в пределах $0 < x < 96$, $0 < y < 86$. При переходе к x, y, z геометрии в Задаче 2 полагалось, что поперечное сечение 3D расчетной области при $0 < z < 12$ совпадает с приведенным на Рис. 3.6.2, на нижней границе области используется условие зеркального отражения, а расположение зон и источника по оси z повторяет их расположение по осям x и y (композиция полностью симметрична по переменным x, y и z).

В Таблице 4.6.1 приведено число внутренних итераций, требуемое для решения задач 1 и 2 без ускорения и при использовании KP_1 схемы в сочетании с циклическим МР для решения P_1 системы. В квадратных и круглых скобках приведены, соответственно, среднее (по внутренним итерациям) число итераций МР и процессорное время (мин.). В Таблице 4.6.1 представлены также результаты работы алгоритма ускорения при решении задачи в r, g, z геометрии о точечном изотропном источнике, находящемся в центре гомогенного, изотропно рассеивающего цилиндра высотой 10 см и радиусом 10 см (Задача 3), а также задачи о точечном изотропном источнике, находящемся в центре куба с ребром 20 см (Задача 4). В Задачах 3 и 4 предполагалось, что $\sigma = 1.0$, $\sigma_s = 0.95$.

В Таблице 4.6.2 приведено суммарное (по 26 группам) число внутренних итераций при расчете модели быстрого реактора (Задача 5, Рис. 4.6.1) по программам КАТРИН-2.0 в r, g, z геометрии для сектора зеркальной симметрии 60° и КАСКАД-С-2.5 в r, z геометрии в $S_8 P_1$

приближении при точности сходимости внутренних итераций $\varepsilon = 10^{-3}$. В активной зоне был задан пространственно постоянный источник со спектром деления ^{235}U . Следует отметить, что в данной задаче отсутствует зависимость источника и решения от азимутального угла ϑ . Таким образом, расчет в r, ϑ, z геометрии приводит к результатам, идентичным расчету в r, z геометрии. В круглых скобках приведено процессорное время (мин.).



Ядерные концентрации нуклидов по материалам задачи			
нуклид	активная зона	тепло-носитель	отрагатель
	1	2	3
Na	7.50E-3	2.21E-2	4.75E-3
Fe	1.16E-2		1.03E-2
Cr	3.55E-3		2.94E-3
Ni	2.84E-3		1.40E-3
U-235	2.25E-3		
U-238	5.09E-3		
Pu-239	7.69E-5		
Осколки U-235	3.68E-4		
O	1.50E-2		
C			4.79E-2

Рисунок 4.6.1. Модель быстрого реактора в r, z геометрии

Таблица 4.6.1. Число внутренних итераций, требуемое для решения задач 1-4 без ускорения и при использовании KP_1 схемы в сочетании с циклическим MP для решения P_1 системы.

Задача	Метод							
	Без ускорения			KP_1+MP				
	Step	DD	AWDD ₁	Step	DD	WDD ²	AWDD ₁	AWDD ₂
Задача 1. Композиция EIR-2 в x, y, z геометрии, сетка $56 \times 50 \times 56$, $S_8 P_0$	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,	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)

² $P_r = P_z = P_\xi = 1, P_\vartheta = 0.95$.

сетка $20 \times 20 \times 20$, $S_6 P_1$								
Задача 3. Точечный источник в центре цилиндра, сетка $37 \times 10 \times 38$, $S_{16} P_0$	91 (0.51)	105 (0.65)	101 (1.1)	7 [11.4] (0.07)	37 [11] (0.32)	8 [8] (0.08)	8 [10.5] (0.12)	8 [8] (0.13)
Задача 4. Точечный источник в центре куба, сетка $50 \times 50 \times 50$, $S_{10} P_0$	117 (1.67)	128 (2.04)	128 (3.59)	5 [8.4] (0.15)	6 [7.7] (0.20)		6 [8] (0.27)	6 [6.8] (0.29)

Таблица 4.6.2. Суммарное (по 26 группам) число внутренних итераций при расчете модели быстрого реактора (Задача 5, Рис. 4.6.1)

Геометрия и пространственная сетка					
r, ϑ, z ; сетка ($82 \times 3 \times 35$)				r, z ; сетка (82×35)	
Без ускорения	$KP_1 + MP$			Без ускорения	$KP_1 + ADI$
AWDD ₁	AWDD ₁	AWDD ₂	AWDD ₁	AWDD ₁	AWDD ₁
$P_g^0 = 0.95$	$P_g^0 = 0.95$	$P_g^0 = 0.95$	$P_g^0 = 0.9$		
961 (1.97)	163 (0.52)	160 (0.54)	155 (0.5)	885 (0.25)	102 (0.045)

Применим далее рассматриваемый алгоритм к решению сильно-гетерогенной задачи с малым поглощением из [15] в r, ϑ, z геометрии (Задача 6). Расчетная область этой задачи представляет собой гетерогенный цилиндр радиусом 25 см и высотой 50 см. Аксиальное сечение задачи изображено на Рис. 4.6.2. Зависимость геометрии и источников от переменной ϑ отсутствует. Внутренний цилиндрический канал заполнен материалом 1. Окружающая канал среда, а также центральный диск внутри канала заполнены материалом 2. На нижний торец канала ($z = 0, 0 \leq r \leq 5$ см) падает единичный изотропный источник. Имеется также внутренний изотропный источник с интенсивностью 10^{-6} частиц/см³, распределенный равномерно по всей расчетной области. В r, ϑ, z геометрии расчет проводился для сектора симметрии $0 < \vartheta < \pi/2$. В сущности, данная задача является двумерной, так как отсутствует зависимость решения от переменной ϑ . Поэтому, данная задача рассчитывалась также в r, z геометрии. Для случая x, y, z геометрии может быть определена аналогичная задача, расчетная область которой представляет собой гетерогенный параллелепипед с каналом, имеющим квадратное сечение. Аксиальное сечение этого параллелепипеда в плоскости OXZ совпадает с аксиальным сечением гетерогенно-

го цилиндра (Рис. 4.6.2). В x, y, z геометрии расчет этой задачи может быть выполнен для $1/4$ расчетной области с условиями зеркального отражения на границах $x = 0$ и $y = 0$.

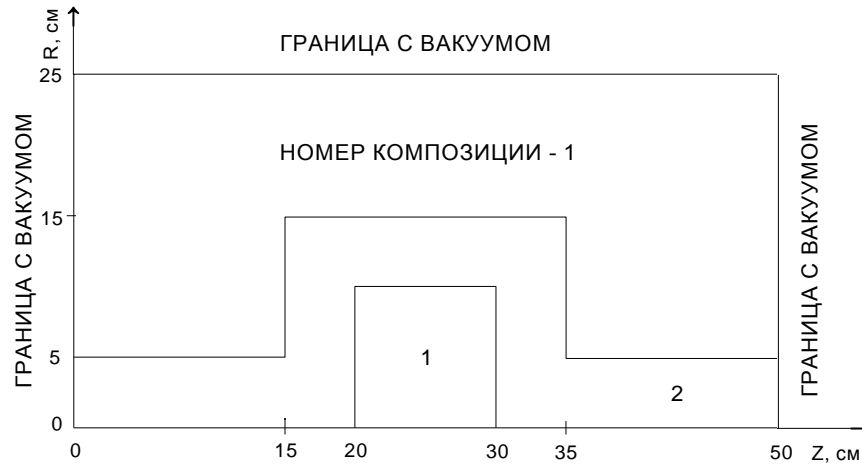


Рисунок 4.6.2. Конфигурация сильно-гетерогенной задачи с малым поглощением из [15] в r, ϑ, z геометрии

Рассмотрим также Задачу 7, отличающуюся от Задачи 6 наличием граничного изотропного источника также и на верхнем торце канала при $z = 50$ см. В этом случае имеется дополнительная симметрия относительно плоскости $z = 25$ см и данная задача, а также ее вариант для декартовой геометрии, могут быть решены в 2D r, z и x, z геометриях для $1/2$ расчетной области $25 \leq z \leq 50$ с условием зеркального отражения при $z = 25$.

В Табл. 4.6.3 для некоторого набора значений полных сечений материалов 1 ($\sigma_{t,1}$) и 2 ($\sigma_{t,2}$), а также величин отношения сечения рассеяния к полному сечению $c = \sigma_s / \sigma_t$, приведено число внутренних итераций при решении Задачи 6 в r, z , r, ϑ, z и x, y, z геометриях на пространственной сетке 50×100 , $50 \times 3 \times 100$ и $50 \times 50 \times 100$ шагов, соответственно, с использованием шаговой (Step), MDS_n full (1.11.20) и алмазной (DD) схем в S_8 приближении с точностью сходимости итераций 10^{-5} при точности решения P1 системы для ускоряющих поправок $\varepsilon_{p1} = 0.03$. Результаты для r, ϑ, z и x, y, z геометрий в приведены, соответственно, в квадратных и круглых скобках.

В Табл. 4.6.4 приведено число внутренних итераций при решении Задачи 7 в r, z и x, z геометриях на пространственной сетке 50×50 шагов для Step, MDS_n full и DD схем в S_8 приближении при той же точности сходимости итераций, что и в Задаче 6. Результаты для x, z геометрии приведены в круглых скобках.

В Табл. 4.6.5 приведено число внутренних итераций при решении Задачи 7 в r, z и x, z геометриях с использованием AWDD схемы для различного выбора параметра u_0 в (1.7.3), параметра монотонизации $b \geq 1$ и пространственной сетки. Результаты для x, z геометрии приведены в круглых скобках, символом a обозначено отсутствие сходимости итераций.

В Табл. 4.6.6 приведено число внутренних итераций при решении Задачи 7 в x, z геометрии посредством Step и DD схем с использованием и без использования GMRES алгоритма, предобусловленного KP_1 схемой, при точности сходимости внутренних итераций 10^{-5} и $\varepsilon_{P_1} = 10^{-5}$. В круглых скобках приведено число GMRES итераций, требуемых для достижения сходимости 10^{-5} в L_2 норме.

Таблица 4.6.3. Число внутренних итераций при решении Задачи 6 в r, z , r, ϑ, z и x, y, z геометриях. Результаты для r, ϑ, z и x, y, z геометрий в приведены, соответственно, в квадратных и круглых скобках.

		$\sigma_{i,2}$					
		10^2			10^1		
$\sigma_{i,1}$	c	Step	MDS _n full	DD	Step	MDS _n full	DD
10^{-3}	0.9999	25 [25] (33)	(36)	145	26 [26] (34)	(37)	64
	0.99	15 (17)	(17)	169 (184)	21 (25)	(26)	49 (63)
10^{-2}	0.9999	21 [21] (26)	(27)	141	23 [23] (26)	(27)	41
	0.99	14 (14)	(15)	170 (153)	18 (20)	(22)	40 (53)
10^0	0.9999	7 [9] (14)	(15)	76	14 [15] (15)	(16)	27
	0.99	10 (11)	(11)	64 (133)	12 (12)	(14)	31 (36)

Таблица 4.6.4. Число внутренних итераций при решении Задачи 7 в r, z и x, z геометриях

		$\sigma_{i,2}$					
		10^2			10^1		
$\sigma_{i,1}$	c	Step	MDS _n full	DD	Step	MDS _n full	DD
10^{-3}	0.9999	23 (23)	(23)	112 (135)	23 (25)	(28)	45 (39)
	0.99	13 (13)	(13)	149 (129)	19 (21)	(23)	34 (40)

10^{-2}	0.9999	21 (22)	(24)	99(118)	22 (22)	(25)	36 (38)
	0.99	12 (13)	(13)	133 (129)	18 (18)	(20)	31 (34)
10^0	0.9999	12 (12)	(13)	76 (66)	12 (11)	(12)	20 (16)
	0.99	9 (9)	(10)	106 (86)	12 (11)	(13)	22 (22)

Таблица 4.6.5. Число внутренних итераций при решении Задачи 7 в r, z и x, z геометриях в зависимости от выбора корректирующей функции AWDD схемы и пространственной сетки

		$\sigma_{i,2}$							
		10^2				10^1			
$\sigma_{i,1}$	c	$U_0=1-\delta$ $b = 2.0$	$2U_0=1-\delta$ $b = 1.6$	$4U_0=1-\delta$ $b = 1.3$	$10U_0=1-\delta$ $b = 1$	$U_0=1-\delta$ $b = 2.0$	$2U_0=1-\delta$ $b = 1.6$	$4U_0=1-\delta$ $b = 1.3$	
сетка		50×50		200×200	50×50				
10^{-3}	0.9999	$a(a)$	(a)	$a(a)$	29 (38)	(52)	33 (30)	31 (30)	31 (28)
	0.99	20 (27)	20 (21)	20 (20)	28 (26)	(23)	28 (30)	26 (28)	31 (29)
10^{-2}	0.9999	$a(a)$	(a)	$a(a)$	31 (35)	(48)	26 (28)	28 (28)	28 (29)
	0.99	44 (a)	19 (19)	19 (19)	27 (26)	(21)	28 (27)	27 (25)	27 (23)
10^0	0.9999	$a(a)$	(a)	$a(a)$	24 (23)	(35)	21 (20)	19 (18)	18 (17)
	0.99	a (14)	22 (17)	18 (18)	25 (25)	(20)	27 (28)	23 (23)	20 (20)

Таблица 4.6.6. Число внутренних итераций при решении Задачи 7 в x, z геометрии посредством Step и DD схем с использованием и без использования GMRES алгоритма, предобусловленного KP_1 схемой

		$\sigma_{i,2}$			
		10^2			
$\sigma_{i,1}$	c	Step	Step/GMRES	DD	DD/GMRES
10^{-2}	0.99	12	12(6)	109	96(13)

Как следует из результатов, приведенных в Табл. 4.6.3-4.6.6, если для аппроксимации уравнения переноса используются монотонные шаговая или MDS_n full схемы, то согласованная KP_1 схемы ускорения работает достаточно эффективно для всех рассмотренных случаев. Однако, использование MDS_n full схемы требует достаточно частых пространственных сеток для

достижения необходимой точности. Если же используется немонотонная DD схема, то имеет место понижение эффективности KP_1 схемы ускорения. За счет монотонизации разностного решения использование AWDD схемы предотвращает понижение эффективности KP_1 схемы ускорения. Однако при $c \rightarrow 1$ начиная с некоторой критической степени гетерогенности задачи адаптивный алгоритм коррекции сам становится причиной неустойчивости, для предотвращения которой следует воспользоваться более “мягкой” корректирующей функцией (с увеличением размерности геометрии требования к “мягкости” корректирующей функции возрастают [90]) либо увеличить пространственную сетку задачи. Использование в сочетании с DD схемой GMRES алгоритма, предобусловленного KP_1 схемой ускорения, не решает проблему понижения эффективности алгоритма, если требуется поточечная сходимость решения.

В [90] выполнено исследование применения для решения Задач 6 и 7 также и варианта DD схемы с монотонизацией на особенностях (MDS_n схемы [10, 4]), использующей для экстраполяции при входе в зоны с резко возросшим полным сечением WDD схему с весами, определяемыми согласно (1.11.20), которое показало, что MDS_n схема предотвращает понижение эффективности KP_1 схемы ускорения, однако, она нуждается в эффективном алгоритме локализации критических экстраполяций, т. е. экстраполяций, приводящих к грубым ошибкам разностной аппроксимации. Кроме того, MDS_n схема нуждается в дополнительной коррекции для обеспечения положительности разностного решения.

4.7. Обсуждение результатов

Представленные результаты численного эксперимента показывают, что разработанный вариант алгоритма ускорения внутренних итераций обеспечивает значительный выигрыш во времени расчета варианта. Опыт расчета практических задач показывает, что использование циклического алгоритма задания итерационных параметров обеспечивает необходимую эффективность MP, а описанный в Разделе 4 алгоритм коррекции границ спектра гарантирует сходимость итераций MP при решении сложных гетерогенных задач. Вместе с тем, сравнение со случаем 2D геометрии, когда для решения P_1 системы для ускоряющих поправок используется ADI метод, показывает, что, по-видимому, возможна более глубокая оптимизация выбора итерационных параметров MP в 3D геометрии.

Как показало проведенное исследование, проблема предотвращения падения эффективности KP_1 схемы ускорения при решении САНН задач тесно связана с качеством разностной схемы, используемой для аппроксимации уравнения переноса. Если используемая разностная схема при решении САНН задач не обеспечивает сходимость к разностному решению в C норме, то это обычно приводит и к замедлению поточечной сходимости алгоритмов ускорения

итераций. Полученные в данной работе, а также в работе [90] результаты позволили расширить класс SAHH задач, для которых проблема понижения эффективности KP_1 схемы ускорения решается достаточно успешно. Дальнейшее улучшение здесь возможно за счет повышения качества разностной схемы, используемой для аппроксимации уравнения переноса, в частности, за счет более полной идентификации критических экстраполяций, что позволило бы более эффективно использовать MDS_n алгоритм.

Глава 5. КР1 схема ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической краевой задачи

Введение

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).

Число внешних итераций по области термализации при наличии, например, в защитной композиции воды, разогретой до температуры порядка 600K° (реально реализуемая ситуация для водо-водяных реакторов), может быть достаточно велико (порядка 70 при точности сходимости внешних итераций $\varepsilon_{upsc} = 10^{-3}$ и использовании 5 групп нейтронов с термализацией (для которых присутствуют переходы из нижерасположенных групп) константных систем BUGLE96 [110] или BGL1000/440 [111]). При увеличении числа групп нейтронов в тепловой области, что имеет место при использовании мультигрупповых систем констант (VITAMIN-B6 [112], и мультигрупповая версия БНАБ-93 [113], имеющие, соответственно, 36 и 73 группы с термализацией) число таких внешних итераций может достигать нескольких тысяч, что делает проблематичным проведение соответствующих расчетов без ускорения внешних итераций.

Другая область приложений, в которых алгоритм ускорения внешних итераций также очень важен – это ускорение внешних итераций по источнику деления при решении подкритических задач с заданным внешним источником. ADS (accelerator driven systems) системы, в которых поле нейтронов в подкритической системе поддерживается источником spallation нейтронов, т. е. вторичных нейтронов, возникающих при взаимодействии с мишенью пучка протонов высокой энергии – являются практически важным примером таких систем. Как показывают теоретические оценки и практические расчеты, число внешних итераций по источнику деления при расчете таких систем может быть достаточно велико (порядка 70 при $k_{eff} = 0.94$), и их число неограниченно возрастает при $k_{eff} \rightarrow 1$. Таким образом, расчет систем, близких к критическим, в отсутствие эффективного алгоритма ускорения внешних итераций по источнику деления, представляет серьезную вычислительную проблему.

В данной главе мы рассмотрим обобщение КР₁ схемы применительно к задаче ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при реше-

нии подкритической задачи. Эффективность и устойчивость данного алгоритма существенно зависят от выбора формы спектра для ускоряющих поправок. В работах [108, 72, 109] эффективность данного алгоритма была исследована на примере 1D геометрий. В работах [13, 14], которым мы следуем в данной главе, были представлены дополнительные численные результаты по использованию алгоритма при решении практических задач в 1D, 2D и 3D геометриях в зависимости от выбора формы спектра для ускоряющих поправок и сформулирован вариант алгоритма ускорения внешних итераций, который, как показал опыт расчетов, обеспечивает необходимую эффективность при решении широкого класса практических задач. Данный алгоритм реализован в 1D, 2D и 3D S_n программах РОЗ-6.6 [56], КАСКАД-С [57] и КАТРИН [58], включенных в систему программ CNCSN [59, 60, 61].

Последовательность изложения в Главе 5 следующая. В разделах 5.1 и 5.2 на примере r, \mathcal{G}, z геометрии будет построена KP_1 схема для ускорения внешних итераций по области термализации и по источнику деления при решении подкритической задачи, соответственно. Разделы 5.3 и 5.4 посвящены описанию алгоритма определения вида спектра для корректирующих поправок KP_1 схемы для гомогенной и гетерогенной сред. В Разделе 5.5 приведены численные результаты по использованию KP_1 схемы ускорения внешних итераций. Обсуждению полученных результатов посвящен Раздел 5.6.

5.1. KP_1 схема для ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов

Обозначим через \mathfrak{F} интервал групп в котором имеются переходы вверх по группам за счет источника деления. Группа $q \in \mathfrak{F}$ если либо спектр деления χ^q либо сечение деления σ_f^q в этой группе отличны от нуля. Мы будем исходить из системы балансных соотношений для интервала групп \mathfrak{F} в r, \mathcal{G}, z геометрии:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k (\psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} - \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2}) + \mu_l v_i \Delta \mathcal{G}_j (\psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} - \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2}) + \\ & + \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j \left[\xi_{l,m} \left(A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \frac{C_i}{w_{l,m}} \left(\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2} \right) \right] + \\ & + \sigma_i^q V_{i,j,k} \psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - V_{i,j,k} \sum_{p \leq q} \sum_{\kappa=0}^{\kappa} \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n+1/2} =, \\ & = V_{i,j,k} \sum_{p > q} \sum_{\kappa=0}^{\kappa} \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m}^q, \quad q, p \in \mathfrak{F}, \quad (5.1.1) \end{aligned}$$

дополнительных уравнений:

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = a_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + (1 - a_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2}) \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2}, \quad a = \begin{cases} 1/(1+P_r), & \xi > 0 \\ P_r/(1+P_r), & \xi < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (5.1.2)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = b_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} + (1 - b_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2}) \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2}, \quad b = \begin{cases} 1/(1+P_g), & \eta > 0 \\ P_g/(1+P_g), & \eta < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_g \leq 1, \quad (5.1.3)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = c_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} + (1 - c_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2}) \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2}, \quad c = \begin{cases} 1/(1+P_z), & \mu > 0 \\ P_z/(1+P_z), & \mu < 0 \end{cases}, \quad 0 \leq P_z \leq 1, \quad (5.1.4)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} = (1 + P_{\xi}^q) \psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - P_{\xi}^q \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} d_{m'}^{q,l,m} \psi_{i,j,k,l,m'}^{q,n+1/2}, \quad 0 \leq P_{\xi} \leq 1 \quad (5.1.5)$$

и граничных условий при $r = r_{1/2} = r_{\text{int}} \geq 0$, $r = r_{I+1/2} = r_{\text{ext}}$, $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{1/2} = \mathcal{G}_0$, $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{J+1/2} = \mathcal{G}_{\text{end}}$,

$z = z_{1/2} = z_{\text{bot}}$, $z = z_{K+1/2} = z_{\text{top}}$:

$$\begin{aligned} \psi_{1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{q,\text{int}} + \sum_{\xi_{l,m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{int}} \psi_{1/2,j,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \xi_{l,m} > 0, \\ \psi_{I+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{q,\text{ext}} + \sum_{\xi_{l,m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{ext}} \psi_{I+1/2,j,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \xi_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

$$\begin{aligned} \psi_{i,1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{q,0} + \sum_{\eta_{l,m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,0} \psi_{i,1/2,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \eta_{l,m} > 0, \\ \psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{q,\text{end}} + \sum_{\eta_{l,m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{end}} \psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \eta_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,1/2,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{q,\text{bot}} + \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{bot}} \psi_{i,j,1/2,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \mu_l > 0, \\ \psi_{i,j,K+1/2,l,m}^{q,n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{q,\text{top}} + \sum_{\mu_{l'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{top}} \psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \mu_l < 0. \end{aligned} \quad (5.1.8)$$

В уравнениях (5.1.1)-(5.1.8) индекс $n+1/2$ обозначает результат решения многогрупповой системы кинетических уравнений (5.1.1)-(5.1.8) с правой частью, полученной на n -ой внешней итерации.

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

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1} &= \psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,j,k}^r + 3\eta_{l,m} f_{i,j,k}^g + 3\mu_l f_{i,j,k}^z \right), \\ \psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,n+1} &= \psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i\pm 1/2,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i\pm 1/2,j,k}^r \right), \\ \psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,n+1} &= \psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j\pm 1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,j\pm 1/2,k}^g \right), \\ \psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,n+1} &= \psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k\pm 1/2}^0 + 3\mu_l f_{i,j,k\pm 1/2}^z \right). \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

В уравнение (5.1.9) входит пространственно-независимая функция ε^q , которая определяет энергетическую зависимость ускоряющих поправок. Предполагается, что функция ε^q , которую мы также будем называть спектральной функцией, нормирована на единицу:

$$\sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon^q = 1. \quad (5.1.10)$$

Такая форма ускоряющих поправок с факторизованной энергетической зависимостью позволяет построить арифметически простую схему ускорения внешних итераций, согласованную с используемой разностной аппроксимацией уравнения переноса [72]. Эффективность и устойчивость этой схемы существенно зависит от выбора спектральной функции ε^q . В работе [72] была использована простейшая плоская (т. е., независящая от энергии) форма спектральной функции: $\varepsilon^q = 1/G$. Однако, этот выбор ε^q не является оптимальным. Использование в качестве ε^q распределения Максвелла с характерной температурой среды является более адекватным выбором в данной задаче. В этом случае величины ε^q вычисляются путем усреднения спектра Максвелла по энергетическому интервалу q -ой группы $\{E_{q+1/2}, E_{q-1/2}\}$:

$$\varepsilon^q \sim \frac{1}{\Delta E_q} \int_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}} E \exp(-E/kT) dE, \quad \Delta E_q = E_{q-1/2} - E_{q+1/2}, \quad k = 8.617385 \times 10^{-11} \text{ МэВ/К}, \quad \sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon^q = 1, \quad (5.1.11)$$

Более 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 [108]. Данный алгоритм определения ε^q рассмотрен ниже в Разделах 5.3 и 5.4.

Для нахождения ускоряющих поправок в уравнении (5.1.9) подействуем на балансное уравнение (5.1.1) и (аналогично “4-step” процедуре [71]) на дополнительные соотношения (5.1.2)–(5.1.4) операторами проектирования $\hat{\mathcal{L}}_0$, $\hat{\mathcal{L}}_r$, $\hat{\mathcal{L}}_g$ и $\hat{\mathcal{L}}_z$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_0 \psi &= \sum_{q \in \mathfrak{I}} \sum_{l,m} w_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}^q, & \hat{\mathcal{L}}_r \psi &= \sum_{q \in \mathfrak{I}} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}^q, & \hat{\mathcal{L}}_g \psi &= \sum_{q \in \mathfrak{I}} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} \psi_{i,j,k,l,m}^q, \\ \hat{\mathcal{L}}_z \psi &= \sum_{q \in \mathfrak{I}} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l \psi_{i,j,k,l,m}^q, \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

где интегрирование производится по энергетическому диапазону $q \in \mathfrak{I}$ и по восьми октантам единичной сферы угловых направлений. В итоге получим:

$$\begin{aligned} \Delta r_i \Delta z_k (f_{i,j+1/2,k}^g - f_{i,j-1/2,k}^g) + v_i \Delta g_j (f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z) + \Delta z_k \Delta g_j (A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^r) + \\ + \sum^{00} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^0 = V_{i,j,k} \mathcal{Q}_{i,j,k}^0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^0 \right) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j f_{i,j,k}^0 + \left(\Sigma^{11} V_{i,j,k} + \mathfrak{M}_r C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j \right) f_{i,j,k}^r = \\
& \qquad \qquad \qquad = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^r, \\
& \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) + \left(\Sigma^{11} V_{i,j,k} + \mathfrak{M}_g C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j \right) f_{i,j,k}^g = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^g, \\
& \frac{1}{3} v_i \Delta \vartheta_j \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right) + \Sigma^{11} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^z = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^z,
\end{aligned} \tag{5.1.13}$$

где

$$\begin{aligned}
\Sigma^{00} &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \left\{ \varepsilon^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{T}} \varepsilon^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \right\}, \quad \Sigma^{11} = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \left\{ \varepsilon^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{T}} \varepsilon^p \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \right\}, \\
Q_{i,j,k}^0 &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{p > q} \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \left(\Phi_{i,j,k}^{p,0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,0,n} \right), \quad Q_{i,j,k}^\alpha = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{p > q} \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \left(\Phi_{i,j,k}^{p,\alpha,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,\alpha,n} \right), \quad \alpha = r, g, z, \\
\Phi_{i,j,k}^{q,0} &\equiv \Phi_{0,i,j,k}^{q,0}, \quad \Phi_{i,j,k}^{q,r} \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,1}, \quad \Phi_{i,j,k}^{q,g} \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,-1}, \quad \Phi_{i,j,k}^{q,z} \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,0},
\end{aligned} \tag{5.1.14}$$

а дополнительные уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{A}_{i,j,k}^0 f_{i+1/2,j,k}^0 + \left(1 - \mathfrak{A}_{i,j,k}^0 \right) f_{i-1/2,j,k}^0 + \mathfrak{A}_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^r - f_{i-1/2,j,k}^r \right), \\
f_{i,j,k}^r &= \mathfrak{A}_{i,j,k}^2 f_{i+1/2,j,k}^r + \left(1 - \mathfrak{A}_{i,j,k}^2 \right) f_{i-1/2,j,k}^r + \mathfrak{A}_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^0 - f_{i-1/2,j,k}^0 \right) / 3,
\end{aligned} \tag{5.1.15}$$

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{B}_{i,j,k}^0 f_{i,j+1/2,k}^0 + \left(1 - \mathfrak{B}_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j-1/2,k}^0 + \mathfrak{B}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^g - f_{i,j-1/2,k}^g \right), \\
f_{i,j,k}^g &= \mathfrak{B}_{i,j,k}^2 f_{i,j+1/2,k}^g + \left(1 - \mathfrak{B}_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j-1/2,k}^g + \mathfrak{B}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) / 3,
\end{aligned} \tag{5.1.16}$$

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{C}_{i,j,k}^0 f_{i,j,k+1/2}^0 + \left(1 - \mathfrak{C}_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j,k-1/2}^0 + \mathfrak{C}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right), \\
f_{i,j,k}^z &= \mathfrak{C}_{i,j,k}^2 f_{i,j,k+1/2}^z + \left(1 - \mathfrak{C}_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j,k-1/2}^z + \mathfrak{C}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right) / 3.
\end{aligned} \tag{5.1.17}$$

Здесь величины \mathfrak{M}_r , \mathfrak{M}_g , \mathfrak{A}_x , \mathfrak{B}_x и \mathfrak{C}_x , $x = 0, 1, 2$ представляют собой усредненные по группам $q \in \mathfrak{T}$ с весом ε^q значения соответствующих групповых величин, определенных уравнениями (4.1.14) и (4.1.20):

$$\begin{aligned}
\mathfrak{M}_r &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon^q M_r^q, \quad \mathfrak{M}_g = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon^q M_g^q, \quad \mathfrak{A}_{i,j,k}^x = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon^q A_{i,j,k}^{x,q}, \quad \mathfrak{B}_{i,j,k}^x = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon^q B_{i,j,k}^{x,q}, \quad \mathfrak{C}_{i,j,k}^x = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon^q C_{i,j,k}^{x,q}, \\
& \qquad \qquad \qquad x = 0, 1, 2,
\end{aligned} \tag{5.1.18}$$

Для получения граничных условий для системы (5.1.13)-(5.1.17), повторим процедуру получения граничных условий (4.1.21)-(4.1.28) для алгоритма ускорения внутренних итераций, дополнив ее усреднением по группам $q \in \mathfrak{T}$ с весом ε^q граничных условий (5.1.6)-(5.1.8). С учетом вида используемых поправок (5.1.9), получим:

$$\begin{aligned}
l_0^r f_{1/2,j,k}^0 + 3l_1^r f_{1/2,j,k}^r &= 0, \quad m_0^r f_{I+1/2,j,k}^0 + 3m_1^r f_{I+1/2,j,k}^r = 0, \\
l_0^g f_{i,1/2,k}^0 + 3l_1^g f_{i,1/2,k}^g &= 0, \quad m_0^g f_{i,J+1/2,k}^0 + 3m_1^g f_{i,J+1/2,k}^g = 0,
\end{aligned}$$

$$l_0^z f_{i,j,1/2}^0 + 3l_1^z f_{i,j,1/2}^z = 0, \quad m_0^z f_{i,j,K+1/2}^0 + 3m_1^z f_{i,j,K+1/2}^z = 0, \quad (5.1.19)$$

где

$$l_p^\alpha = \sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon^q l_p^{q,\alpha}, \quad m_p^\alpha = \sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon^q m_p^{q,\alpha}, \quad p = 0,1, \quad \alpha = r, \mathcal{G}, z. \quad (5.1.20)$$

Из сравнения P_1 систем (4.1.12)-(4.1.28) и (5.1.13)-(5.1.20) следует, что KP_1 схема ускорения внешних итераций использует свертки по группам с весом ε^q величин M_r, M_g, A_x, B_x, C_x , $x = 0,1,2$; l_p^α, m_p^α , $p = 0,1$; $\alpha = r, \mathcal{G}, z$, рассчитываемых в KP_1 схеме ускорения внутренних итераций. Для решения системы (5.1.13)-(5.1.20) может быть использован метод расщепления, описанный выше в Главе 4.

По-точечно/по-групповой критерий сходимости внешних итераций, используемый в программе КАТРИН (а также в 1D и 2D программах РОЗ-6.6 и КАСКАД-С):

$$\max_{i,j,k,q \in \mathfrak{I}} \left| \frac{\Phi_{i,j,k}^{q,(n)} - \Phi_{i,j,k}^{q,(n-1)}}{\Phi_{i,j,k}^{q,(n)}} \right| < \varepsilon_{upsc}^{flux}, \quad (5.1.21)$$

где $\Phi_{i,j,k}^{q,(n)}$ - скалярный поток в (i, j, k) -ой пространственной ячейке q -ой группы на n -ой внешней итерации, а $\varepsilon_{upsc}^{flux}$ - заданная точность сходимости внешних итераций по скалярному потоку, представляется чрезмерно сильным, так-как в этом случае точность сходимости внутренних итераций по скалярному потоку ε_{in} должна быть задана, как правило, более высокой, чем $\varepsilon_{upsc}^{flux}$, для обеспечения сходимости итераций по критерию (5.1.21). Из уравнения (5.1.14) можно сделать вывод, что следующий более слабый по-точечный, но интегральный по энергии, критерий сходимости внешних итераций по области термализации может оказаться более предпочтительным, если не требуется выполнение более сильного критерия (5.1.21):

$$\max_{i,j,k} \left| \frac{U_{upsc,i,j,k}^{(n)} - U_{upsc,i,j,k}^{(n-1)}}{U_{upsc,i,j,k}^{(n)}} \right| < \varepsilon_{upsc}^{dens}, \quad U_{upsc,i,j,k}^{(n)} = \sum_{q \in \mathfrak{I}} \sum_{p > q} \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \Phi_{i,j,k}^{p,n}, \quad (5.1.22)$$

где $U_{upsc,i,j,k}^{(n)}$ - плотность источника рассеиваемых вверх по энергии нейтронов для (i, j, k) -ой пространственной ячейке, а $\varepsilon_{upsc}^{dens}$ - заданная точность сходимости внешних итераций по критерию (5.1.22). Отметим, что этот критерий вполне аналогичен критерию сходимости по плотности нейтронов деления, используемому в задачах с внешними итерациями по источнику деления.

Для уменьшения объема вычислительной работы в 3D программе КАТРИН была принята стратегия последовательного увеличения точности сходимости внутренних итераций $\varepsilon^{(n)}$ по мере уменьшения достигнутой ошибки сходимости внешних итераций $\varepsilon_{upsc}^{(n),flux}$:

$$\varepsilon^{(n)} = \begin{cases} \varepsilon_{upsc}^{flux} / 10, & n = 1 \\ \max(\varepsilon_{in}, \varepsilon_{upsc}^{flux}), & \varepsilon_{upsc}^{(n),flux} > 10 \\ \varepsilon_{in}, & 0.1 < \varepsilon_{upsc}^{(n),flux} < 10 \\ \min(\varepsilon_{in}, \varepsilon_{upsc}^{flux} / 10) & \varepsilon_{upsc}^{(n),flux} < 0.1 \end{cases}, \quad (5.1.23)$$

где ε_{in} и $\varepsilon_{upsc}^{flux}$ - заданные точности сходимости внутренних и внешних итераций по скалярному потоку. Кроме того, значение начального веса $P_g^{cut} = 0.95$ по переменной \mathcal{G} , используемое в алгоритме коррекции AWDD схемы, для 1-ой внешней итерации по области термализации (для которой имеют место максимальные градиенты потоков тепловых нейтронов) уменьшено до значения 0.93.

5.2. KP_1 схема для ускорения внешних итераций по источнику деления при решении подкритических задач

В данном параграфе мы рассмотрим, как модифицируется вышеописанная KP_1 схема ускорения внешних итераций в задаче об ускорении внешних итераций по источнику деления при решении подкритической краевой задачи. Обозначим через \mathfrak{F} интервал групп в котором имеются переходы вверх по группам за счет источника деления. Группа $q \in \mathfrak{F}$ если либо спектр деления χ^q либо сечение деления σ_f^q в этой группе отличны от нуля. Мы будем исходить из системы балансных соотношений для интервала групп \mathfrak{F} в r, \mathcal{G}, z геометрии:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k (\psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} - \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2}) + \mu_l v_i \Delta \mathcal{G}_j (\psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} - \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2}) + \\ & + \Delta z_k \Delta \mathcal{G}_j \left[\xi_{l,m} (A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2}) + \frac{C_i}{w_{l,m}} (\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2}) \right] + \\ & + \sigma_t^q V_{i,j,k} \psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - V_{i,j,k} \sum_{p \in \mathfrak{F}} \sum_{\kappa=0}^{\kappa} \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n+1/2} =, \\ & = V_{i,j,k} \frac{\chi^q}{4\pi} \sum_{p \in \mathfrak{F}} \nu \sigma_f^p \Phi_{i,j,k}^{p,0,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m}^q, \quad q, p \in \mathfrak{F}. \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

Осуществляя процедуру, аналогичную описанной в предыдущем параграфе, можно прийти к выводу, что в данном случае:

$$\begin{aligned} \Sigma^{00} &= \sum_{q \in \mathfrak{F}} \left\{ \varepsilon^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{F}} \varepsilon^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} - \chi^q \sum_{p \in \mathfrak{F}} \varepsilon^p \nu \sigma_f^p \right\}, \quad \Sigma^{11} = \sum_{q \in \mathfrak{F}} \left\{ \varepsilon^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{F}} \varepsilon^p \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \right\}, \\ \mathcal{Q}_{i,j,k}^0 &= \sum_{q \in \mathfrak{F}} \chi^q \sum_{p \in \mathfrak{F}} \nu \sigma_f^p (\Phi_{i,j,k}^{p,0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,0,n}), \quad \mathcal{Q}_{i,j,k}^{\alpha} = 0, \quad \alpha = r, \mathcal{G}, z. \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

Все остальные соотношения параграфа 5.1 с заменой $\mathfrak{X} \rightarrow \mathfrak{F}$ справедливы и в этом случае. Следует, однако, отметить, что в случае подкритической задачи без Фурье анализа основной гармоники ошибки не удастся определить вид спектральной функции ε^q , близкий к оптимальному.

В качестве критерия сходимости внешних итераций по источнику деления естественно воспользоваться по-точечным критерием сходимости для плотности нейтронов деления:

$$\max_{i,j,k} \left| \frac{N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)} - N_{fis,i,j,k}^{neut,(n-1)}}{N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)}} \right| < \varepsilon_{fis}^{dens}, \quad N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)} = \sum_{q=1}^Q \nu \sigma_f^q \Phi_{i,j,k}^{q,(n)}, \quad (5.2.3)$$

где ε_{fis}^{dens} - заданная точность сходимости внешних итераций по источнику деления.

5.3. Оценка формы спектра для ускоряющих поправок для гомогенной среды

Следуя [108, 72] получим оценку спектрального радиуса итерационного метода Гаусса-Зейделя (т. е. чистых неускоренных внешних итераций) решения системы групповых уравнений при наличии up-scattering на примере 1D плоской геометрии. В этом случае уравнение переноса на $n + 1/2$ -ой внешней итерации для интервала групп с up-scattering $q \in \mathfrak{X}$ может быть записано в следующем виде:

$$\mu \frac{\partial \psi^{q,n+1/2}}{\partial x} + \sigma \psi^{q,n+1/2}(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{p \leq q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} \Phi_l^{p,n+1/2}(x) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} \Phi_l^{p,n}(x) + F_l^q(x) \right], \quad q \in \mathfrak{X}, \quad (5.3.1)$$

где угловые моменты решения Φ_l^q определены следующим образом.

$$\Phi_l^q(x) = 2\pi \int_{-1}^1 \psi^q(\mu', x) P_l(\mu') d\mu'.$$

Вычитая из уравнения переноса уравнение (5.3.1), получим уравнение для поправок:

$$\mu \frac{\partial f^{q,n+1/2}}{\partial x} + \sigma f^{q,n+1/2}(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{p \leq q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n+1/2}(x) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n}(x) \right], \quad q \in \mathfrak{X}, \quad (5.3.2)$$

где

$$f^{q,n}(\mu, x) = \psi^q(\mu, x) - \psi^{q,n}(\mu, x), \quad f_l^{q,n}(x) = \Phi_l^q(x) - \Phi_l^{q,n}(x). \quad (5.3.3)$$

Представим пространственную зависимость поправок в виде разложения в ряд Фурье:

$$f^{g,n+1/2}(x, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^{g,n+1/2}(\lambda, \mu) e^{i\lambda x} d\lambda, \quad \Phi_l^{g,n+1/2}(x, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_l^{g,n+1/2}(\lambda, \mu) e^{i\lambda x} d\lambda. \quad (5.3.4)$$

Используя дополнительно предположение о гомогенности рассматриваемой среды, из уравнения (5.3.2) получим:

$$i\mu\lambda f^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) + \sigma_i^q f^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{p \leq q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n+1/2}(\lambda) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n}(\lambda) \right],$$

$$q \in \mathfrak{T}.$$
 (5.3.5)

В матричной форме уравнение (5.3.5) можно переписать в следующем виде:

$$\vec{f}^{n+1/2}(\lambda, \mu) = (i\mu\lambda \hat{I} + \hat{T})^{-1} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\hat{D}_l \vec{f}_l^{n+1/2}(\lambda) + \hat{U}_l \vec{f}_l^n(\lambda) \right].$$
 (5.3.6)

где \hat{I} - единичная матрица, \hat{T} - диагональная матрица полных сечений, $\vec{f}^{n+1/2}(\lambda, \mu)$ - зависящий от угла вектор ошибки, \hat{D}_l и \hat{U}_l - матрицы, составленные из l -ых гармоник матриц сечений переходов, описывающей down-scattering и up-scattering, соответственно, для диапазона групп $q \in \mathfrak{T}$.

В случае изотропного рассеяния ($L = 0$) умножая уравнение (5.3.6) на $P_0(\mu) = 1$ и интегрируя его по всем углам с учетом соотношения:

$$\int_0^1 \frac{d\mu}{1 + \lambda^2 \mu^2} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \lambda,$$
 (5.3.7)

получим:

$$\vec{f}_0^{n+1/2}(\lambda) = \hat{A}(\lambda) \vec{f}_0^n(\lambda) = (1 - \hat{C} \hat{D}_0)^{-1} \hat{C} \hat{U}_0 \vec{f}_0^n(\lambda), \quad \hat{C} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \left(\frac{\lambda}{\hat{T}} \right),$$
 (5.3.8)

где \hat{C} - диагональная матрица с элементами

$$C_{q,q} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \left(\frac{\lambda}{\sigma_i^q} \right).$$
 (5.3.9)

Матрица \hat{A} в уравнении (5.3.8) есть итерационная матрица метода Гаусса-Зейделя и ее собственные значения $\omega(\lambda)$ определяют скорость сходимости итерационного процесса для Фурье гармоники λ . Эти собственные значения и соответствующие им собственные вектора $\omega^q(\lambda)$, $q = 1, \dots, Q$, где q - число групп с up-scattering, могут быть определены используя стандартную библиотеку расчета собственных значений. Спектральный радиус итерационного процесса определяется как максимальное значение собственного значения оператора \hat{A} по всем гармоникам λ :

$$\rho = \max_{\lambda} \{ \rho_M(\lambda) \}, \quad \rho_M(\lambda) = \max_q \{ \omega^q(\lambda) \}, \quad q = 1, \dots, Q.$$
 (5.3.10)

Этот максимум достигается при значении $\lambda = 0$ [108, 72]. Используя разложение

$$\operatorname{arctg}(x) \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots, \quad |x| \ll 1,$$

получим, что для случая изотропного рассеяния:

$$\vec{f}_0^{n+1/2}(0) = \hat{A}(0)\vec{f}_0^n(0) = (\hat{T} - \hat{D}_0)^{-1} \hat{U}_0 \vec{f}_0^n(0). \quad (5.3.11)$$

Собственный вектор оператора $\hat{A}(0)$, отвечающий максимальному собственному значению этого оператора (главный собственный вектор), описывает энергетическое распределение наиболее медленно убывающей гармоники ошибки. Для ее эффективного подавления именно энергетическое распределение этой гармоники (нормированное на 1) естественно использовать в качестве формы спектра для ускоряющих поправок ε^q (5.1.9) для достижения максимальной эффективности KP_1 схемы ускорения внешних итераций [108].

В задаче термализации нейтронов при отсутствии поглощения нейтронов энергетическое распределение главной собственного вектора оператора $\hat{A}(0)$ совпадает с распределением Максвелла соответствующей температуры [108]. Поэтому, использование в качестве ε^q распределения Максвелла, усредненного по групповым интервалам (5.1.11) во многих случаях обеспечивает эффективность KP_1 схемы ускорения внешних итераций сопоставимую с использованием главного собственного вектора оператора $\hat{A}(0)$

Приведем здесь также без вывода полученное в [72] выражение для итерационной матрицы KP_1 схемы ускорения внешних итераций для случая изотропного рассеяния и гомогенной среды:

$$\hat{A}_{KP1} = (1 - k\hat{\Xi}\hat{U})\hat{A} - k\hat{\Xi}\hat{U}, \quad k = a[a(a-b) + \lambda^2/3]^{-1}, \quad a = \sum_q \varepsilon^q \sigma_t^q, \quad b = \sum_q \sum_p \varepsilon^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}, \quad (5.3.12)$$

где \hat{A} - итерационная матрица метода Гаусса-Зейделя (5.3.8), $\hat{\Xi}$ - матрица, имеющая ранг 1, с элементами:

$$\Xi_{q,p} = \varepsilon^q, \quad q = 1, \dots, Q. \quad (5.3.13)$$

Как показали результаты численного эксперимента [108], спектральный радиус оператора \hat{A}_{KP1} определяется вторым собственным значением оператора $\hat{A}(0)$ [108]. Для легких нуклидов, для которых эффект термализации существенен, второе собственное значение оператора $\hat{A}(0)$ значительно меньше первого и, следовательно, эффект ускорения весьма значителен.

5.4. Оценка формы спектра для ускоряющих поправок для гетерогенной среды

Оценка главной собственной функции метода Гаусса-Зейделя для реальной неоднородной гетерогенной задачи является достаточно сложной задачей. В работе [108] предлагается использовать в алгоритме ускорения внешних итераций несколько функций ε^q по числу имеющихся материалов среды. Однако, такой подход не учитывает влияния на спектр нейтронов в

зоне с некоторым материалом спектра нейтронов в соседних зонах с другими материалами. Кроме того, не для всех материалов среды могут иметься переходы вверх по-группам, обусловленные термализацией и (или) делением, которые учитываются в алгоритме ускорения соответствующих внешних итераций.

Следует также отметить, что при построении KP_1 схемы ускорения внешних итераций пространственная зависимость формы спектра для ускоряющих поправок приводит к необходимости введения дополнительных предположений, сводящихся к отбрасыванию некоторых слагаемых KP_1 оператора и потере согласованности схемы ускорения с используемой разностной аппроксимацией уравнения переноса. Все это может порождать неустойчивости алгоритма ускорения внешних итераций.

Как показали результаты работы [109] для случая одномерной плоской геометрии, а также результаты работы [14], в которой было выполнено численное исследование алгоритма в 1D, 2D и 3D геометриях, устойчивый и эффективно работающий алгоритм ускорения внешних итераций можно получить если при оценке главной собственной функции оператора $\hat{A}(0)$ (5.3.11) воспользоваться гомогенизированными сечениями среды. Для случая 3D геометрии эти сечения могут быть рассчитаны по формулам:

$$\bar{\sigma}_t^q = \sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sigma_{t,i,j,k}^q / \sum_{i,j,k} V_{i,j,k}, \quad \bar{\sigma}_{s,0}^{p \rightarrow q} = \sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sigma_{s,0,i,j,k}^{p \rightarrow q} / \sum_{i,j,k} V_{i,j,k}, \quad p, q = 1, \dots, Q. \quad (5.4.1)$$

5.5. Численные результаты использования KP_1 схемы ускорения внешних итераций

В данном параграфе мы представим численные результаты, иллюстрирующие эффективность согласованной KP_1 схемы ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи для 1D, 2D и 3D геометрий в зависимости от выбора спектральной функции ε^q . Все расчетные времена приведены для ПК Intel Pentium 4 2.8 Ghz.

В Табл. 5.5.1 и 5.5.2 приведено число внешних итераций по области термализации при решении двух задач в 1D цилиндрической геометрии.

Таблица 5.5.1. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбор ε^q при решении тестовой задачи в 1D цилиндрической геометрии из [115] (активная зона (1.58 м)+перегретая вода с температурой 600°K (1.0 м)) на пространственной сетке (по зонам) из 100+100 интервалов при точности сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$, соответственно.

Код и приближение	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Спектральная функция ε^q	Число внешних итераций	Расчетное время, мин
ROZ-6.6 P_7S_{14}	VITAMIN-B6, 199n+42g	36	$\varepsilon^q = Const$	25	1.70
			$\varepsilon^q \sim E \exp(-E/kT),$ $T = 600^\circ K$	6	0.87
			ε^q из Фурье анализа	7	0.91
ROZ-6.6 P_3S_{12}	ABBN93, 299n+15g	73	$\varepsilon^q = Const$	32	1.84
			$\varepsilon^q \sim E \exp(-E/kT),$ $T = 600^\circ K$	7	0.98
			ε^q из Фурье анализа	7	0.98

Таблица 5.5.2. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбора ε^q при расчете радиационной защиты РУ ВВЭР-1000 в 1D цилиндрической геометрии в P_5S_8 приближении с точностью сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$, соответственно.

Код и схема ускорения	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Спектральная функция ε^q	Число внешних итераций	Расчетное время, мин
ANISN ³ , ребаланс	BGL1000, 47n+20g	5	Ребалансный множитель $f(E, r) = Const$	>50	1.63 ⁴
ROZ-6.6, KP_1			$\varepsilon^q = Const$	21	4.22E-2
			$\varepsilon^q \sim E \exp(-E/kT),$ $T = 300^\circ K$	12	3.28E-2
			$\varepsilon^q \sim E \exp(-E/kT),$ $T = 500^\circ K$	5	2.78E-2
			ε^q из Фурье анализа	5	2.76E-2

³ По ребалансному множителю используется критерий сходимости 10^{-5} , что позволяет достичь удовлетворительной точности сходимости скалярных потоков в данной задаче.

⁴ Pentium IV 1.7 Ghz ПК.

ROZ-6.6, KP_1	ABBN93, 299n+15g	73	$\varepsilon^q = Const$	33	0.91
			$\varepsilon^q \sim E \exp(-E/kT),$ $T = 500^\circ K$	10	0.49
			ε^q из Фурье анализа	13	0.54

В Табл. 5.5.4 представлены результаты использования KP_1 схемы ускорения внешних итераций при решении 3-х групповой модельной задачи с термализацией [72] для 1D цилиндрической; 2D x, z, r, z и r, ϑ ; 3D x, y, z и r, ϑ, z геометрий. Сечения для этой модельной задачи определены в Табл. 5.5.3. В 1D цилиндрической (r) геометрии данная задача решалась для бесконечного однородного цилиндра радиусом 20 см; в x, z геометрии - для однородного бесконечного вдоль оси Oy параллелепипеда, поперечное сечение которого представляет собой квадрат с длиной стороны 20 см и условием зеркального отражения на границах $x = 0, z = 0$ и $z = 20$; в r, z геометрии - для однородного цилиндра радиусом 20 см и высотой 20 см с условиями зеркального отражения на сторонах $z = 0$ и $z = 20$ см; в r, ϑ геометрии - для сектора симметрии $0 < \vartheta < \pi/3$ бесконечного однородного цилиндра радиусом 20 см; в x, y, z геометрии - для гомогенного параллелепипеда размером $20 \times 10 \times 20$ см с условиями зеркального отражения на гранях $x = 0, y = 0, y = 20, z = 0$ и $z = 20$ см; и в r, ϑ, z геометрии - для сектора симметрии $0 < \vartheta < \pi/3$ однородного цилиндра радиусом 20 см и высотой 20 см с условиями зеркального отражения на границах $z = 0$ и $z = 20$ см. В рассматриваемой модельной задаче предполагается также, что в 1-ой группе имеется изотропный равномерно распределенный по всей расчетной области источник.

Таблица 5.5.3. Многогрупповая матрица рассеяния $\sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}$, групповые полные сечения σ_t^p и вид спектральной функции ε^q для 3-х групповой модельной задачи с термализацией [72]

Группа	$\sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}, 1/\text{см}$			$\sigma_t^q, 1/\text{см}$	Спектральная функция ε^q	
	1	2	3		$1/Q$	Оценка спектральной функции на основе Фурье анализа основной гармоники ошибки
p						
q						
1	0.60	0.19	0.18	1.0	1/3	0.33135
2	0.20	0.60	0.19	1.0	1/3	0.33531
3	0.20	0.20	0.60	1.0	1/3	0.33333

Таблица 5.5.4. Число внешних итераций и расчетные времена (в круглых скобках) при решении 3-х групповой модельной задачи с термализацией в 1D, 2D и 3D геометриях. Использовались AWDD схема, квадратура $ES_{1,2}$, по-точечные критерии сходимости внутренних и внешних (по области термализации) итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$, соответственно

Геометрия	Пространственная сетка	Число внешних итераций и расчетное время (мин)		
		Без ускорения	KP_1	
			$\varepsilon^q = 1/Q$	ε^q из Фурье анализа ошибки
1D цилиндрическая	20	78 (6.90E-3)	4 (9.11E-4)	4 (7.81E-4)
x, z	20×20	84 (7.60E-2)	6 (1.10E-2)	6 (1.03E-2)
r, z	20×20	75 (2.06E-1)	6 (1.70E-2)	6 (1.62E-2)
r, ϑ	20×5	74 (3.65E-2)	6 (6.83E-3)	8 (7.00E-3)
x, y, z	20×10×20	87 (4.81)	8 (3.38E-1)	8 (3.37E-1)
$r, \vartheta, z, P_g^{cut} = 0.95$	20×5×20	77 (3.81)	12 (3.35E-1)	12 (3.34E-1)

В Табл. 5.5.5 и 5.5.6 представлены результаты использования KP_1 схемы ускорения внешних итераций при решении практических задач в 2D и 3D геометриях.

Таблица 5.5.5. 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_3S_8 приближении с точностью сходимости внутренних и внешних (по области термализации)

итераций $\varepsilon_{in} = 5 \times 10^{-4}$ 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, $T = 600^\circ K$	58 (25.91)	12 (13.8)
				ε^q из Фурье анализа		12 (14.1)
	r, ϑ	134×60	32	Максвелл, $T = 500^\circ K$	42(4.22)	9 (2.99)
				Максвелл, $T = 600^\circ K$		8 (2.96)
ε^q из Фурье анализа	9 (2.98)					

ВВЭР-10000	r, z	173×155	16	Максвелл, $T = 600^\circ K$	72 (43.94)	9 (19.18)
				ε^q из Фурье анализа		9 (19.48)
	r, ϑ	204×120	32	Максвелл, $T = 600^\circ K$	69 (16.28)	7 (9.09)
				Максвелл, $T = 500^\circ K$		6 (9.08)
				ε^q из Фурье анализа		7 (9.13)

Таблица 5.5.6. 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 $\varepsilon_{upsc}^{flux} = 5 \times 10^{-3}$. 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
WWER-440	r, ϑ, z	139×60×189= 1576260	16	Максвелл, $T=600^\circ K$	60	Неустойчив
				ε^q из Фурье анализа		8 (38 часов)

В Табл. 5.5.8 представлены результаты расчета 3-х групповой модельной подкритической задачи для 1D цилиндрической, сферической, 2D r, z и 3D r, ϑ, z геометрий. Сечения для данного набора задач приведены в Табл. 5.5.7. В 1D сферической геометрии задача решалась для однородной гомогенной сферы радиусом 20 см. Геометрия остальных задач совпадает с вышерассмотренной 3-х групповой задачей с термализацией. В 1-ой группе задан изотропный однородный внутренний источник.

Таблица 5.5.7. Многогрупповая матрица рассеяния $\sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}$, групповые полные сечения σ_t^p , $\nu\sigma_f^q$, спектр деления χ^q и вид спектральной функции ε^q для 3-х групповой модельной подкритической задачи

Группа	$\sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}$, 1/см			σ_t^q , 1/см	$\nu\sigma_f^q$, 1/см	χ^q	Спектральная функция ε^q	
	1	2	3				1/Q	Полученная на основе Фурье анализа в 1D цилиндрической геометрии
p								
q								
1	0.56	0.0	0.0	1.0	0.1	0.4	1/3	0.26263
2	0.14	0.48	0.0	1.0	0.2	0.6	1/3	4.0404
3	0.20	0.20	0.60	1.0	0.3	0.0	1/3	0.33333

Таблица 5.5.8. Число внешних итераций и расчетные времена (в круглых скобках) при решении 3-х групповой модельной подкритической задачи в 1D, 2D и 3D геометриях. Использовались AWDD схема, квадратура ES_{12} , по-точечные критерии сходимости внутренних и внешних (по источнику деления) итераций $\varepsilon_{in} = 10^{-5}$ и $\varepsilon_{fis}^{dens} = 10^{-5}$

Геометрия	Сетка	Число внешних итераций и расчетное время (мин))		
		Без ускорения внешних ите- раций	KP_1	
			$\varepsilon^q = 1/Q$	ε^q из Фурье ана- лиза ошибки
1D цилиндрическая	20	31 (3.17E-3)	4 (8.34E-4)	3 (7.81E-4)
1D сферическая	20	31 (2.16E-3)	4 (3.32E-4)	3 (1.66E-4)
r, z	20×20	29 (5.30E-2)	5 (1.48E-2)	5 (1.47E-2)
$r, \vartheta, z, P_g^{cut} = 0.9$	20×5×20	31 (3.63)	6 (4.61E-1)	6 (4.86E-1)

В Табл. 5.5.9 представлены результаты использования KP_1 схемы ускорения внешних итераций при решении подкритической задачи (ADS бенчмарк [104]), изображенной на Рис. 3.6.3, в зависимости от значения k_{eff} для решаемой задачи. Спектральная функция ε^q для данной задачи, полученная на основе Фурье анализа, изображена на Рис. 5.5.1.

Таблица 5.5.9. Число внешних итераций при решении подкритического ADS бенчмарка (см. Рис. 3.6.3) 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 $\varepsilon_{fis}^{dens} = 10^{-3}$, соот-

ветственно

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)

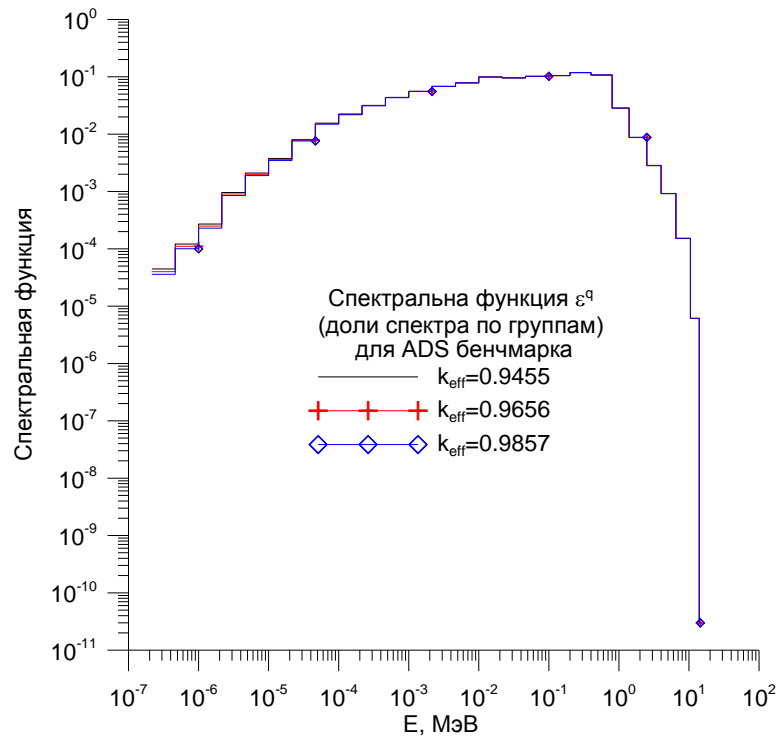


Рисунок 5.5.1. Зависимость формы спектра ускоряющих поправок KP_1 схемы ускорения внешних итераций по источнику деления от значения k_{eff} задачи при решении ADS бенчмарка

5.6. Обсуждение результатов

Как следует из приведенных численных результатов, а также из опыта решения практических задач, согласованная KP_1 схемы ускорения внешних итераций, если в качестве спектральной функции ε^q используется нормированная на 1 энергетическая зависимость главной

собственной функции оператора $\hat{A}(0)$ (5.3.11) для гомогенизированных сечений среды (5.4.1), является устойчивой и обеспечивает существенный вычислительный выигрыш. В задаче термализации нейтронов выбор в качестве спектральной функции ε^q функции Максвелла с характерной температурой среды (5.1.11) во многих случаях также демонстрирует близкую эффективность. Однако, имеется пример, когда такой выбор привел к неустойчивому алгоритму при решении задачи в 3D геометрии (см. Табл. 5.5.6.).

При использовании KP_1 схемы для ускорения внешних итераций при решении подкритических задач, Фурье анализ фактически является единственным средством для выбора адекватной спектральной функции ε^q . Так, выбор для вышерассмотренного ADS бенчмарка (см. Рис. 3.6.3, Табл. 5.5.9) $\varepsilon^q = 1/G$ приводит к неустойчивому алгоритму.

Глава 6. Разностные аппроксимации и итерационные алгоритмы в задачах переноса заряженного излучения

Введение

Метод дискретных ординат может быть с успехом применен к задачам расчета переноса электронно-фотонного (электроны, позитроны и фотоны) и адронного (протоны, пионы и нейтроны) каскадов в мишенях и радиационной защите ускорителей, в бланкетах ADS систем (accelerator driven systems), а также в медицинской физике и других приложениях, в которых возникает задача численного моделирования переноса электронно-фотонного и адронного каскадов в веществе. 1D, 2D и 3D S_N программы РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН из пакета CNCSN-2 были модифицированы для решения данного класса задач. Подготовка групповых сечений для расчета электронно-фотонного каскада осуществляется посредством программы SEPXS-BFP [120], представляющую собой адаптированную версию программы SEPXS [121, 122, 123], и программы САДКО-2.4 [125, 126], добавляющую высокоэнергетичную часть адронного каскада к имеющемуся объединенному файлу сечений для $n + \gamma$ задачи в формате FMAS-M [127].

6.1. Уравнение Больцмана-Фоккера-Планка для заряженных компонент излучения

Перенос заряженных компонент каскада может быть хорошо описан в рамках уравнения Больцмана-Фоккера-Планка (БФП (или VFP) уравнения) [128]. В БФП уравнении, представляющем собой регуляризованную форму уравнения переноса, для описания достаточно гладкой (“регулярной”) части рассеяния на большие углы используется интеграл рассеяния Больцмана; для описания же сильно вытянутой вперед (“сингулярной”) компоненты рассеяния используется Фоккер-Планковский (ФП) оператор. БФП уравнение может быть записано следующим образом:

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

$$= \int_0^\infty dE' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^{+1} d\mu' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \mu_s)\psi(\vec{r}, \mu', \varphi', E') + F(\vec{r}, \mu, \varphi, E). \quad (6.1.1)$$

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

Первые два оператора в этом уравнении – это ФП операторы. Оператор, содержащий производную по энергии – это оператор непрерывного замедления (continuous slowing-down (CSD) opera-

tor), оператор, содержащий вторые угловые производные – это оператор непрерывного отклонения (continuous-scattering operator). В уравнении (6.1.1) $\beta(E)$ - 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) [129]

$$\beta(E) = \int_0^E 2\pi \int_{-1}^1 \sigma_{\text{sing}}(E \rightarrow E', \mu_s)(E - E') d\mu_s dE', \quad \alpha(E) = \int_0^E 2\pi \int_{-1}^1 \sigma_{\text{sing}}(E \rightarrow E', \mu_s)(1 - \mu_s) d\mu_s dE', \quad (6.1.2)$$

где $\sigma_{\text{sing}}(E \rightarrow E', \mu_s)$ - сингулярная компонента рассеяния. В уравнении (6.1.1) $\sigma_t(E)$ и $\sigma_s(E' \rightarrow E)$ - полное сечение и регулярная часть сечения рассеяния [128, 129], μ_s - косинус угла рассеяния, F - заданный источник. К уравнению (6.1.1) 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 декомпозиция сечения рассеяния на регулярную и сингулярную компоненты:

$$\sigma_s(\mu) = \sigma_{\text{reg}}(\mu) + \sigma_{\text{sing}}(\mu), \quad \sigma_{\text{reg}}(\mu) \cong \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{4\pi} \sigma_{\text{reg},l} P_l(\mu), \quad \sigma_{\text{sing}}(\mu) \cong \sum_{k=0}^K \frac{\gamma_k}{2\pi} \delta^{(k)}(\mu - \mu_0), \quad (6.1.3)$$

где

$$\gamma_k = 2\pi \frac{(-1)^k}{k!} \int_{-1}^1 (\mu - \mu_0)^k \sigma_{\text{sing}}(\mu) d\mu, \quad (6.1.4)$$

K - порядок представления сингулярной компоненты рассеяния (для случая БФП уравнения $K = 1$), μ_0 - косинус угла расположения сингулярности ($\mu_0 = 1$) - это специальная задача, решаемая, обычно, с использованием Moment Based метода программой подготовки сечений [132, 135]. Аппроксимация 2-ого порядка точности ФП членов БФП уравнения (6.1.1) на сетке в 1D и 3D геометриях предложена в работах [133, 134].

6.2. Численный алгоритм решения БФП уравнения с явным учетом ФП членов

Основные черты численной методики решения БФП уравнения, реализованной в программе РОЗ-6.6, в которой явно учитываются члены непрерывного замедления и отклонения, мы рассмотрим на примере БФП уравнения в 1D сферической геометрии:

$$-r^2 \frac{\partial}{\partial E} [\beta \psi] - Tr^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] + \mu \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \psi) + r \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \psi \right] + \sigma_t r^2 \psi(r, \mu, E) = r^2 S(r, \mu, E).$$

(6.2.1)

Уравнение баланса для ячейки получается путем интегрирования уравнения (6.2.1) по разностной ячейке $[E_{q+1/2}, E_{q-1/2}] \times [r_{i-1/2}, r_{i+1/2}] \times [\mu_{m-1/2}, \mu_{m+1/2}]$, где $E_{q\pm 1/2}$ - границы q -ой энергетической группы ($E_{q+1/2} < E_{q-1/2}$), $q = 1, \dots, Q$; $i = 1, \dots, I$; $m = 1, \dots, M$. Воспользовавшись для аппроксимации члена непрерывного отклонения схемой второго порядка точности [133], в которой:

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\mu_{m-1/2}} = 2\alpha_{m-1/2} \frac{\psi_m - \psi_{m-1}}{\mu_m - \mu_{m-1}}, \quad (1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\mu_{m+1/2}} = 2\alpha_{m+1/2} \frac{\psi_{m+1} - \psi_m}{\mu_{m+1} - \mu_m}, \quad (6.2.2)$$

мы получим:

$$\frac{V}{\Delta E} (\beta^+ \psi_E^+ - \beta^- \psi_E^-) + |\mu| (A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) + \tilde{\sigma} V \psi = VS, \quad (6.2.3)$$

$$S_m = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l}^{reg} P_l(\mu_m) \Phi_l + \sum_{m'=1/2, 1, \dots, M} T_{m,m'} \psi_{m'} + F_m,$$

где

$$\alpha_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} = -w_m \mu_m, \quad \alpha_{1/2} = \alpha_M = 0, \quad m = 1, \dots, M, \quad (6.2.4)$$

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

$$\psi_r^\pm = \begin{cases} \psi_{i\pm 1/2, m, q}, & \mu_m > 0 \\ \psi_{i\mp 1/2, m, q}, & \mu_m < 0 \end{cases}, \quad A^\pm = \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, & \mu_m > 0 \\ A_{i\mp 1/2}, & \mu_m < 0 \end{cases}$$

$$\psi_{E,q}^\pm = \Delta E_q \psi_{i, m, q\pm 1/2}, \quad \beta^\pm = \beta(E_{q\pm 1/2}), \quad \Delta E_q = E_{q-1/2} - E_{q+1/2}, \quad \psi_{E, q+1}^- = (\Delta E_{q+1} / \Delta E_q) \psi_{E, q}^+, \quad \psi_{E, q=1}^- = 0,$$

$$T_{m,m'} = T \begin{pmatrix} \lambda_0 - \bar{B}_{1/2} & \bar{C}_{1/2} & 0 & 0 & \cdot \\ \bar{A}_1 & \lambda_0 - \bar{B}_1 & \bar{C}_1 & 0 & \cdot \\ 0 & \bar{A}_2 & \lambda_0 - \bar{B}_2 & \bar{C}_2 & \cdot \\ 0 & 0 & \bar{A}_3 & \lambda_0 - \bar{B}_3 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \tilde{\sigma}_t &= \sigma_{t, BFP} + \sigma^{FP}, \\ \sigma^{FP} &= T \lambda_0, \\ \lambda_0 &= \max_m (\bar{B}_m), \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

$$\bar{A}_m = \frac{2\alpha_{m-1/2}}{w_m (\mu_m - \mu_{m-1})}, \quad \bar{C}_m = \frac{w_{m+1}}{w_m} \bar{A}_{m+1}, \quad \bar{B}_m = \bar{A}_m + \bar{C}_m, \quad \bar{C}_{1/2} = \bar{B}_{1/2} = \frac{2}{1 + \mu_1}. \quad (6.2.6)$$

В уравнении (6.2.3) $\sigma_{s,l}^{reg}$ - моменты регулярной компоненты сечения рассеяния;

$$\Phi_l = \text{угловые моменты потока: } \Phi_l = 2\pi \sum_m w_m P_l(\mu_m) \psi_m;$$

$\tilde{\sigma}_t$ = эффективное полное сечение;

F_m = постоянная (т. е. независящая от решения в данной группе) компонента источника;

$$\psi_m^q = \int_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}} \psi_m(E) dE = \text{поток в группе } q \text{ для направления } \mu_m.$$

Величина λ_0 в уравнении (6.2.5) выбрана таким образом, чтобы обеспечить неотрицательность диагональных элементов матрицы $T_{m,m}$. В итоге, все элементы матрицы $T_{m,m}$ оказываются неотрицательными.

Используемая аппроксимация члена непрерывного отклонения точна на решениях вида $\psi(\mu) = a + b\mu$ и, следовательно, имеет второй порядок точности. Если по переменной μ используется равномерная сетка, то $\alpha_{m\pm 1/2} = (1 - \mu_{m\pm 1/2}^2)/2$.

Для получения разностной схемы уравнение баланса (6.2.3) дополняется дополнительными уравнениями WDD схемы по каждой из переменных r , μ и E :

$$\begin{aligned} \psi_r^+ &= (1 + P_r)\psi - P_r\psi_r^-, & \psi_{m+1/2} &= (1 + P_\mu)\psi - P_\mu\psi_{m-1/2}, & \psi_E^+ &= (1 + P_E)\psi - P_E\psi_E^-, \\ 0 &\leq P_r, P_\mu, P_E \leq 1. \end{aligned} \quad (6.2.7)$$

Среднее значение потока в ячейке в этом случае вычисляется по формуле:

$$\psi = \frac{|\mu|(A^- + P_r A^+)\psi_r^- + \frac{C}{w}(\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2})\psi_{m-1/2} + \frac{V}{\Delta E}(\beta^- + P_E \beta^+)\psi_E^- + VS}{|\mu|A^+(1 + P_r) + \frac{C}{w}\alpha_{m+1/2}(1 + P_\mu) + \frac{V}{\Delta E}\beta^+(1 + P_E) + \tilde{\sigma}V},$$

Для граничного направления $\mu = \mu_{1/2} = -1$ уравнение баланса и система дополнительных уравнений имеет вид:

$$\frac{V}{\Delta E}(\beta^+\psi_E^+ - \beta^-\psi_E^-) + [A^+\psi_r^+ - A^-\psi_r^- + (A^- - A^+)\psi] - TV(-\bar{B}_{1/2}\psi + \bar{C}_{1/2}\psi_1) + \tilde{\sigma}V\psi = VS, \quad (6.2.8)$$

$$\psi_r^+ = (1 + P_r)\psi - P_r\psi_r^-, \quad \psi_E^+ = (1 + P_E)\psi - P_E\psi_E^-, \quad 0 \leq P_r, P_E \leq 1. \quad (6.2.9)$$

Следует отметить, что согласно (6.2.6), коэффициенты \bar{A}_1 и \bar{C}_M равны нулю и необходимость в постановке краевых условий при $\mu = \pm 1$ для оператора непрерывного отклонения не возникает. Таким образом, при построении алгоритма для плоской геометрии можно не рассматривать направления $\mu = \pm 1$, а в сферической – достаточно ограничиться расчетом направления $\mu_{1/2} = -1$. Последнее входит с нулевым весом в квадратурную формулу, но, однако, необходимо для постановки граничного условия при $\mu = \mu_{1/2} = -1$ при расчете центральных ячеек.

Для граничных ячеек среднее значение потока в ячейке вычисляется по формуле:

$$\psi = \frac{|\mu|(A^- + P_r A^+)\psi_r^- + \frac{V}{\Delta E}(\beta^- + P_E \beta^+)\psi_E^- + VS}{|\mu|(A^- + P_r A^+) + \frac{V}{\Delta E}\beta^+(1 + P_E) + \tilde{\sigma}V}. \quad (6.2.10)$$

Весовые коэффициенты P_r , P_μ и P_E в дополнительных уравнениях (6.2.7), (6.2.9) находятся посредством AWDD схемы [10, 4, 11]. В программе PO3-6.6 для расчета переноса заря-

женных компонент излучения с явным учетом CSD члена реализован следующий вариант AWDD схемы. Вначале ячейка рассчитывается по DD схеме с $P_E = P_r = P_\mu = 1$. Затем по формуле

$$P_E = \begin{cases} 1, & U_E \leq U_E^0 \\ U_E^0/U_E, & U_E > U_E^0 \end{cases}, \quad U_E^0 = \frac{\beta^-}{\beta^- + \beta^+} = 1 - \delta_E, \quad U_E = b_E |u_E|, \quad u_E = \frac{\psi_E^- - \psi}{\psi}, \quad (6.2.11)$$

где $b_E \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной E , вычисляется вес P_E . При $P_E < 1$ ячейка пересчитывается с весом P_E по переменной E . Затем по формуле, соответствующей выбору корректирующей функции (1.7.9):

$$P_r = \begin{cases} 1, & U_r \leq U_r^0 \\ U_r^0/U_r, & U_r > U_r^0 \end{cases}, \quad U_r^0 = \frac{A^-}{A^- + A^+} = 1 - \delta_r, \quad U_r = b_r |u_r|, \quad u_r = \frac{\psi_r^- - \psi}{\psi}, \quad (6.2.12)$$

где $b_r \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной r , вычисляется вес P_r . При $P_r < 1$ ячейка пересчитывается с весами P_r и P_E по переменным r и E . Затем по аналогичной формуле:

$$P_\mu = \begin{cases} 1, & U_\mu \leq U_\mu^0 \\ U_\mu^0/U_\mu, & U_\mu > U_\mu^0 \end{cases}, \quad U_\mu^0 = \frac{\alpha_{m-1/2}}{\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}} = 1 - \delta_\mu, \quad U_\mu = b'_\mu |u_\mu|, \quad u_\mu = \frac{\psi_{m-1/2}^- - \psi}{\psi}, \quad (6.2.13)$$

где $b'_\mu = \max(1, 2b_\mu U_\mu^0)$, а $b_\mu \geq 1$ - параметр монотонизации по переменной μ , вычисляется вес P_μ и т. д. Использование в уравнении (6.2.13) величины b'_μ вместо b_μ обеспечивает более равномерную монотонизацию для угловых направлений $\mu > 0$. В РОЗ-6.6 параметры монотонизации выбраны следующим образом: $b_E = b_r = 2$, $b_\mu = 1$.

Расчетные формулы для WDD схемы в плоской геометрии получаются из соответствующих формул (6.2.1)-(6.2.7) для сферической геометрии путем замены:

$$r \rightarrow x, \quad A^\pm \rightarrow 1, \quad C_i \rightarrow 0, \quad V_i \rightarrow \Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}. \quad (6.2.14)$$

Так как в плоской геометрии отсутствует производная по углу, то дополнительное экстраполяционное уравнение по угловой переменной в этой геометрии не используется.

6.3. Неявные аппроксимации членов непрерывного отклонения и замедления БФП уравнения

Работа с трехдиагональной матрицей рассеяния предполагает существенную модификацию алгоритмов расчета интеграла рассеяния и ускорения внутренних итераций, предполагает хранение угловых распределений решения и т. д. Всего этого можно избежать, если воспользоваться P_L аппроксимацией [132] оператора непрерывного отклонения. При использовании этого приближения полное сечение и сечение рассеяния в группе изменяются следующим образом:

$$\sigma_{l,CSD}^q = \sigma_{l,BFP}^q + T^q L(L+1), \quad \sigma_{sl,CSD}^{q \rightarrow q} = \sigma_{sl,BFP}^{q \rightarrow q} + T^q [L(l+1) - l(l+1)], \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad L = M - 1 \quad (6.3.1)$$

и БФП уравнение трансформируется в уравнение с одним ФП членом – CSD оператором. Соответствующее приближение известно как ПНЗ (или CSD) приближение БФП уравнения. Конечно, использование приближение (6.3.1) приводит к возникновению проблем с положительностью индикатрисы рассеяния и возрастания полного сечения с ростом порядка P_L приближения.

Для подготовки сечений для заряженных компонент излучения (электронов и позитронов) в CSD приближении в пакете начальных данных к CEPXS-BFP следует задать опцию “Sn-CSD”.

Явный учет CSD оператора связан со значительной модификацией алгоритмов расчета разностной ячейки и ускорения внутренних итераций стандартной S_n программы. Кроме того, появляется необходимость в хранении угловых распределений потока на границах $E = E_{q \pm 1/2}$ рассчитываемой группы q . Для избежания необходимости явного учета CSD оператора, после аппроксимации CSD оператора с помощью разностной схемы, можно воспользоваться P_L приближением для членов, пропорциональных угловым распределениям потока из предыдущих групп (которые можно трактовать как переходы с δ -образной угловой зависимостью межгруппового сечения рассеяния).

Рассмотрим две неявные аппроксимации CSD члена, основанные на использовании для аппроксимации этого члена 2Step и DD схем, которые не требуют явного учета CSD члена в расчетной программе.

В случае использования по энергетической переменной взвешенной 2Step (W2Step) схемы [136, 137] дополнительное уравнение по энергетической переменной E имеет вид:

$$\psi_{q+1/2} = \left(1 + \frac{P_q}{2} \right) \frac{\psi^q}{\Delta E_q} - \frac{P_q}{2} \frac{\psi^{q-1}}{\Delta E_{q-1}}, \quad 0 \leq P_q \leq \frac{2\Delta E_q}{\Delta E_q + \Delta E_{q-1}} = P_q^{opt}. \quad (6.3.2)$$

Здесь ψ^{q-1} - среднее значения потока в ячейке для ближайшей верхней группы частиц того же сорта, что и в группе q , P_q - весовой коэффициент.

Случай $P = P^{opt}$ соответствует 2Step схеме, имеющей 2-ой порядок точности (близкая схема была предложена также в работе [130]). Случай $0 \leq P < P^{opt}$ соответствует взвешенной 2Step (W2Step) схеме. Эта схема имеет первый порядок точности. При $P = 0$ W2Step схема переходит в шаговую (Step) схему, которая положительна и монотонна. Теоретический анализ показал [137], что W2Step схема безусловно устойчива. W2Step схема не является ни положительной, ни монотонной. Однако, максимально возможное нарушение монотонности (амплитуда выброса) для 2Step схемы в 2 раза меньше, чем для DD схемы. Путем уменьшения веса P мож-

но улучшить свойства положительности и монотонности W2Step схемы. Стандартный выбор веса P_q , используемый в модуле BFPDAT программы ARVES-2.5 [127]: $P_q = P_q^{opt}$ при $q > 1$ и $P_q = 0$ при $q = 1$.

После подстановки дополнительного уравнения (6.3.2) и аналогичного уравнения для $\psi_{q-1/2}$ в уравнение баланса (6.2.3), мы получим:

$$\dots + \bar{\sigma}_t^q V \psi^q = V (S^q + \sigma_\beta^{q-1 \rightarrow q} \psi^{q-1} + \sigma_\beta^{q-2 \rightarrow q} \psi^{q-2}), \quad (6.3.3)$$

где

$$\bar{\sigma}_t^q = \sigma_t^q + \frac{1}{\Delta E_q} \beta_{q+1/2} \left(1 + \frac{P_q}{2} \right), \quad (6.3.4)$$

$$\sigma_\beta^{q-1 \rightarrow q} = \frac{1}{\Delta E_{q-1}} \left(\beta_{q-1/2} \left(1 + \frac{P_{q-1}}{2} \right) + \beta_{q+1/2} \frac{P_q}{2} \right), \quad \sigma_\beta^{q-2 \rightarrow q} = -\frac{P_{q-1}}{2 \Delta E_{q-2}} \beta_{q-1/2}. \quad (6.3.5)$$

Слагаемые $\sim \psi^{q-1}$ и ψ^{q-2} в правой части уравнения (6.3.3) можно интерпретировать как вклад диагональных матриц рассеяния из двух предыдущих групп. Воспользовавшись известными свойствами δ -функции и дополнительно предполагая, что угловые моменты потока убывают достаточно быстро и замена бесконечного ряда конечной суммой, соответствующей используемому порядку P_L приближения, не вносит существенной ошибки (такое предположение обосновано при наличии слабо зависящих от угла распределений потоков):

$$\sigma_\beta^{p \rightarrow q} \psi^p(r, \mu) \cong \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_\beta^{p \rightarrow q} P_l(\mu) \Phi_l^p(r), \quad (6.3.6)$$

мы получим многогрупповую задачу с модифицированными полным сечением $\bar{\sigma}_t^q$ (6.3.4) и гармониками сечения рассеяния $\bar{\sigma}_{s,j}^{p \rightarrow q}$ для межгрупповых переходов $q-2 \rightarrow q$ и $q-1 \rightarrow q$:

$$\bar{\sigma}_{s,j}^{q-1 \rightarrow q} = \sigma_{s,j}^{q-1 \rightarrow q} + \sigma_\beta^{q-1 \rightarrow q}, \quad \bar{\sigma}_{s,j}^{q-2 \rightarrow q} = \sigma_{s,j}^{q-2 \rightarrow q} + \sigma_\beta^{q-2 \rightarrow q}, \quad (6.3.7)$$

которая может быть решена стандартной S_n программой. 2Step схема не реализована в CEPXS-BFP, однако, сечения, подготовленные CEPXS-BFP с использованием "Sn-CSD" опции, могут быть преобразованы посредством утилиты BFPDAT из [127] к форме, в которой тормозная способность учитывается неявно с использованием 2Step схемы.

В случае использования по энергетической переменной алмазной (DD) схемы:

$$\psi_{q+1/2} = 2 \frac{\psi^q}{\Delta E^q} - \psi_{q-1/2}. \quad (6.3.8)$$

Поступая аналогичным образом, получим следующие выражения для модифицированных полных сечений и гармоник индикатрисы рассеяния для переходов $p \rightarrow q$ [131]:

$$\bar{\sigma}_i^q = \sigma_i^q + \frac{2\beta_{q+1/2}}{\Delta E_q}, \quad \bar{\sigma}_{s,j}^{p \rightarrow q} = \sigma_{s,j}^{p \rightarrow q} + \frac{(-1)^{q-p+1} 2(\beta_{q-1/2} + \beta_{q+1/2})}{\Delta E_q}, \quad p < q. \quad (6.3.9)$$

Сечения, определяемые уравнением (6.3.9), используются в пакете CEPXS/ONELD [121] по умолчанию. В адаптированной версии CEPXS-BFP это приближение для заряженных компонент излучения используется при задании опции “*Sn-indirect*”.

6.4. Согласованная KP_1 схема ускорения сходимости внутренних итераций для БФП уравнения

KP_1 схема, согласованная с WDD схемой, может быть применена для ускорения сходимости внутренних итераций для БФП уравнения (6.2.3)-(6.2.6) [74, 75]. Для ускорения итераций в KP_1 схеме используются с линейные поправки к нулевому и первому угловым моментам среднего значения потока в ячейке $\psi_{i,m}^{n+1/2}$ и потокам на радиальных гранях $\psi_{i\pm 1/2,m}^{n+1/2}$ (2.2.5), а также к потоку на выходящей энергетической грани ячейки: $\psi_{i,m,E}^{+,n+1/2}$:

$$\psi_{i,m,E}^{+,n+1} = \psi_{i,m,E}^{+,n+1/2} + \frac{1}{2} (f_{i,q+1/2}^0 + 3\mu_m f_{i,q+1/2}^1). \quad (6.4.1)$$

Дополнительные уравнения для поправок $f_{i,q+1/2}^0$ и $f_{i,q+1/2}^1$ по энергетической переменной E получаются путем применения операторов \hat{L}_0 и \hat{L}_1 (2.2.6) к дополнительному WDD уравнению по энергетической переменной (6.2.7):

$$\beta^+ f_{i,q+1/2}^0 = C_i^0 f_i^0 + C_i^1 f_i^1, \quad \beta^+ f_{i,q+1/2}^1 = \frac{1}{3} C_i^1 f_i^0 + C_i^2 f_i^1, \quad (6.4.2)$$

где

$$C_i^0 = \frac{1}{2} \beta^+ \sum_m w_m (1 + P_{i,m}^E), \quad C_i^1 = \frac{3}{2} \beta^+ \sum_m w_m \mu_m (1 + P_{i,m}^E), \quad C_i^2 = \frac{3}{2} \beta^+ \sum_m w_m \mu_m^2 (1 + P_{i,m}^E). \quad (6.4.3)$$

Используя процедуру, аналогичную описанной в параграфе 2.3, можно прийти к выводу, что согласованная KP_1 схема для БФП уравнения получается путем следующей подстановки в (2.3.5):

$$\sigma^{00} \rightarrow \sigma^{00} + \frac{C^0}{\Delta E}, \quad \sigma^{01} \rightarrow \sigma^{01} + \frac{C^1}{\Delta E}, \quad \sigma^{10} \rightarrow \sigma^{10} + \frac{C^1}{3\Delta E}, \quad \sigma^{11} \rightarrow \sigma^{11} + \frac{C^2}{\Delta E}. \quad (6.4.4)$$

Специальный вид матрицы $T_{m,m'}$ (6.2.5) позволяет получить следующие соотношения [74, 75]:

$$I_{m'}^{sing,l} = \sum_m w_m P_l(\mu_m) T_{m,m'} = w_m \sigma_{s,l}^{sing} P_l(\mu_{m'}), \quad l = 0, 1, \quad \sigma_{s,0}^{sing} = T\lambda_0, \quad \sigma_{s,1}^{sing} = T(\lambda_0 - 2). \quad (6.4.5)$$

Соотношения (6.4.5) являются весьма важным свойством используемой аппроксимации [133] члена непрерывного отклонения БФП уравнения (6.2.1). В итоге мы приходим к выводу, что условие инвариантности (2.2.13) и "4-step" процедура, примененные к БФП уравнению, оказываются эквивалентными, если мы используем $\sigma_{s,l} = \sigma_{s,l}^{reg} + \sigma_{s,l}^{sing}$, $l = 0, 1$, где величины $\sigma_{s,l}^{sing}$ определены посредством (6.4.5).

6.5. Проблема ускорения сходимости внутренних итераций для уравнения переноса электронов

Разработка методов ускорения сходимости внутренних итераций при расчете переноса электронов методом дискретных ординат – сложная и до конца не решенная проблема. В плоской геометрии для задач с сильной анизотропией рассеяния спектральный радиус KP_1 схемы ускорения определяется следующей формулой [82, 106]:

$$\rho = \sigma_{s,2} / \sigma_t \quad (6.5.1)$$

Оценка спектрального радиуса (6.5.1) в работе [75] (см. также параграф 2.4) обобщена на случай, когда закон рассеяния задан посредством матрицы рассеяния. В частности, для ФП матрицы рассеяния (6.2.5), согласно уравнению (2.4.9), имеет место следующая оценка спектрального радиуса [75]:

$$\rho = \tilde{\sigma}_{s,2} / \sigma_t, \quad \tilde{\sigma}_{s,2} = \frac{5}{2} \sum_{m,m'} w_m w_{m'} P_2(\mu_m) P_2(\mu_{m'}) T_{m,m'} \quad (6.5.2)$$

В выборе P_L представления для ФП индикатрисы рассеяния имеется степень свободы, связанная с неоднозначностью выбора полного сечения. Этой степенью свободы можно воспользоваться с целью уменьшения величины отношения (6.5.1), и, соответственно, повышения эффективности работы KP_1 схемы.

Стандартное P_L приближение ФП закона рассеяния (удовлетворяющее условию $\sigma_{s,L} = 0$) имеет следующий вид [132, 82, 106]:

$$\sigma_{s,0} = 0.5\sigma_{tr}L(L+1), \quad \sigma_{s,l} = \sigma_{s,0} - 0.5\sigma_{tr}l(l+1), \quad l = 1, 2, \dots, L, \quad (6.5.3)$$

где σ_{tr} обозначает транспортное сечение рассеяния.

Оптимальное P_L приближение ФП закона рассеяния (в котором минимизировано соотношение $\sigma_{s,2} / \sigma_t$) имеет следующий вид [106]:

$$\sigma'_{s,l} = \sigma_{s,l} - 0.5(\sigma_{s,2} + \sigma_{s,L}), \quad l = 0, 1, \dots, L. \quad (6.5.4)$$

ФП матрица рассеяния определена уравнением (6.2.5) с $T = \sigma_{tr} / 2$.

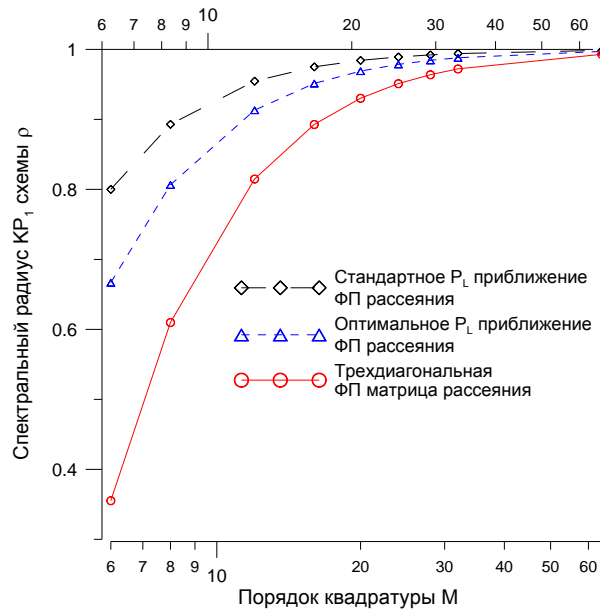


Рисунок 4.1. Спектральный радиус KP_1 схемы ускорения внутренних итераций в плоской геометрии в зависимости от способа аппроксимации ФП закона рассеяния

Как показывают результаты сравнения спектрального радиуса KP_1 схемы в зависимости от выбора аппроксимации ФП закона рассеяния, использование трех-диагональной ФП матрицы рассеяния дает оптимальный результат с точки зрения скорости сходимости итерационного процесса. С повышением порядка P_L приближения (порядка квадратуры при использовании ФП матрицы рассеяния) KP_1 схема ускорения деградирует. Для достижения необходимой эффективности, алгоритм ускорения должен ускорять сходимость примерно половины всех угловых моментов решения. В одномерных геометриях этим свойством обладают AMG [106] и MPSA [107] схемы. Однако, в неодномерных геометриях использование подобных схем обычно вызывает неустойчивость алгоритма ускорения. В 2D и 3D геометриях согласованная KP_1 схема становится неустойчивой при $\sigma_{s,1} > 0.5\sigma_{s,0}$ [3, 103, 78] и нуждается в регуляризации (см. выше параграфы 3.1 и 4.1). В задачах переноса заряженного излучения такая регуляризация сводится к чередованию итераций, на которых производится корректировка нулевого и первых угловых моментов решения, с некоторым числом итераций (обычно, 4), зависящим от используемого порядка P_L приближения индикатрисы рассеяния, на которых корректируется только скалярный поток.

Возможно, существует более общий и эффективный способ решения проблемы – использование для ускорения внутренних итераций БФП уравнения метода расщепления. В этом

случае БФП оператор \hat{A} разбивается на два оператора: $\hat{A} = \hat{A}_{rr} + \hat{A}_{dif}$, где оператор \hat{A}_{rr} - оператор, содержащий аппроксимации производных первого порядка и регулярную компоненту интеграла рассеяния; \hat{A}_{dif} - оператор, содержащий аппроксимации производных второго порядка, описывающих диффузию по угловым переменным, соответствующий сингулярной компоненте интеграла рассеяния. По отдельности оба эти оператора легко обращаются: \hat{A}_{rr} - итерационным методом с ускорением итераций посредством согласованной KP_1 схемы; \hat{A}_{dif} - прямым методом в плоской и сферической одномерных геометриях и итерационным методом в 1D цилиндрической и неодномерных геометриях (что является одним из существенных условий использования метода расщепления). Однако данный алгоритм находится лишь в стадии разработки и в данной работе не рассматривается.

6.6. Изменения, внесенные в оригинальную версию CEPXS для обеспечения совместной работы с программами РОЗ-6.6/КАСКАД-С/КАТРИН

Исходный вариант программы CEPXS подготовки многогрупповых сечений для расчета электронно-фотонного каскада, являющейся частью пакета CEPXS/ONELD [121, 122, 123] (идентификатор RSICC CCC-0544/04), получен из RSICC (США). Опция подготовки сечений, используемая в CEPXS по умолчанию, позволяет подготавливать сечения с применением *неявных* аппроксимаций Фоккер-Планковских членов БФП уравнения для их последующего использования S_n программой ONEDANT-LD. Опция “Monte-Carlo” [129], предполагающая *явный* учет ФП членов для их дальнейшего использования программой решения БФП уравнения методом Монте-Карло [129] также реализована в оригинальной версии CEPXS. Однако, возможность использования этой опции не отражена в официальных документах RSICC и потребовалось внести небольшие изменения в CEPXS для того, чтобы эта опция стала доступной для использования.

Главная цель выполненной адаптации – это реализация в CEPXS новых опций, основанных на опции “Monte-Carlo”, которые могут быть использованы для подготовки сечений для S_n программ РОЗ-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН), в которых реализована возможность явного учета CSD оператора, либо имеется возможность явного учета как CSD оператора, так и оператора непрерывного отклонения. Неявный учет ФП членов (достаточный для решения относительно простых задач в плоской геометрии), как уже отмечалось выше в параграфе 6.3, предполагает использование ряда существенных предположений, которые значительно ограничивают класс решаемых задач.

Явный учет S_n программой ФП членов БФП уравнения предоставляет возможность использования оптимальных аппроксимаций ФП членов и построения на этой основе эффективных алгоритмов решения широкого класса практических задач переноса электронно-фотонного каскада.

По характеру вносимых изменений (все внесенные изменения сопровождаются необходимыми комментариями в тексте программы) процесс адаптации CEPXS включал в себя несколько этапов.

На 1-ом этапе в CEPXS были внесены изменения синтаксического характера, позволившие компилировать эту программу не только на исходном компиляторе Lahey F77L-EM/32 FORTRAN77 (version 5.20), но и на более современном и эффективном компиляторе Compaq Visual Fortran 6.6C.

Далее, на базе имевшихся в оригинальной версии CEPXS бинарного *bxslib* формата с сечениями, в которых как CSD член, так член непрерывного отклонения учитываются в неявной приближенной форме (ориентированного на использование программой ONEDANT-LD), и ASCII *xslib* формата, содержащего групповые сечения непрерывного замедления и отклонения и ориентированного на явный учет соответствующих операторов в расчетной программе (предназначенного для решения БФП уравнения методом Монте-Карло) [129], реализованы следующие 3 новых опции (и соответствующие им ключевых слова).

Две новые опции основаны на использовании CEPXS ASCII *xslib* формата.

а) “Sn-CSD” опция. При использовании этой опции предполагается, что в S_n программе, в которой будут использоваться эти сечения, CSD оператор учитывается явно, а оператор непрерывного отклонения – неявно (в P_L приближении). В этом случае процедура декомпозиции внутригруппового сечения рассеяния в CEPXS отключается; в матрицу сечений записывается используемая S_n программой ограниченная тормозная способность для границ энергетических групп $\beta_{q+1/2}$ (только для верхних границ групп) на место, используемое CEPXS для хранения усредненных по группе значений ограниченной тормозной способности. Ограниченные тормозные способности на границах групп рассчитываются в CEPXS на промежуточном этапе (до использования DD схемы для аппроксимации члена непрерывного замедления) при подготовке сечений в формате *bxslib*. При этом пришлось также отказаться от использования в этом случае предложенного в [129] (стр. 382) эффективного разброса по энергии (*straggling*) для электронов, вводимого путем изменения сечения перехода из группы q в ближайшую группу $q + 1$ за счет соответствующего уменьшения среднего по группе значения ограниченной тормозной способности. Попытка ввести аналогичный *straggling* путем уменьшения значений ограниченной тор-

мозной способности на границах групп оказалась неудачной в силу имеющей место сильной анизотропии сечений рассеяния электронов.

b) “Sn-BFP” опция. При использовании этой опции предполагается, что в S_n программе, в которой будут использоваться эти сечения, как CSD оператор, так и оператор непрерывного отклонения будут учитываться явно. В этом случае в матрицу сечений записываются как значения ограниченной тормозной способности для границ групп, так и значения усредненного по группе ограниченного момента передачи (restricted momentum transfer) $\alpha^q = 2T^q$ в группе q . Значения α^q для электронов в CEPXS находятся с использованием moment based (MB) алгоритма декомпозиции индикатрисы рассеяния в группе q на регулярную и сингулярную компоненты [132]. При использовании “Sn-CSD” опции указанная декомпозиция не производится и в файл *xslib* пишутся исходные полные сечения и индикатрисы рассеяния в группах.

Реализация “Sn-CSD” и “Sn-BFP” опций включала также модификацию алгоритма учета вклада остановки заряженной частицы в сечения энерговыведения и депозиции заряда, связанную с переходом к использованию значений тормозной способности на границах групп.

c) “Sn-indirect” опция. Эта опция основана на использовании бинарного *bxslib* формата CEPXS и практически идентична стандартной опции, используемой программой ONEDANT, однако записи, относящиеся к шапке файла были изменены (описание записей шапки файла приводится ниже) для обеспечения более удобного интерфейса с препроцессором ARVES-2.5 [127], осуществляющим преобразование сечений в формате ANISN в формат FMAC-M [127]: бинарный рабочий формат групповых сечений, используемый программами PO3-6.6, КАСКАД-С и КАТРИН. Формат FMAC-M более экономно использует память, чем формат ANISN, а также специально приспособлен для решения каскадных процессов с участием нескольких типов частиц.

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

При наличии в файле констант сечений переходов $\sigma_s^{p \rightarrow q}$ 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 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:

$$1e, 2e, \dots, Qe, 1\gamma, 2\gamma, \dots, Q\gamma, \quad (6.7.1)$$

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

$$1e, 1\gamma, 2e, 2\gamma, \dots, Qe, Q\gamma, \quad (6.7.2)$$

приводит к тому, что многогрупповая матрица переходов приобретает нижнюю блочно-треугольную (lower block triangular (LBT)) форму:

$$\begin{array}{cccccccc} 1e \rightarrow 1e & 1\gamma \rightarrow 1e & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \\ 1e \rightarrow 1\gamma & 1\gamma \rightarrow 1\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \\ 1e \rightarrow 2e & 1\gamma \rightarrow 2e & 2e \rightarrow 2e & 2\gamma \rightarrow 2e & 0 & 0 & \dots & \\ 1e \rightarrow 2\gamma & 1\gamma \rightarrow 2\gamma & 2e \rightarrow 2\gamma & 2\gamma \rightarrow 2\gamma & 0 & 0 & \dots & \\ 1e \rightarrow 3e & 1\gamma \rightarrow 3e & 2e \rightarrow 3e & 2\gamma \rightarrow 3e & 3e \rightarrow 3e & 3\gamma \rightarrow 3e & \dots & \\ 1e \rightarrow 3\gamma & 1\gamma \rightarrow 3\gamma & 2e \rightarrow 3\gamma & 2\gamma \rightarrow 3\gamma & 3e \rightarrow 3\gamma & 3\gamma \rightarrow 3\gamma & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \end{array} \quad (6.7.3)$$

В этом случае внешние итерации по всей (большой) межгрупповой матрице рассеяния могут быть заменены на независимые внешние итерации внутри каждого блока. При этом источник, связанный с переходами из групп из вышерасположенных блоков в группы рассчитываемого блока может быть вычислен только один раз, так как он не зависит от номера внешней итерации в блоке (что позволяет существенно уменьшить вычислительные затраты).

Действительно, в силу закона сохранения энергии в каскадных процессах, порождаемые частицы имеют меньшую энергию, чем энергия налетающей частицы. При расчете электронно-фотонного каскада упорядочение групп «по энергии» частиц может быть осуществлено посредством утилиты ОПТИМ, входящих в программу ARVES-2.5 [127]. Если позитроны также присутствуют в объединенном файле сечений, LBT форма матрицы межгрупповых переходов частично нарушается в связи с наличием процессов аннигиляции. Однако и в этом случае имеет место значительный вычислительный выигрыш.

В случае расчета адронного каскада при наличии в высокоэнергетической части файла групповых сечений протонов, пионов и нейтронов, подготовленных для одинаковой энергетической сетки, переход от стандартной «по частичной» последовательности групп в объединенном файле сечений:

$$1p, 2p, \dots, Qp, 1\pi, 2\pi, \dots, Q\pi, 1n, 2n, \dots, Qn,$$

где Q - число групп протонов (пионов, нейтронов) в области адронного каскада, к их упорядочению «по энергии» частиц (САДКО-2 [125] подготавливает сечения для области адронного каскада именно с использованием такой упорядоченной по энергии последовательности групп):

$$1p, 1\pi, 1n, 2p, 2\pi, 2n, \dots, Qp, Q\pi, Qn,$$

приводит к тому, что многогрупповая матрица переходов для области адронного каскада также приобретает LBT форму, так как в силу закона сохранения энергии, порождаемые частицы имеют меньшую энергию, чем энергия налетающей частицы:

$$\begin{array}{cccccccccc}
 1p \rightarrow 1p & 1\pi \rightarrow 1p & 1n \rightarrow 1p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 1\pi & 1\pi \rightarrow 1\pi & 1n \rightarrow 1\pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 1n & 1\pi \rightarrow 1n & 1n \rightarrow 1n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 2p & 1\pi \rightarrow 2p & 1n \rightarrow 2p & 2p \rightarrow 2p & 2\pi \rightarrow 2p & 2n \rightarrow 2p & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 2\pi & 1\pi \rightarrow 2\pi & 1n \rightarrow 2\pi & 2p \rightarrow 2\pi & 2\pi \rightarrow 2\pi & 2n \rightarrow 2\pi & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 2n & 1\pi \rightarrow 2n & 1n \rightarrow 2n & 2p \rightarrow 2n & 2\pi \rightarrow 2n & 2n \rightarrow 2n & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1p \rightarrow 3p & 1\pi \rightarrow 3p & 1p \rightarrow 3p & 2p \rightarrow 3p & 2\pi \rightarrow 3p & 2n \rightarrow 3p & 3p \rightarrow 3p & 3\pi \rightarrow 3p & 3n \rightarrow 3p & \dots \\
 1p \rightarrow 3\pi & 1\pi \rightarrow 3\pi & 1n \rightarrow 3\pi & 2p \rightarrow 3\pi & 2\pi \rightarrow 3\pi & 2n \rightarrow 3\pi & 3p \rightarrow 3\pi & 3\pi \rightarrow 3\pi & 3n \rightarrow 3\pi & \dots \\
 1p \rightarrow 3n & 1\pi \rightarrow 3n & 1n \rightarrow 3n & 2p \rightarrow 3n & 2\pi \rightarrow 3n & 2n \rightarrow 3n & 3p \rightarrow 3n & 3\pi \rightarrow 3n & 3n \rightarrow 3n & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array}
 \tag{6.7.4}$$

6.8. Расчет профилей энерговыделения и депозиции заряда

При использовании "Sn-CSD" и "Sn-BFP" опций расчет пространственного распределения энерговыделения производится по следующей формуле [129, 130]:

$$D_E(\vec{r}) = \sum_{q=1}^Q \Sigma_E^q \Phi^q(\vec{r}) + \sum_{k=1}^K E_{Q_k+1/2} \beta_{Q_k+1/2} \Phi_{Q_k+1/2}(\vec{r}), \tag{6.8.1}$$

где Σ_E^q и $\Phi^q(\vec{r})$ - сечение энерговыделения (керма-фактор) и скалярный поток в q -ой группе; $\beta_{Q_k+1/2}$ и $\Phi_{Q_k+1/2}(\vec{r})$ - ограниченная тормозная способность (для заряженных частиц) и скалярный поток на нижней границе $E_{Q_k+1/2}$ последней Q_k -ой группы частиц k -ого сорта (для нейтральных частиц $\beta_{Q_k+1/2} = 0$), K - количество типов частиц.

Пространственное распределение плотности имплантации (депозиции) заряда рассчитывался по следующей формуле [129, 130]:

$$D_C(\vec{r}) = \sum_{q=1}^Q \Sigma_C^q \Phi^q(\vec{r}) + \sum_{k=1}^K \beta_{Q_k+1/2} \Phi_{Q_k+1/2}(\vec{r}), \tag{6.8.2}$$

где Σ_C^q - сечение депозиции заряда в q -ой группе.

6.9. Численные примеры расчета переноса электронно-фотонного каскада

На Рис. 6.9.1-6.9.5, следуя [119], представлены результаты расчета в $P_{15}S_{16}$ приближении профилей энерговыделения и депозиции заряда для тестовой задачи из [121, 123], в которой мононаправленный поток электронов с энергией 1.0 МэВ падает нормально на пластину из алюминия, толщиной примерно 1 пробег (0.2107 см), с использованием пакета CEPXS-BFP/PO3-6.6 в сравнении с результатами расчета задачи посредством исходного пакета CEPXS/ONELD и экспериментальными данными [124, 123]. Вычисления были выполнены с использованием "Sn-BFP", "Sn-CSD" и "Sn-indirect" опций подготовки групповых сечений программы CEPXS-BFP для различных пространственных и энергетических сеток для нескольких разностных схем (AWDD, LD, LB и AWLB-WLD), реализованных в программе PO3-6.6. В PO3-6.6 нерассеянная компонента излучения вычисляется по аналитическим формулам [56]. В программе ONEDANT-LD при задании источника используется опция "normal", при которой нерассеянная компонента излучения не выделяется. Следует отметить, что алгоритм расчета нерассеянной компоненты излучения от заряженных компонент излучения с явным учетом CSD члена, реализованный в программном ПО3-6.6, подразумевает использование достаточно частой пространственной сетки в области, где вклад этой компоненты является существенным. Вместе с тем, если порядок используемой квадратуры, как в рассматриваемом случае, достаточно высок, использование аналитических формул для учета нерассеянной компоненты излучения не является существенным для достижения необходимой точности.

Из Рис. 6.9.1-6.9.5 можно сделать вывод, что использование LD и AWLB-WLD схем в сочетании с неявной опцией учета CSD члена путем использования для его аппроксимации DD схемы (6.3.9) является приемлемым выбором, если сетка по энергетической переменной достаточно подробная [123] для предотвращения эффекта немонотонности DD схемы. Использование LB схемы 4-ого порядка точности без коррекции по пространственной переменной приводит к немонотонным профилям рассчитываемых величин.

Использование AWDD схемы с параметрами монотонизации $b_E = b_r = 2$ в корректирующих функциях (6.2.11) и (6.2.12) в сочетании с "Sn-BFP" и "Sn-CSD" опциями подготовки групповых сечений дает приемлемый результат, но требует использования более частой пространственной сетки (в особенности, при применении "Sn-CSD" опции), по сравнению с нодальными LD или AWLB-WLD схемами. В AWDD схеме алгоритм коррекции используется по пространственной и энергетической переменным, что позволяет обеспечить необходимую степень монотонности разностного решения.

Явный учет CSD члена позволяет проводить расчет достаточно сложных задач переноса электронно-фотонного каскада. На Рис. 6.9.6 представлены нормированные на 1 электрон источника результаты расчета [117, 119] в CSD приближении с помощью пакета CEPXS-VFP/PO3-6.6 дифференциального спектра тормозного излучения, вылетающего в интервал углов $0-1^\circ$ из пластины из Cu, толщиной $d = 0.1X_0$ (1.3 z/cm^2) и $0.5X_0$ (6.5 z/cm^2), где $X_0 = 13 \text{ z/cm}^2$ - радиационная длина, облучаемой мононаправленным пучком электронов с энергией 300 МэВ. В этих расчетах использовалось $S_{202}P_{171}$ приближение с одинаковой логарифмической энергетической сеткой для электронов и фотонов с числом групп 60 каждая в диапазоне энергий 0.5 – 300 МэВ. По углу использовалась составная квадратура со сгущением узлов вперед, состоящая из гауссовой квадратур порядка $N = 172$ в интервале углов $\mu \in [-1, 0.992546151]$ ($\theta \in [7^\circ, 180^\circ]$), порядка $N = 10$ в интервале углов $\mu \in [0.992546151, 0.998623534]$ ($\theta \in [3^\circ, 7^\circ]$), порядка $N = 10$ в интервале углов $\mu \in [0.998623534, 0.999847695]$ ($\theta \in [1^\circ, 3^\circ]$) и порядка $N = 10$ в интервале углов $\mu \in [0.999847695, 1]$ ($\theta \in [0, 1^\circ]$). Для сравнения на этом же рисунке показаны результаты расчета дифференциального спектра тормозного излучения, вылетающего в интервал углов $0-1^\circ$ из медной пластины толщиной $d = 1.3 \text{ z/cm}^2$, полученные методом Монте Карло.

На Рис. 6.9.7 показано угловое распределение потока энергии тормозного излучения на выходе из рассматриваемых медных пластинок, толщиной $d = 1.3 \text{ z/cm}^2$ и $d = 6.5 \text{ z/cm}^2$, облучаемых пучком электронов с энергией 300 МэВ. Для сравнения на этом же рисунке показан результат решения задачи для случая $d = 1.3 \text{ z/cm}^2$ с использованием VFP опции пакета CEPXS-VFP/PO3-6.6 с гауссовой квадратурой S_{512} в P_{171} приближении и пространственной сеткой, состоящей из 340 пространственных шагов со сгущением сетки на границах пластинки.

Отметим, что использование последовательности групп, упорядоченной “по энергии частиц” (6.7.3), позволяет получить многократный вычислительный выигрыш при решении данной задачи.

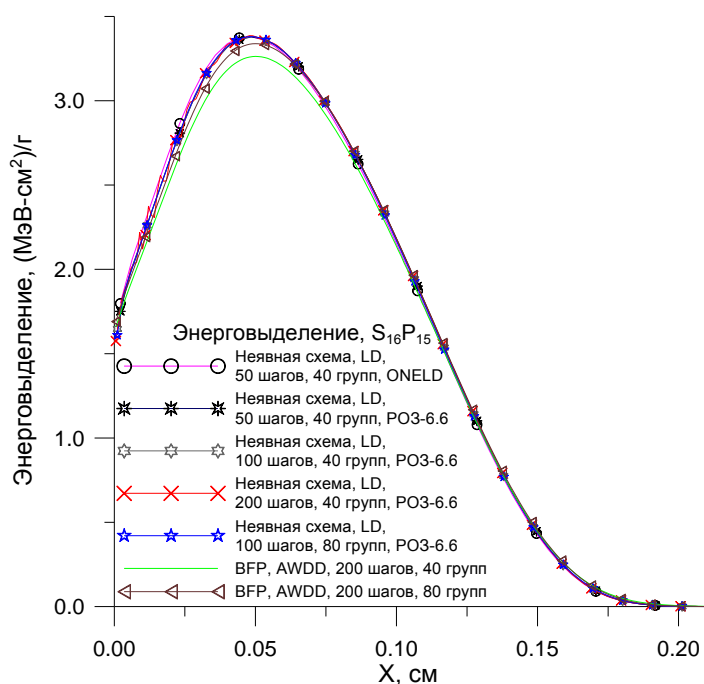


Рисунок 6.9.1. Профиль энерговыделения в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в CSD приближении с использованием неявной аппроксимации члена непрерывного замедления и LD схемы по пространственной переменной по программам ONELD и PO3-6.6, а также с использованием BFP приближения и AWDD схемы по программе PO3-6.6

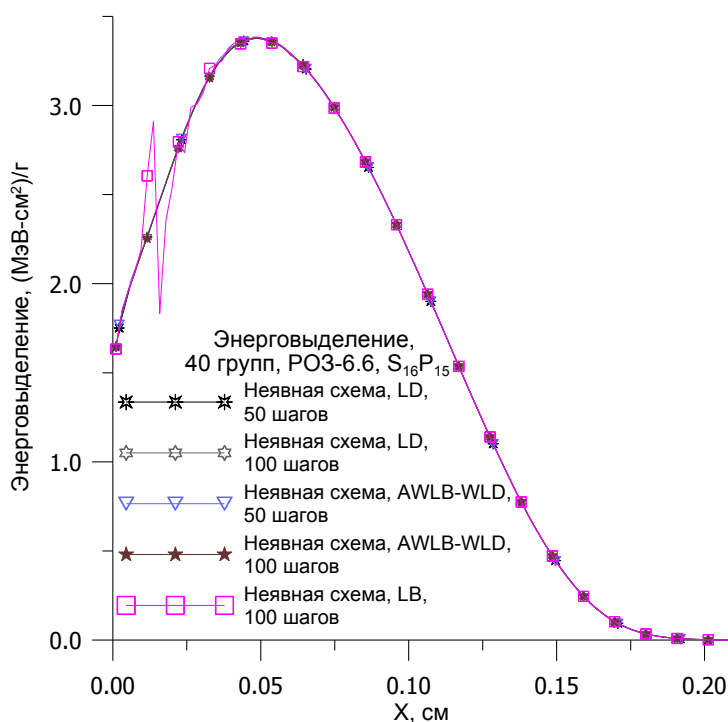


Рисунок 6.9.2. Профиль энерговыделения в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены с использованием неявной аппроксимации члена непрерывного замедления, LD, LB и AWLB-WLD схем по пространственной переменной по программе PO3-6.6

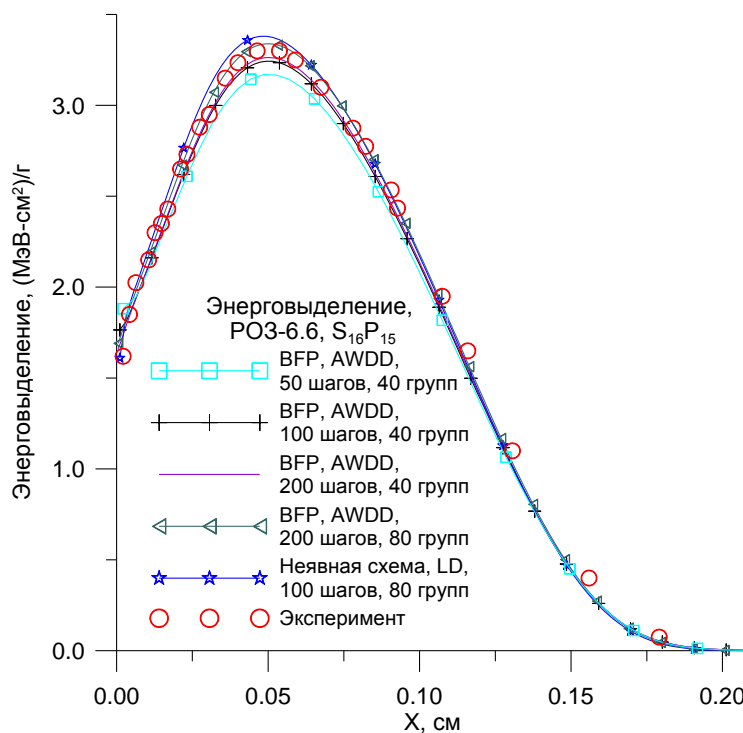


Рисунок 6.9.3. Профиль энерговыведения в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в BFP приближении с использованием AWDD схемы по программе ПОЗ-6.6. Приведены также экспериментальные данные

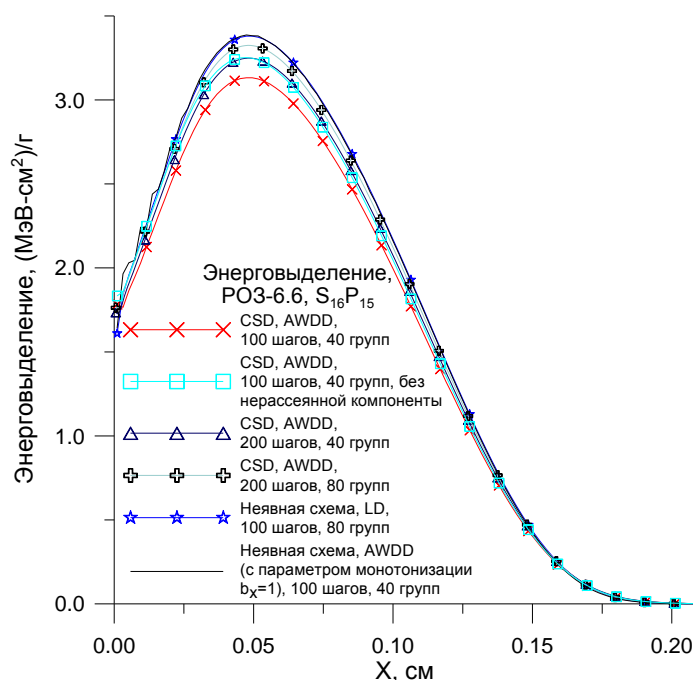


Рисунок 6.9.4. Профиль энерговыведения в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в CSD приближении с использованием AWDD схемы по программе ПОЗ-6.6

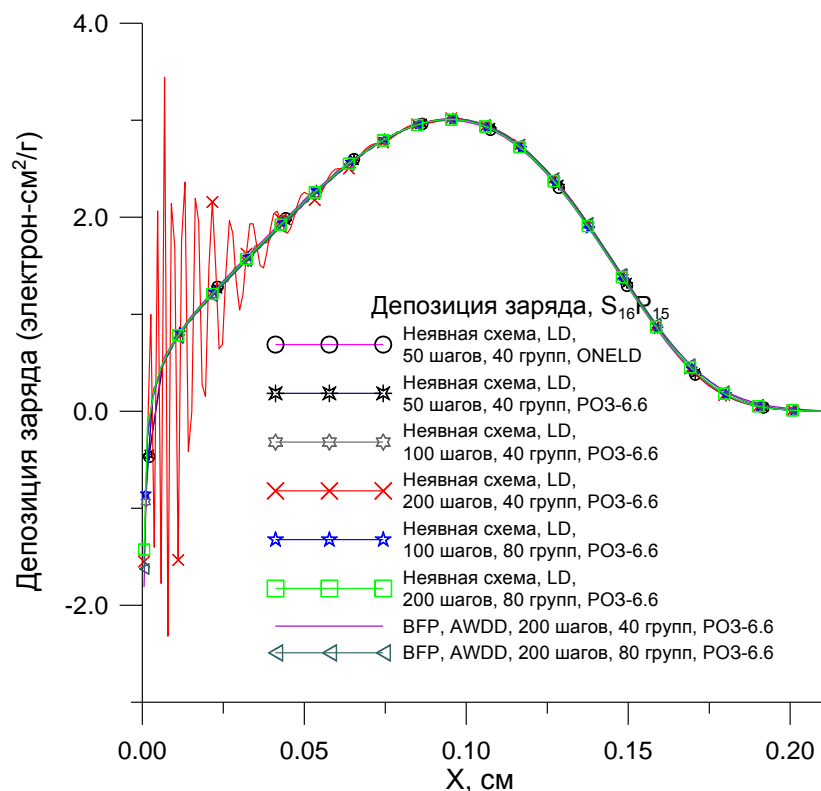


Рисунок 6.9.5. Профиль депозиции заряда в алюминиевой пластине толщиной 0.2107 см, на которую перпендикулярно падает поток электронов с энергией 1.0 МэВ. Расчеты выполнены в CSD приближении с использованием неявной аппроксимации члена непрерывного замедления и LD схемы по пространственной переменной по программам ONELD и PO3-6.6, а также с использованием BFP приближения и AWDD схемы по программе PO3-6.6

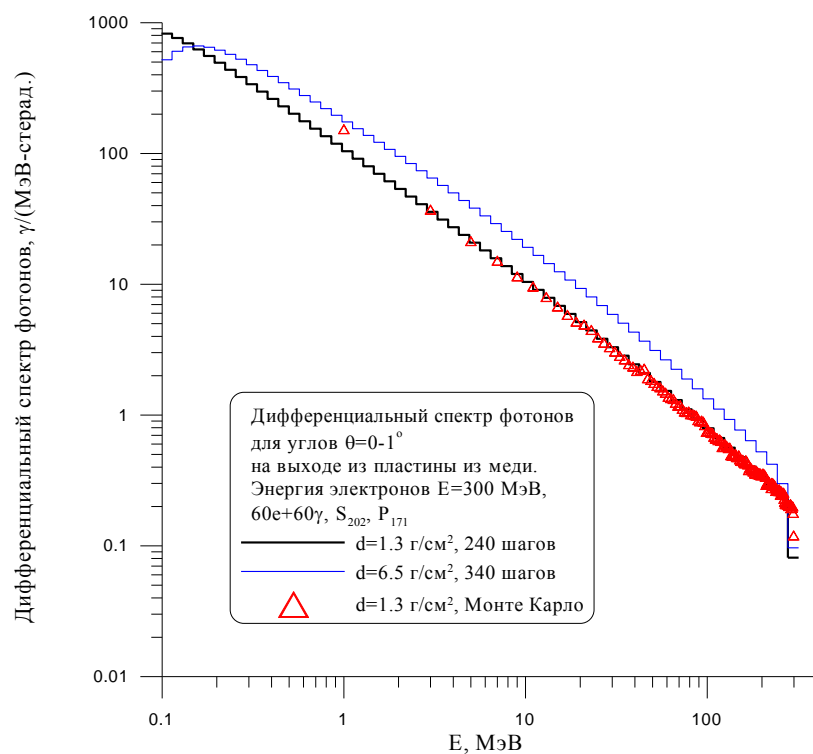


Рисунок 6.9.6. Дифференциальный спектр тормозного излучения, вылетающего в интервал углов $0-1^\circ$ из пластин из Cu, толщиной $d = 1.3 \text{ г/см}^2$ и $d = 6.5 \text{ г/см}^2$, облучаемых падающим перпендикулярно пучком электронов с энергией 300 МэВ

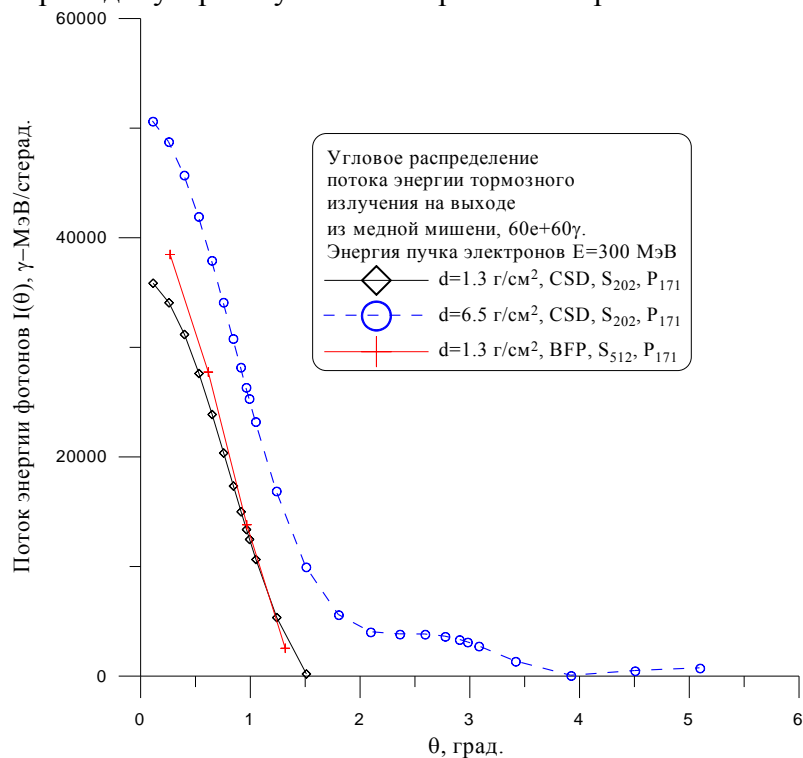


Рисунок 6.9.7. Угловое распределение полного потока тормозного излучения на выходе из пластин из Cu, толщиной $d = 1.3 \text{ г/см}^2$ и $d = 6.5 \text{ г/см}^2$, облучаемых падающим перпендикулярно пучком электронов с энергией 300 МэВ

6.10. Численные примеры расчета переноса адронного каскада

Таблица 6.10.1. Выход нейтронов из свинцовой мишени диаметром 20 см и длиной 60 см, облучаемую пучком протонов в сопоставлении с результатами экспериментов MRTI [152, 153]

Энергия пучка протонов, МэВ	Полное число групп	КАСКАД-С/ БНАБ- 93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (Монте-Карло)	Эксперимент MRTI
100	70	0.462		
200	76	2.39		
400	82	6.91		6.54
600	88	11.49		11.77
800	97	17.16		16.58

1000	97	23.11	21.01	21.5
1500	103	39.11	32.50	32.5
2000	109	52.20	41.98	42.0

Таблица 6.10.2. 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 [154]

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	ЛАНЕТ (preequilibrium model)	BNL experimental data (1998)	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (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

Таблица 6.10.3. Выход нейтронов из свинцовой мишеней диаметром 10 и 20 см и длиной 60 см, облучаемых пучком протонов в сопоставлении с результатами экспериментов COSMOTRON [154]

Энергия пучка протонов, МэВ	Мишень из Pb, $d = 10.0$ см, $l = 40$ см			Мишень из Pb, $d = 20.0$ см, $l = 60$ см		
	Эксперимент COSMOTRON	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (preequilibrium model)	Эксперимент COSMOTRON	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (preequilibrium model)
540	7.90	8.35	7.948	8.60	10.03	9.037
720	12.05	11.98	12.834	14.09	14.61	14.288
960	16.82	17.54	18.151	20.46	22.31	20.979
1470	26.82	27.59	30.136	31.82	37.57	32.240

Таблица 6.10.4. Выход нейтронов из оловянной и обедненной урановой мишеней диаметром 10 и длиной 60 см, облучаемых пучком протонов в сопоставлении с результатами экспериментов COSMOTRON [154]

Энергия пучка протонов, МэВ	Мишень из Sn, $d = 10.0$ см, $l = 40$ см			Мишень из обедненного U, $d = 20.0$ см, $l = 60$ см		
	Эксперимент COSMOTRON	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (preequilibrium model)	Эксперимент COSMOTRON	КАСКАД-С/БНАБ-93/САДКО-2.4	ЛАНЕТ (preequilibrium model)
540	4.65	4.88	5.897	18.64	13.02	13.796
720	8.37	7.08	8.959	29.09	19.01	20.600
960	11.82	9.87	12.512	40.46	28.77	31.381
1470	16.36	14.40	18.192	57.73	48.21	50.295

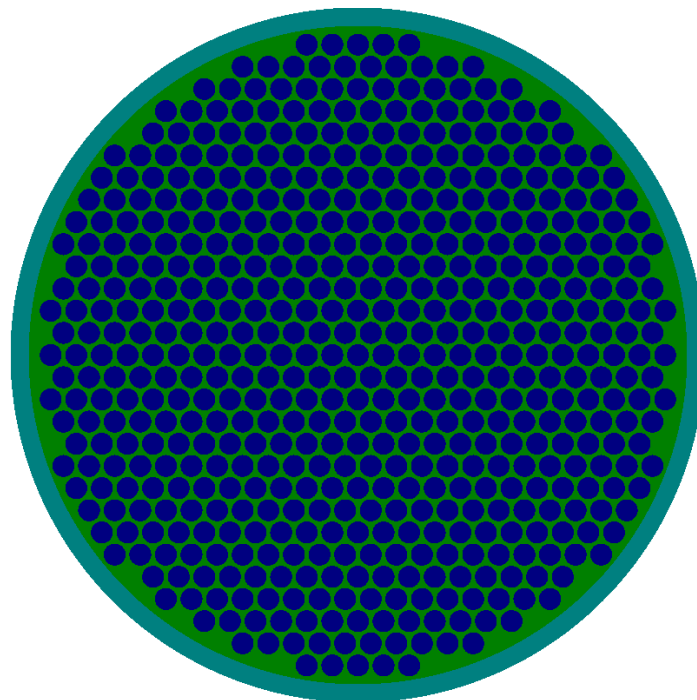


Рисунок 6.10.1. Поперечное сечение мишени, составленной из стержней из вольфрама диаметром 0.6 см и длиной 40 см. Стержни помещены в узлах гексагональной решетки с шагом 0.7 см, помещенной в жидкосолевой раствор FLiNaK (46.5 % LiF – 11.5 % NaF – 42 % KF). Оболочка

мишени сделана из сплава хастеллой с внешним диаметром 9.5 см и толщиной 0.5 см. Задание геометрии осуществлено посредством геометрического модуля программы MCU

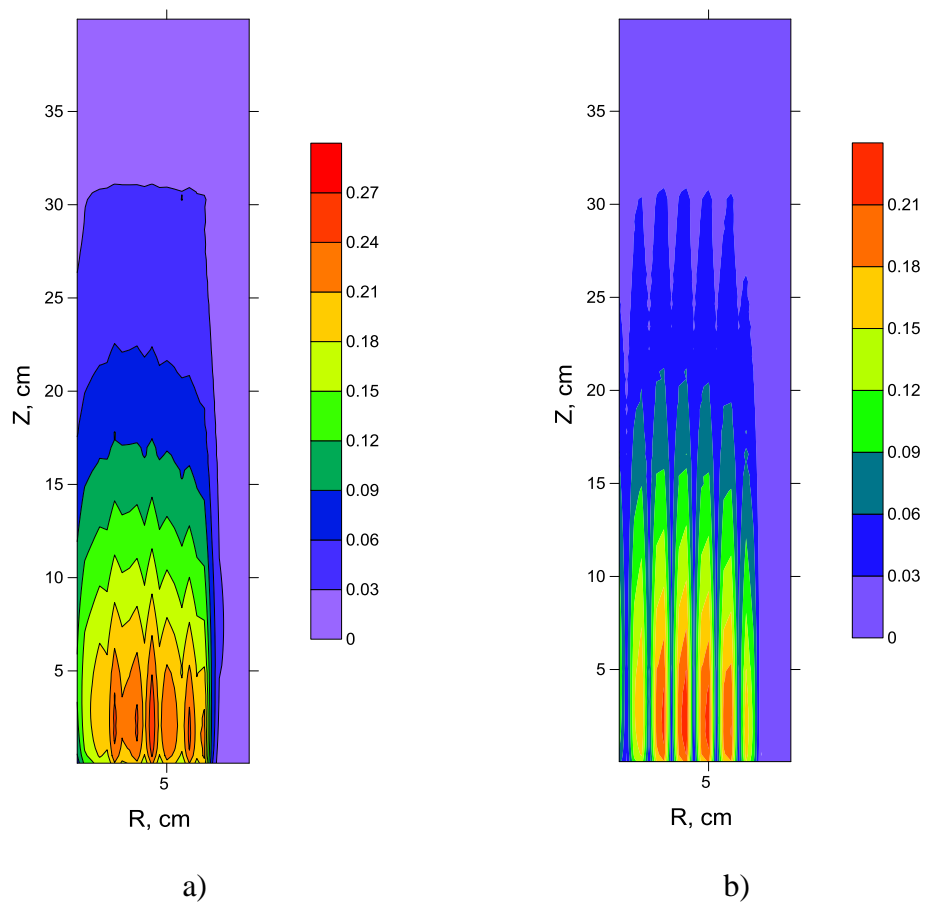


Рисунок 6.10.2. Пространственное распределение энерговыделения в мишени из вольфрама: в аксиальных сечениях: (а) при $\vartheta = 0.25^\circ$ и (б) $\vartheta = 29.75^\circ$, МэВ/(см³-сек) [155, 156]

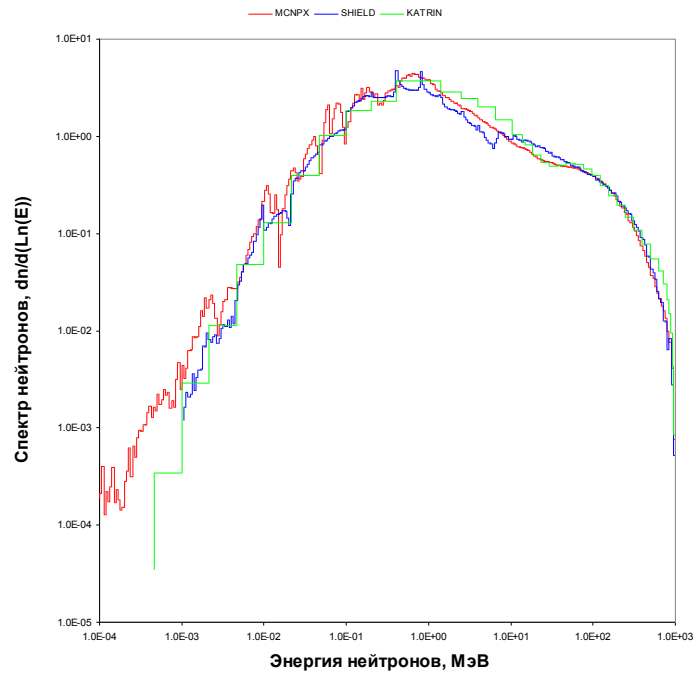


Рисунок 6.10.3. Спектры нейтронов [155, 156] на боковой поверхности мишени, полученные по программам MCNPX_{Bertini/Dresner} [150], SHIELD [151], КАТРИН [58]

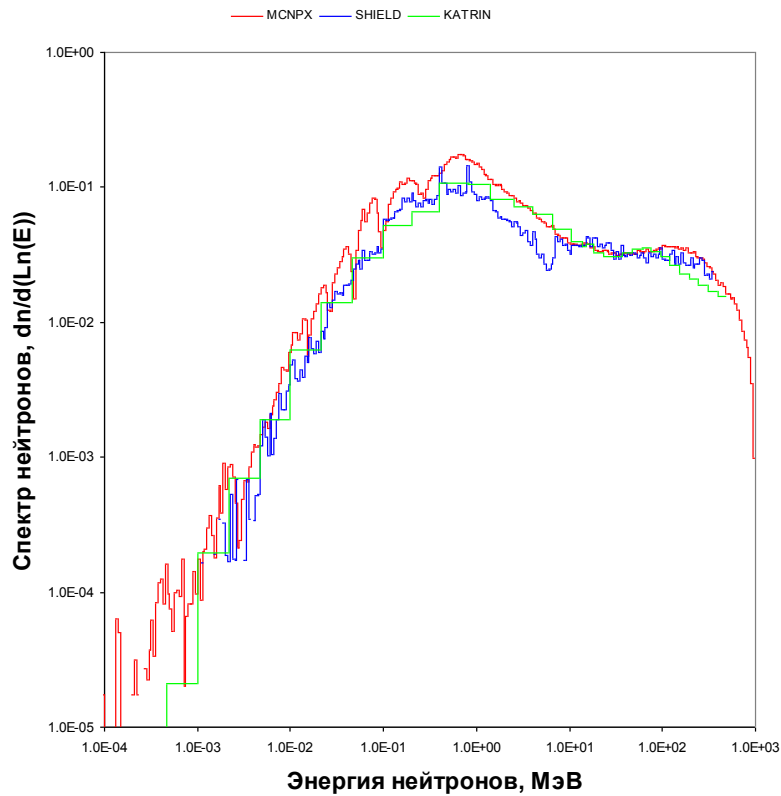


Рисунок 6.10.4. Спектры нейтронов на нижнем торце мишени, полученные по программам MCNPX_{Bertini/Dresner}, SHIELD, КАТРИН

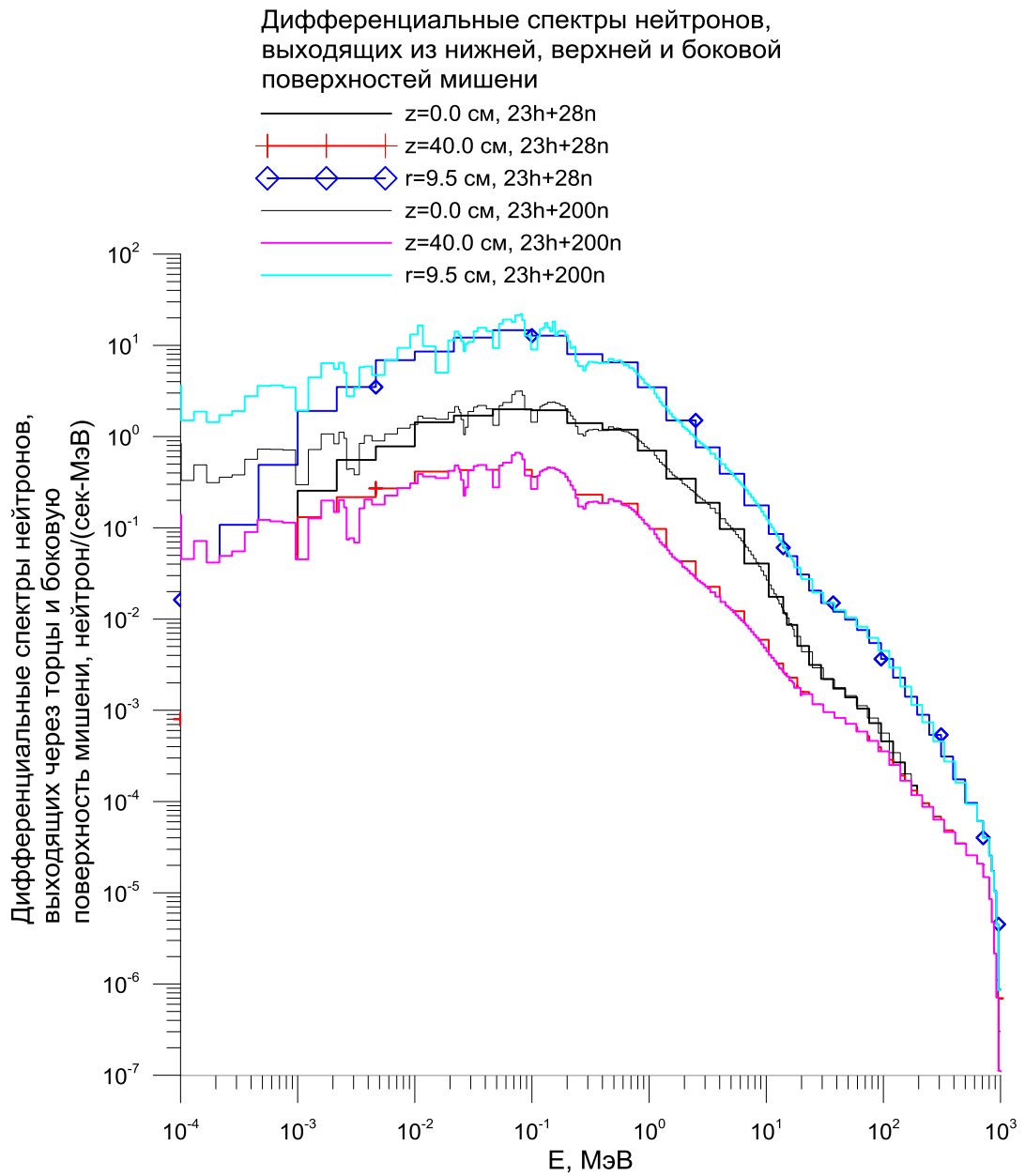


Рисунок 6.10.5. Сопоставление спектров нейтронов, выходящих из торцевых и боковой поверхностей мишени из вольфрама, рассчитанных по программе КАТРИН с использованием константных систем САДКО+CONSYST/БНАБ98 (23h+28n) и САДКО+SCALE-6.1/(V7-200N47G)[157] (23h+200n).

Глава 7. Распараллеливание вычислений при решении уравнения переноса в 2D и 3D геометриях

Введение

В данной главе рассматривается алгоритм распараллеливания вычислений, реализованный в 2D и 3D S_n программах КАСКАД-С и КАТРИН [139]. При выборе алгоритма распараллеливания вычислений использовались следующие критерии:

1. Параллельная версия программы должна функционировать на вычислительных системах с общей оперативной памятью (многоядерный ПК, рабочая станция, сервер); предполагается, что используемая ОС и компилятор поддерживают интерфейс OpenMP 3.0.

2. Масштабируемость (увеличение числа ядер/процессоров должно сопровождаться, по возможности, линейным ростом производительности программы), что предполагает: эффективное использование всех имеющихся потоков (threads); минимизацию накладных расходов, связанных с распараллеливанием; участки программы, в которых сохраняются однопоточные вычисления, не должны вносить существенный вклад в полное время расчета варианта.

3. Распараллеливание вычислений должно быть совместимо с уже реализованными в скалярных версиях программ алгоритмами ускорения внутренних и внешних итераций, а также, по возможности, не должно существенно менять устоявшуюся структуру внешних обменов.

Вышеуказанным требованиям удовлетворяет КВА алгоритм [140, 141] распараллеливания решения уравнения переноса. При этом, как и в программе PARTISN [142], для 3D x, y, z и r, ϑ, z геометрий мы ограничимся 2D версией этого алгоритма, предполагая, что распараллеливание вычислений на кинетическом шаге решения уравнения переноса происходит для текущего аксиального слоя.

7.1. Алгоритм распараллеливания вычислений в 3D S_n программе КАТРИН

Рассмотрим 2D КВА алгоритм на примере уравнения переноса в r, ϑ, z геометрии (1.1.6). В этом алгоритме для распараллеливания вычислений (что предполагает выделения каждому потоку отдельного объема вычислительной работы) производится декомпозиция поперечного сечения расчетной области на примерно одинаковые подобласти (см. Рис. 7.1.1). Последовательность расчета подобластей определяется необходимостью предоставления каждой из рассчитываемых подобластей правильных граничных условий. Изображенный на Рис. 7.1.1 случай отвечает последовательности расчета подобластей для III и VII октантов (см. Рис. 1.11.1). В

этом случае последовательно рассчитываются подобласти (отмеченные одинаковой маркировкой), находящиеся на диагоналях $n = 1, 2, \dots, N$, $N = I_{sub} + J_{sub} - 1$, где I_{sub} и J_{sub} - число подобластей по переменным r и ϑ , соответственно.

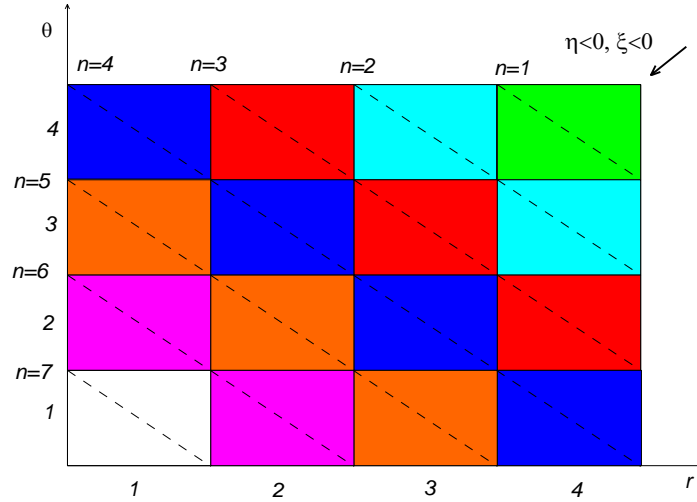


Рисунок 7.1.1. Последовательность расчета подобластей для III и VII октантов ($\eta < 0$, $\xi < 0$; см.

Рис. 1.11.1) при 2D декомпозиции поперечного сечения расчетной области

Таким образом, стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для III и VII октантов:

DO 1, j = J, 1, -1

DO 1, i = I, 1, -1

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

DO 1, n = 1, N

DO 1, i_{sub} = I_{sub}^{min}(n), I_{sub}^{max}(n)

$j_{sub} = N + 2 - i_{sub} - n$

DO 1, j = j_{sub}^{max}(j_{sub}), j_{sub}^{min}(j_{sub}), -1

DO 1, i = i_{sub}^{max}(i_{sub}), i_{sub}^{min}(i_{sub}), -1

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки.

Здесь

$$I_{sub}^{min}(n) = \begin{cases} I_{sub} - n + 1, & n \leq I_{sub} \\ 1, & n > I_{sub} \end{cases}, \quad I_{sub}^{max}(n) = \begin{cases} I_{sub}, & n \leq J_{sub} \\ I_{sub} + J_{sub} - n, & n > J_{sub} \end{cases}, \quad (7.1.1)$$

$i_{sub}^{\min}(i_{sub})$ и $i_{sub}^{\max}(i_{sub})$ - минимальный и максимальный номера радиальных ячеек для радиального интервала i_{sub} , $1 \leq i_{sub} \leq I_{sub}$; $j_{sub}^{\min}(j_{sub})$ и $j_{sub}^{\max}(j_{sub})$ - минимальный и максимальный номера азимутальных ячеек для азимутального интервала j_{sub} , $1 \leq j_{sub} \leq J_{sub}$.

Последовательность расчета подобластей для IV и VIII октантов изображена на Рис. 7.1.2.

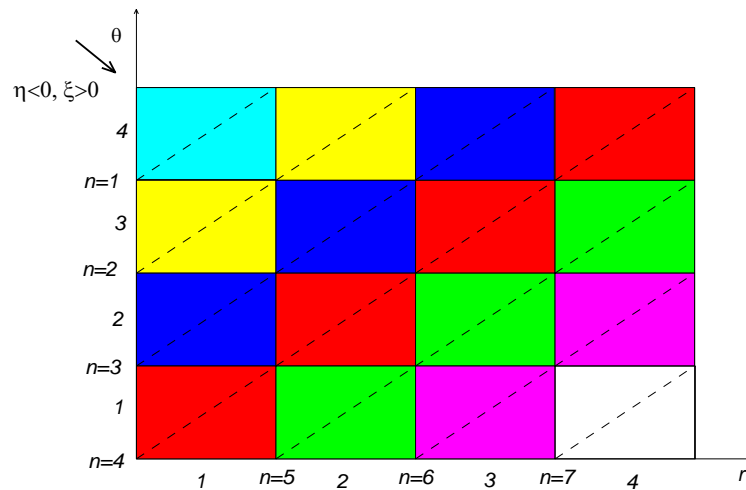


Рисунок 7.1.2. Последовательность расчета подобластей для IV и VIII октантов ($\eta < 0$, $\xi > 0$; см. Рис. 1.11.1) при 2D декомпозиции поперечного сечения расчетной области

Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для IV и VIII октантов:

DO I, j = J, 1, -1

DO I, i = 1, I

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

DO I n = 1, N

DO I i_{sub} = I_{sub}^{min}(n), I_{sub}^{max}(n)

$j_{sub} = J + i_{sub} - n$

DO I j = j_{sub}^{max}(j_{sub}), j_{sub}^{min}(j_{sub}), -1

DO I i = i_{sub}^{min}(i_{sub}), i_{sub}^{max}(i_{sub})

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки.

Здесь

$$I_{sub}^{\min}(n) = \begin{cases} 1, & n \leq J_{sub} \\ n - J_{sub} + 1, & n > J_{sub} \end{cases}, \quad I_{sub}^{\max}(n) = \begin{cases} n, & n \leq I_{sub} \\ I_{sub}, & n > I_{sub} \end{cases}, \quad (7.1.2)$$

Формулы для последовательности расчета ячеек для I и V октантов ($\eta > 0$, $\xi > 0$) получаются из последовательности расчета ячеек для III и VII октантов ($\eta < 0$, $\xi < 0$) путем изменения на противоположный границ изменения индексов n , i и j . Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для I и V октантов:

$$DO \ 1, \ j = 1, J$$

$$DO \ 1, \ i = 1, I$$

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

$$DO \ 1, \ n = N, 1, -1$$

$$DO \ 1, \ i_{sub} = I_{sub}^{\min}(n), I_{sub}^{\max}(n)$$

$$j_{sub} = N + 2 - i_{sub} - n$$

$$DO \ 1, \ j = j_{sub}^{\min}(j_{sub}), j_{sub}^{\max}(j_{sub})$$

$$DO \ 1, \ i = i_{sub}^{\min}(i_{sub}), i_{sub}^{\max}(i_{sub})$$

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки.

Здесь величины $I_{sub}^{\min}(n)$ и $I_{sub}^{\max}(n)$ определяются соотношениями (7.1.1).

Аналогично, формулы для последовательности расчета ячеек для II и VI октантов ($\eta > 0$, $\xi < 0$) получаются из последовательности расчета ячеек для IV и VIII октантов ($\eta < 0$, $\xi > 0$) путем изменения на противоположный границ изменения индексов n , i и j . Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для II и VI октантов:

$$DO \ 1, \ j = 1, J$$

$$DO \ 1, \ i = I, 1, -1$$

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

$$DO \ 1 \ n = N, 1, -1$$

$$DO \ 1 \ i_{sub} = I_{sub}^{\min}(n), I_{sub}^{\max}(n)$$

$$j_{sub} = J + i_{sub} - n$$

$$DO \ 1 \ j = j_{sub}^{\min}(j_{sub}), j_{sub}^{\max}(j_{sub})$$

$$DO \ 1 \ i = i_{sub}^{\max}(i_{sub}), i_{sub}^{\min}(i_{sub}), -1$$

I расчет (i, j) -ой пространственной ячейки.

Здесь величины $I_{sub}^{\min}(n)$ и $I_{sub}^{\max}(n)$ определяются соотношениями (7.1.2).

Для более полного использования имеющихся потоков (трэдов) распараллеливание вычислений по подобластям, вообще говоря, должно сопровождаться распараллеливанием вычислений по угловой переменной μ . Действительно, используемые квадратурные формулы имеют слоистую структуру по переменной μ и направления с одинаковым значением μ_l могут быть обработаны независимо друг от друга. Однако попытка реализации этой возможности с использованием интерфейса OpenMP, предполагающая распараллеливание вычислений для вложенного цикла, привела к резкому увеличению накладных расходов.

Более рациональным средством повышения эффективности распараллеливания вычислений в рамках КВА алгоритма оказалось увеличение числа используемых подобластей. При этом уменьшается доля пространственных ячеек, при расчете которых часть трэдов простаивает. Для определения оптимального разбиения на подобласти по умолчанию используются следующие эмпирические формулы:

$$I_{sub} = \max(\min(I, N_{thr}), I/4), \quad J_{sub} = \max(\min(J, N_{thr}), J/4), \quad (7.1.3)$$

где N_{thr} - число используемых трэдов. Использование более мелких подобластей приводит к возрастанию накладных расходов.

Кроме распараллеливания по подобластям, в настоящей версии программы КАТРИН реализовано распараллеливание расчета граничных условий, преобразования угловых потоков решения в угловые моменты и угловых моментов источника в угловое распределение источника, расчет интеграла рассеяния, распараллеливание массива прогонок при решении P_1 системы для ускоряющих поправок методом расщепления.

Ниже в Табл. 7.1.1-7.1.3 приведены сравнительные (астрономические) расчетные времена для параллельной и исходной серийной версий программы КАТРИН.

Из сравнения результатов расчетных времен для одной группы и для многогрупповой задачи следует, что уменьшение астрономического времени расчета варианта, может быть достигнуто также за счет увеличения размера оперативной памяти и за счет использования более быстрой внешней памяти (SSD устройств).

Таблица 7.1.1. 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 7.1.2. 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 $218 \times 120 \times 175 = 4\,578\,000$ ячеек, с 47 нейтронными и 20 фотонными группами константной системы BGL1000_B7 в P_3 приближении, при использовании поточечного 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

Таблица 7.1.3 - Астрономическое время расчета радиационной защиты РУ ВВЭР-1000/320 для сектора поворотной симметрии 60° с источником, заданным потвэльно, в r, ϑ, z геометрии с пространственной сеткой из $190 \times 120 \times 192 = 4377600$ ячеек, со 117 группами нейтронов константной системы V7-200N47G из SCALE-6 (для $E > 0.0285$ МэВ) в P_3 приближении, при точности сходимости итераций 10^{-3} . Для энергий $E > 3.0$ МэВ (группы 1-39) использовалась квадратура ES_{16} , а для области энергий $0.0285 < E < 3.0$ МэВ (группы 40-117) – квадратура ES_8

Процессор, оперативная и внешняя память	Количество ядер	Параллельная версия программы КАТРИН
Intel Core i7 970, 24 Gb RAM, Intel SSD DC S3700, 200 Gb	6+6 виртуальных	38 часов 44 мин
Intel Core i7 3930K, 64 Gb RAM, Intel SSD DC S3700, 200 Gb, SATA-3	6+6 виртуальных	21 час 28 мин

7.2. Алгоритм распараллеливания вычислений в 2D S_n программе КАСКАД-С

Рассмотрим алгоритм распараллеливания вычислений для программы КАСКАД-С на примере уравнения переноса в r, z геометрии (1.10.23).

В КВА алгоритме для распараллеливания вычислений производится декомпозиция поперечного сечения расчетной области на примерно одинаковые подобласти (см. Рис. 7.2.1). Последовательность расчета подобластей определяется необходимостью предоставления каждой из рассчитываемых подобластей правильных граничных условий. Изображенный на Рис. 7.2.1 случай отвечает последовательности расчета подобластей для VI октанта (см. Рис. 1.10.1). В этом случае последовательно рассчитываются подобласти (отмеченные одинаковой маркировкой), находящиеся на диагоналях $n = 1, 2, \dots, N$, $N = I_{sub} + K_{sub} - 1$, где I_{sub} и K_{sub} - число подобластей по переменным r и z , соответственно.

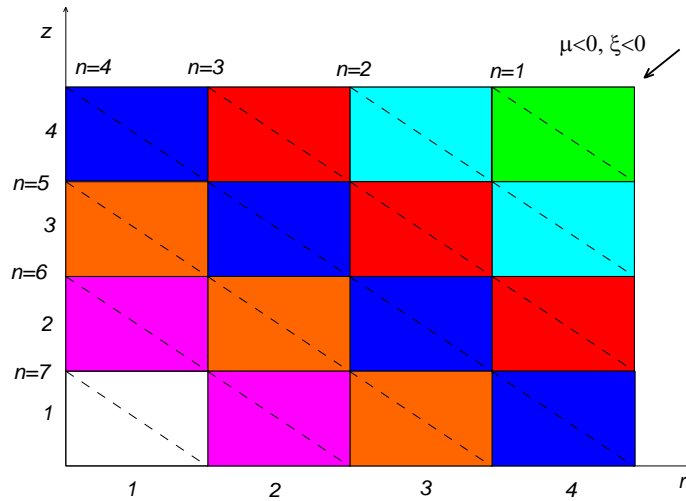


Рисунок 7.2.1. Последовательность расчета подобластей для VI октанта ($\mu < 0$, $\xi < 0$; см. Рис. 1.10.1) при декомпозиции расчетной области

Таким образом, стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для VI октанта:

$$DO \ 1, k = K, 1, -1$$

$$DO \ 1, i = I, 1, -1$$

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

$$DO \ 1, n = 1, N$$

$$DO \ 1, i_{sub} = I_{sub}^{\min}(n), I_{sub}^{\max}(n)$$

$$k_{sub} = N + 2 - i_{sub} - n$$

$$DO \ 1, k = k_{sub}^{\max}(k_{sub}), k_{sub}^{\min}(k_{sub}), -1$$

$$DO \ 1, i = i_{sub}^{\max}(i_{sub}), i_{sub}^{\min}(i_{sub}), -1$$

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки.

Здесь

$$I_{sub}^{\min}(n) = \begin{cases} I_{sub} - n + 1, & n \leq I_{sub} \\ 1, & n > I_{sub} \end{cases}, \quad I_{sub}^{\max}(n) = \begin{cases} I_{sub}, & n \leq K_{sub} \\ I_{sub} + K_{sub} - n, & n > K_{sub} \end{cases}, \quad (2.1)$$

$i_{sub}^{\min}(i_{sub})$ и $i_{sub}^{\max}(i_{sub})$ - минимальный и максимальный номера радиальных ячеек для радиального интервала i_{sub} , $1 \leq i_{sub} \leq I_{sub}$; $k_{sub}^{\min}(k_{sub})$ и $k_{sub}^{\max}(k_{sub})$ - минимальный и максимальный номера аксиальных ячеек для аксиального интервала k_{sub} , $1 \leq k_{sub} \leq K_{sub}$.

Последовательность расчета подобластей для V октанта изображена на Рис. 7.2.2.

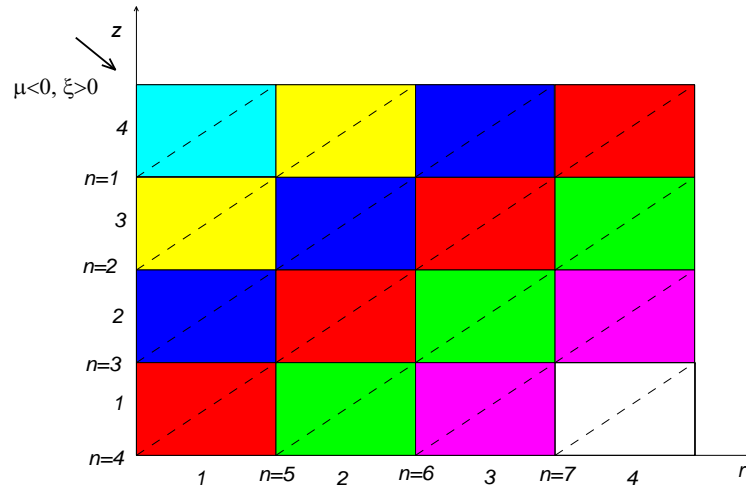


Рисунок 7.2.2. Последовательность расчета подобластей для V октанта ($\mu < 0$, $\xi > 0$; см. Рис. 1.10.1) при декомпозиции расчетной области

Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для V октанта:

DO 1, $k = K, 1, -1$

DO 1, $i = 1, I$

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

DO 1 $n = 1, N$

DO 1 $i_{sub} = I_{sub}^{\min}(n), I_{sub}^{\max}(n)$

$k_{sub} = K + i_{sub} - n$

DO 1 $k = k_{sub}^{\max}(k_{sub}), k_{sub}^{\min}(k_{sub}), -1$

DO 1 $i = i_{sub}^{\min}(i_{sub}), i_{sub}^{\max}(i_{sub})$

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки.

Здесь

$$I_{sub}^{\min}(n) = \begin{cases} 1, & n \leq K_{sub} \\ n - K_{sub} + 1, & n > K_{sub} \end{cases}, \quad I_{sub}^{\max}(n) = \begin{cases} n, & n \leq I_{sub} \\ I_{sub}, & n > I_{sub} \end{cases}, \quad (2.2)$$

Формулы для последовательности расчета ячеек для I октанта ($\mu > 0$, $\xi > 0$) получаются из последовательности расчета ячеек для VI октанта ($\mu < 0$, $\xi < 0$) путем изменения на противоположный границ изменения индексов n , i и k . Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для I октанта:

DO I, k = 1, K

DO I, i = 1, I

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

DO I, n = N, 1, -1

DO I, i_{sub} = I_{sub}^{min}(n), I_{sub}^{max}(n)

$k_{sub} = N + 2 - i_{sub} - n$

DO I, j = k_{sub}^{min}(k_{sub}), k_{sub}^{max}(k_{sub})

DO I, i = i_{sub}^{min}(i_{sub}), i_{sub}^{max}(i_{sub})

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки.

Здесь величины $I_{sub}^{min}(n)$ и $I_{sub}^{max}(n)$ определяются соотношениями (2.1).

Аналогично, формулы для последовательности расчета ячеек для II октанта ($\mu > 0, \xi < 0$) получаются из последовательности расчета ячеек для V октанта ($\mu < 0, \xi > 0$) путем изменения на противоположный границ изменения индексов n, i и k . Стандартная последовательность расчета пространственных ячеек для II октанта:

DO I, k = 1, K

DO I, i = I, 1, -1

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки,

в КВА алгоритме заменяется следующей:

DO I n = N, 1, -1

DO I i_{sub} = I_{sub}^{min}(n), I_{sub}^{max}(n)

$k_{sub} = K + i_{sub} - n$

DO I k = k_{sub}^{min}(k_{sub}), k_{sub}^{max}(k_{sub})

DO I i = i_{sub}^{max}(i_{sub}), i_{sub}^{min}(i_{sub}), -1

I расчет (i, k) -ой пространственной ячейки.

Здесь величины $I_{sub}^{min}(n)$ и $I_{sub}^{max}(n)$ определяются соотношениями (2.2).

Для более полного использования имеющихся потоков (трэдов) распараллеливание по подобластям, вообще говоря, должно сопровождаться распараллеливанием по угловой переменной μ . Действительно, используемые квадратурные формулы имеют слоистую структуру по переменной μ и направления с одинаковым значением μ_l могут быть обработаны незави-

симо друг от друга. Однако попытка реализации этой возможности с использованием интерфейса OpenMP, предполагающая распараллеливание вычислений для вложенного цикла, привела к резкому увеличению накладных расходов.

Более рациональным средством повышения эффективности распараллеливания вычислений в рамках КВА алгоритма оказалось увеличение числа используемых подобластей. При этом уменьшается доля пространственных ячеек, при расчете которых часть тредов простаивает. Для определения оптимального разбиения на подобласти по умолчанию используются следующие эмпирические формулы:

$$I_{sub} = \max(\min(I, N_{thr}), I/5), \quad K_{sub} = \max(\min(K, N_{thr}), K/5), \quad (2.3)$$

где N_{thr} - число используемых тредов. Использование более мелких подобластей приводит к возрастанию накладных расходов.

Кроме распараллеливания по подобластям, в настоящей версии программы КАСКАД-С реализовано распараллеливание расчета граничных условий, расчет интеграла рассеяния, распараллеливание массива прогонок при решении P_1 системы для ускоряющих поправок ADI методом.

Ниже в Табл. 7.2.1-7.2.5 приведены сравнительные (астрономические) расчетные времена для параллельной и исходной серийной версий программы КАСКАД-С.

Таблица 7.2.1. Время расчета варианта в r, z геометрии РУ ВВЭР-1200 с константами BGL1000 ($47n+20g$), учитывающими термализацию нейтронов, на пространственной r, z сетке из $187 \times 170 = 31790$ ячеек в P_3S_8 приближении с точностью сходимости внутренних итераций 10^{-4} , внешних итераций по области термализации 10^{-3} , мин

Процессор	Количество ядер	Скалярная версия программы КАС-КАД-С	Параллельная версия программы КАС-КАД-С
Intel Core 2 Duo E6750	2	8 мин 39 сек	5 мин 34 сек
Intel Core i7 920	4 +4 виртуальных	6 мин 5 сек	2 мин 43 сек
Intel Core i7 970	6 +6 виртуальных		1 мин 49 сек

Таблица 7.2.2. Время расчета варианта в r, z геометрии РУ ВВЭР-1200 с константами VITAMIN/ENDF/B-7 (199n+42g), учитывающими термализацию нейтронов, на пространственной r, z сетке из $187 \times 170 = 31790$ ячеек в P_5S_8 приближении с точностью сходимости внутренних итераций 10^{-4} , внешних итераций по области термализации 10^{-3} , мин

Процессор	Количество ядер	Скалярная версия программы КАС-КАД-С	Параллельная версия программы КАС-КАД-С
Intel Core 2 Duo E6750	2	55 мин 56 сек	38 мин 26 сек
Intel Core i7 920	4 +4 виртуальных	37 мин 54 сек	18 мин 16 сек
Intel Core i7 970	6 +6 виртуальных		13 мин 04 сек

7.3. Обсуждение результатов

Как показал численный эксперимент, эффективность распараллеливания вычислений с использованием интерфейса OpenMP существенно зависит от архитектуры используемой вычислительной системы, которая определяет скорость доступа тредов к общей оперативной памяти. На современном 6-ти ядерном РС класса Intel Core i7 она достигает 80%. При наличии достаточно большой оперативной памяти и быстрой дисковой подсистемы астрономическое время расчета радиационной защиты ВВЭР-1000/1200 в 3D геометрии, как правило, не превышает 1 суток, а в 2D геометриях – 1 часа, что является приемлемым для проектных расчетов.

Глава 8. Аппроксимация геометрии и источника задачи при решении уравнения переноса в 2D и 3D геометриях

Введение

Трудности, с которыми сталкиваются при проведении двумерных и трехмерных расчетов радиационных полей в защите мы продемонстрируем на примере трехмерного расчета радиационной защиты ВВЭР-1000 [144]. Эти трудности связаны с необходимостью задания геометрии расчетной области, потвэльного представления источника деления на основе рассчитанных программой ПЕРМАК-А или программой САПФИР_95&RC_ВВЭР потвэльных данных о выгорании, конвертации геометрии и источника на разностную сетку задачи. Необходимая точность вычислений достигается на пространственных сетках, состоящих из нескольких миллионов ячеек, что требует применения эффективных алгоритмов ускорения внутренних итераций [14, 17] и внешних по области термализации нейтронов [14], а также распараллеливания вычислений.

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) язык NCGSIM программы MCU [163] задания 3D геометрии и источника средствами комбинаторной геометрии; (2) визуализатор MCU Viewer [163] 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 [160, 159] и ConSource, поддерживающие локальный баланс масс материалов и источника в каждой пространственной ячейке; (4) скрипт Maplook, позволяющий визуализировать задание геометрии на сетке средствами графического пакета SURFER на основе карт материалов задачи в формате Atlas boundary в заданном сечении расчетной области, генерируемых 2D и 3D S_n программами КАСКАД-С и КАТРИН.

8.1. Алгоритм конвертации комбинаторного задания геометрии и источника в сеточное представление

Для конвертации комбинаторного задания геометрии и источника в сеточное представление программы ConDat и ConSource используют метод лучевого трассирования (tracing) [160, 159], позволяющий с высокой точностью и за небольшие расчетные времена определить доли исходных материалов задачи или источника в каждой пространственной ячейке сетки, покрывающей расчетную область. Указанная информация используется для поддержания локального баланса масс материалов в каждой пространственной ячейке за счет введения, при необходимости, дополнительных смесей исходных материалов (данный способ аппроксимации геометрии на сетке известен как volume fraction (VF) метод [164]), а также для поддержания локального баланса источника нейтронов.

При конвертации геометрии в методе лучевого трассирования параллельно координатной оси x для декартовых x, y и x, y, z геометрий, и оси r для криволинейных r, z , r, ϑ и r, ϑ, z геометрий с необходимой плотностью проводятся лучи и вычисляются длины отрезков, относящиеся к различным материалам задачи. Исходя из прямолинейных участков траектории, лежащих в пределах области с одним материалом, определяется вклад каждого отрезка (Рисунок 3.1.1). Возможность быстрого выполнения данной операции характерна для программ, использующих метод Монте-Карло. Исходя из этой информации рассчитывается вклад каждого отрезка в пересекаемые ячейки разностной сетки.

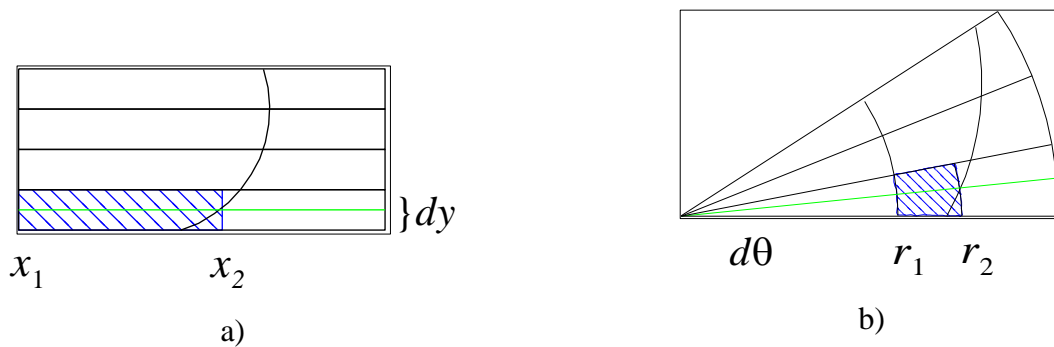


Рисунок 8.1.1 - Расчет вклада отрезка траектории луча для ячейки в x, y и r, ϑ геометриях

Все вычисления в программе ConDat выполняются с помощью арифметики двойной точности. Достаточность выбранной плотности траекторий алгоритма трассирования контролируется путем расчета объемов каждого из материалов расчетной области.

По трудоемкости метод лучевого трассирования выгодно отличается от использованного ранее в ВОРЗР-5.1 [158], в котором для определения долей материалов, попадающих в ячейку

сетки, применяется более частая вспомогательная пространственная сетка. Сеточное представление геометрии задачи ВОРЗР-5.1 и ConDat записывают в бинарном формате *mixmap* [158, 159]. При необходимости дополнительный интерфейс преобразует его в бинарный формат *matmap* [158], в котором отсутствуют дополнительные смеси материалов, а в качестве материала ячейки выбирается материал с большим объемным содержанием в ячейке. При этом по выбору пользователя за счет введения плотностных множителей может быть достигнуто глобальное сохранение масс исходных материалов в системе. Двумерная версия конвертера ConDat осуществляет конвертацию комбинаторной геометрии задачи на сетку для заданного поперечного или продольного сечения исходной трехмерной области задачи (поддерживаются 2D x, y, r, ϑ и r, z геометрии), а также вдоль луча, находящегося на пересечении двух перпендикулярных плоскостей, что позволяет использовать ConDat для подготовки геометрии задачи при ее решении методом синтеза.

Для конвертации источника на разностную сетку задачи в 3D r, ϑ, z или x, y, z геометриях в программе ConSource также используется метод лучевого трассирования. Для РУ с ВВЭР с учетом кусочно-постоянного характера источника по аксиальной переменной, а также идентичности геометрии каждого слоя источника по аксиальной переменной z в ConSource достаточно ограничиться проведением лучей алгоритма трассирования только для одного поперечного сечения активной зоны (параллельно радиальной переменной r для заданного сектора симметрии по переменной ϑ в случае r, ϑ, z геометрии), что приводит к уменьшению времени конвертирования источника. Конвертер ConSource позволяет также подготавливать 2D источник для заданного поперечного или продольного сечения исходной трехмерной области задачи, а также вдоль луча для его дальнейшего использования в методе синтеза.

Важным дополнительным преимуществом является также возможность использования единого описания геометрии и источника при решении задачи методом Монте-Карло по программе MCU и S_n методом по программам КАСКАД-С и КАТРИН, что, в частности, упрощает реализацию алгоритма CADIS [172, 173], в рамках которой сопряженное решение задачи, полученное с использованием программы КАТРИН, может быть применено для уменьшения расчетных времен программы MCU путем использования неаналогового моделирования.

Для использования геометрического описания задачи, подготавливаемого программами ВОРЗР 5.1 и ConDat, S_n программы КАСКАД-С и КАТРИН были модифицированы для ввода данных о геометрии в форматах *mixmap* и *matmap*, а также расчета, по мере использования, сечений для дополнительных смесей материалов согласно VF методу.

На Рисунке 8.1.2а представлено аксиальное сечение исходной комбинаторной 3D r, ϑ, z модели радиационной защиты РУ В-320 для угла $\vartheta = 7^\circ$, а на Рисунке 8.1.2б – для ее аппрокси-

мации на разностной сетке задачи. Дополнительные смеси на Рисунке 8.1.2б обозначены как 49-ый материал.

На Рисунке 8.1.3а. представлено поперечное сечение исходной комбинаторной модели радиационной защиты РУ В-320 при $z=22.6$ см от низа АЗ (желоб насечки), а на Рисунке 8.1.3б – для ее аппроксимации на разностной сетке задачи (в переменных r, ϑ).

На Рисунке 8.1.4 представлено поперечное сечение РУ В-320 при $z=24.7$ см от низа АЗ (гребень насечки).

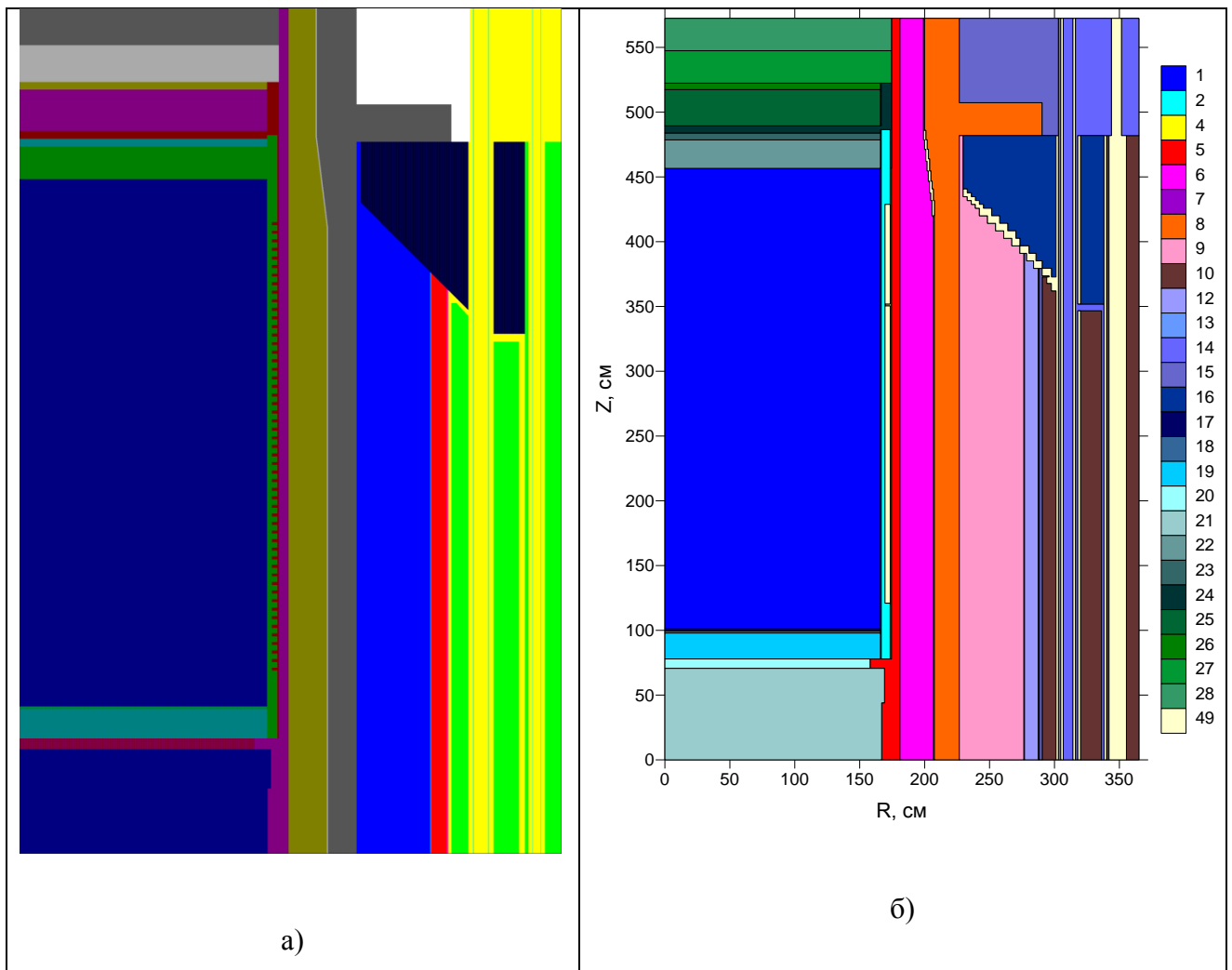


Рисунок 8.1.2 - Аксиальное сечение 3D r, ϑ, z модели радиационной защиты РУ В-320 для угла $\vartheta = 7^\circ$: а) комбинаторное представление геометрии задачи (для визуализации геометрии использована программа MCU Viewer⁵); б) представление геометрии на r, z сетке (190×192) задачи (для визуализации геометрии использован скрипт Maplook и программа SURFER, дополнительные смеси обозначены как 49-ый материал)

⁵ В силу имеющегося ограничения на число используемых цветов (16) в программе MCU Viewer, некоторые границы зон с различными материалами могут отсутствовать на данном и последующих рисунках, подготовленных этой программой.

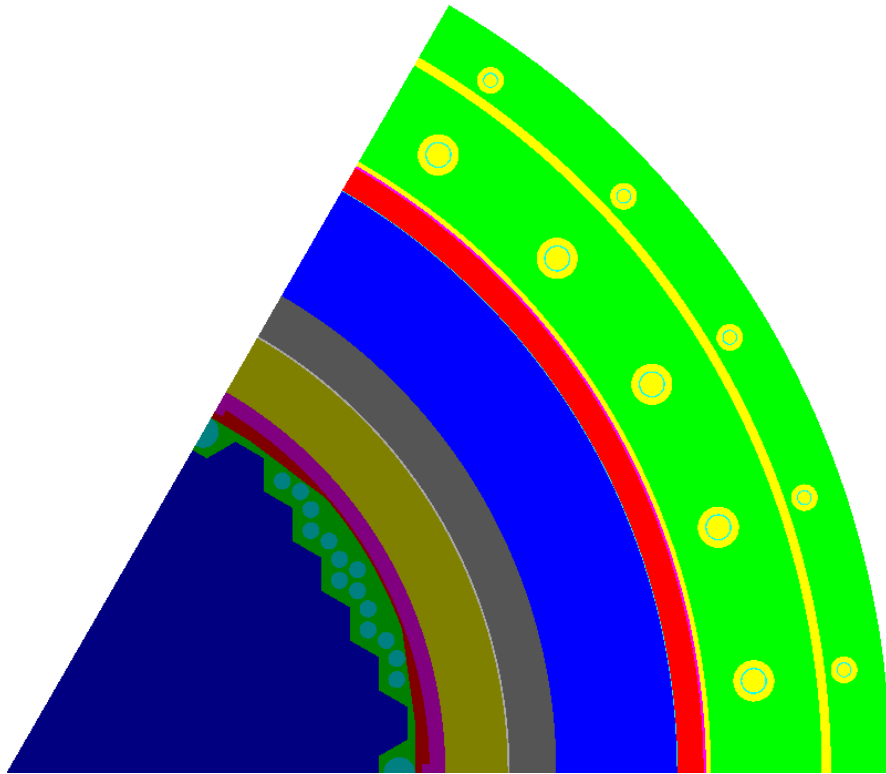


Рисунок 8.1.3а - Поперечное сечение РУ В-320 при $z=22.6$ см от низа АЗ (желоб насечки)

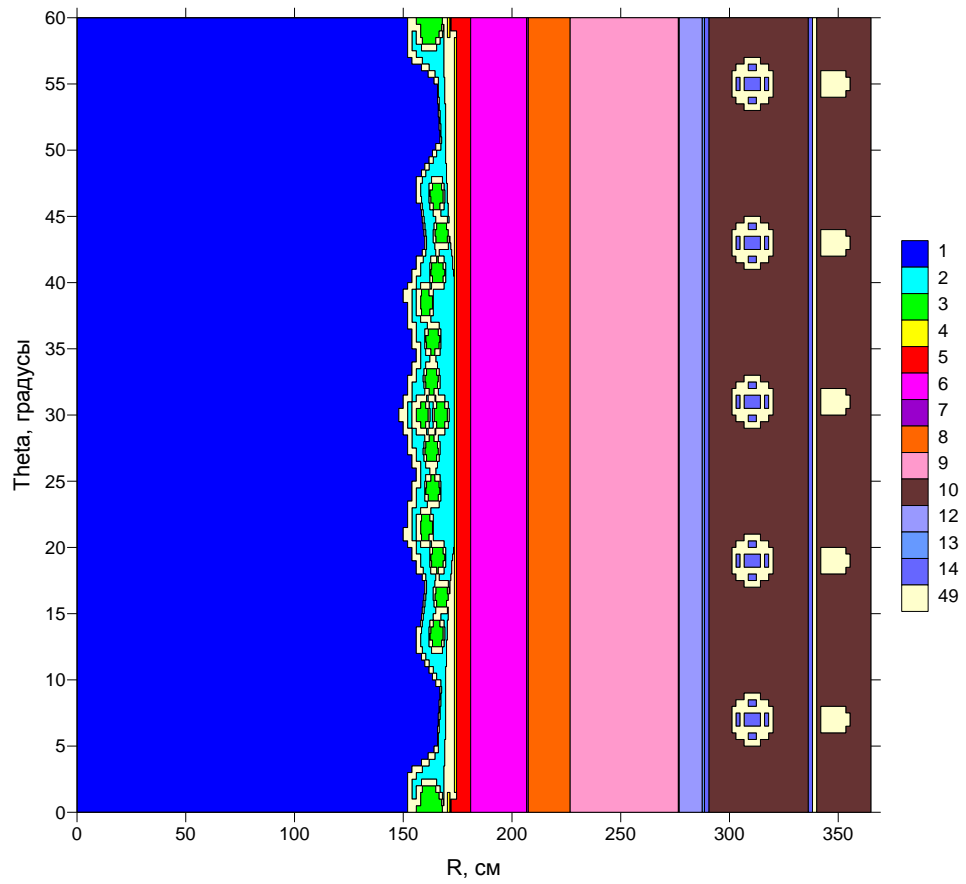


Рисунок 8.1.3б - Поперечное сечение РУ В-320 при $z=22.6$ см от низа АЗ (желоб насечки) на r, ϑ сетке (120×190) задачи. Для визуализации геометрии использован скрипт Maplook и программа SURFER. Дополнительные смеси обозначены как 49-ый материал

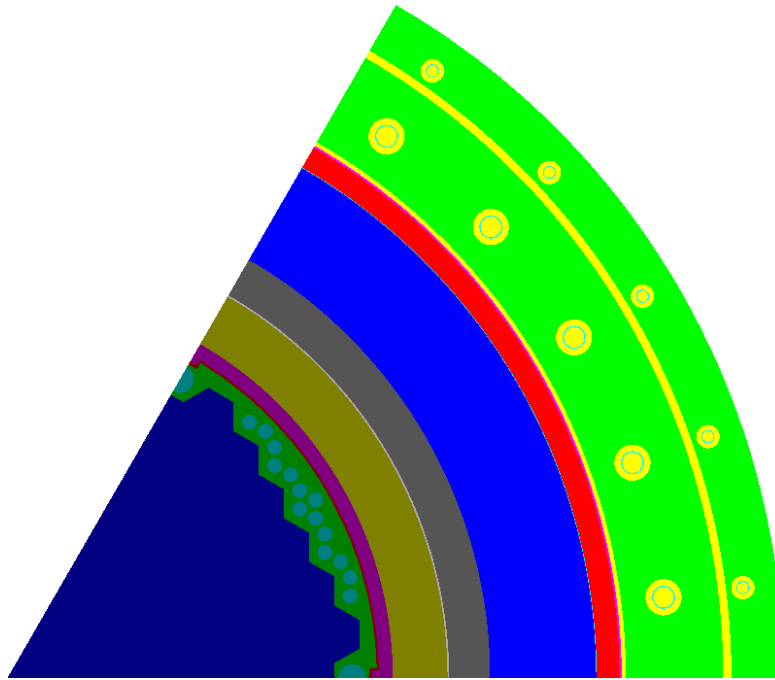


Рисунок 8.1.4 - Поперечное сечение РУ В-320 при $z=24.7$ см от низа АЗ (гребень насечки)

8.2. Алгоритм формирования комбинаторного источника

Активная зона реактора типа ВВЭР обладает поворотной симметрией, при этом сектором симметрии является сектор в 60° . В процессе эксплуатации РУ с ВВЭР в конце каждой кампании происходит перегрузка ТВС с удалением из АЗ отработавших ТВС и установки ТВС со свежим топливом. Существенно, что используемые алгоритмы перегрузки ТВС сохраняют вышеуказанную симметрию АЗ (см. Рисунок 8.2.1). Исходя из симметрии, необязательно проводить расчёт для всей АЗ (полного угла в 360 градусов) - достаточно провести расчёт для сектора симметрии с использованием периодических граничных условий по азимутальной переменной ϑ .

В стандартно используемых режимах эксплуатации программы ПЕРМАК-А и БИПР-7А проводят расчет выгорания, энерговыделения и других характеристик АЗ РУ либо для сектора симметрии 60° , либо для всей АЗ (360°). Для формирования комбинаторного источника деления утилита BurnDat [162] осуществляет выборку данных о выгорании из сектора ($0-60^\circ$).

Рассмотрим принцип вычисления источника для сектора 60° (см. Рисунок 8.8.2). Источник в программе MCU записывается по зонам, при этом для каждой зоны задаётся интенсивность источника, интегральная по объему зоны. Зоны могут быть записаны двумя способами:

- 1) с помощью элементарных тел
- 2) с помощью регистрационных зон геометрического модуля

В число элементарных тел входят шестиугольная призма, угол её симметрии, круговой цилиндр, сектор цилиндра. Элементарных тел достаточно для описания источника деления реактора типа ВВЭР, поэтому нет необходимости применять второй, более сложный способ.

При покассетном описании источника элементарным телом является шестиугольная призма или её угол.

При потвэльном описании источника для конкретной кассеты требуется записать информацию об интегральных интенсивностях всех твэлов, находящихся в пределах кассеты. Непосредственное независимое перечисление всех твэлов вносит технические трудности и усложняет процесс описания источника деления. Учитывая периодичность их расположения, а также то, что геометрически все твэлы с достаточной степенью точности одинаковы, источник для кассеты можно записать как решётку. Решётка для описания источника деления в программе MSU представляет средство для удобного описания периодически расположенных одинаковых элементарных источников.

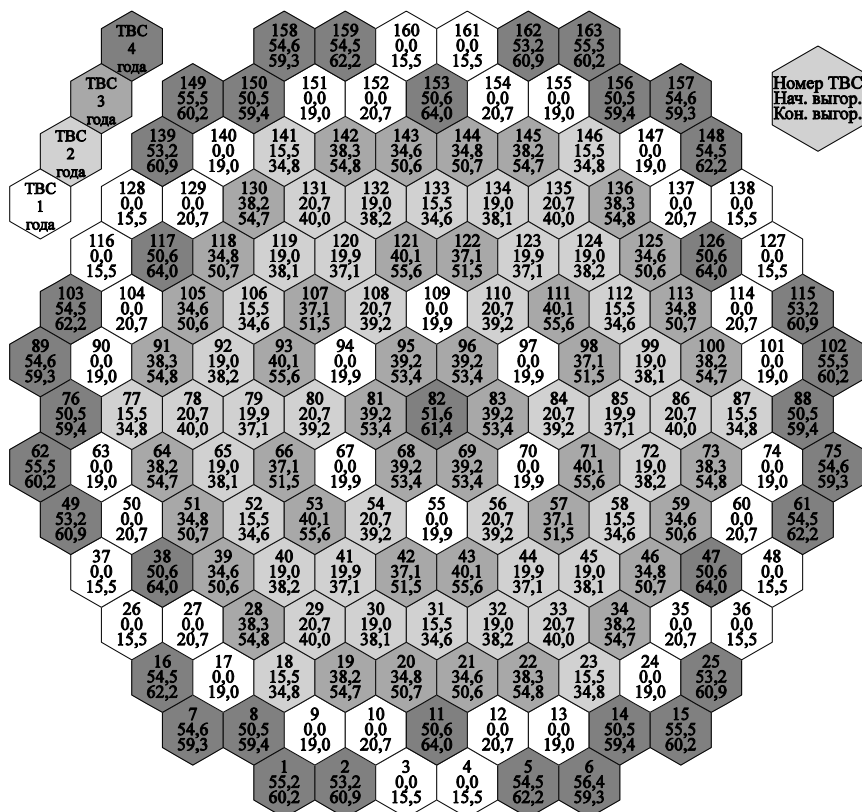


Рисунок 8.2.1 - Распределение выгорания (среднего по ТВС) в АЗ РУ АЭС 2006/В-392М (ВВЭР-1200) для 8-ой топливной кампании. Нумерация ТВС соответствует принятой в программе БИПР-7А для 360° АЗ

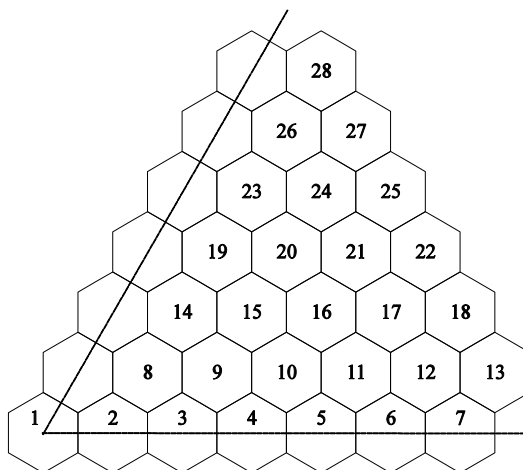


Рисунок 8.2.2 - Схема поперечного разреза сектора симметрии 60° АЗ реактора ВВЭР 1000/1200. Нумерация ТВС соответствует принятой в программе БИПР-7А для сектора симметрии 60°

На Рисунках 8.2.3, 8.2.4а и 8.2.4б представлены поперечные сечения комбинаторного представления потвэльного, покассетного и комбинированного плотности нейтронов деления для сектора симметрии 60° АЗ ВВЭР-1200.

На Рисунках 3.3.5а и 3.3.5б представлены поперечные сечения конвертированного на разностную сетку задачи потвэльного и покассетного распределения плотности нейтронов деления для сектора симметрии 60° АЗ ВВЭР-1200.

На Рисунке 3.3.6 представлено азимутальное распределение плотности потока нейтронов с энергией $E > 0.5$ МэВ в радиационной защите ВВЭР-1200 вблизи внутренней поверхности корпуса реактора при $r = 212.05$ см и $z = 195.67$ см (106.57 см от низа АЗ), полученное с использованием потвэльного и покассетного источника нейтронов для 8-ой кампании без учета блоков с образцами-свидетелями.

Сравнение результатов расчета с потвэльным и покассетным источником нейтронов деления (см. Рисунок 8.2.6) показало, что расчет с покассетным источником на внутренней и на внешней поверхности корпуса РУ дает, соответственно, примерно на 28.5% и 27.4% более высокое значение потока быстрых нейтронов, чем расчет с потвэльным источником. Указанное различие обусловлено существенным радиальным градиентом в выгорании топлива, который учитывается при потвэльном представлении источника. Для периферийных кассет различие в выгорании для минимально и максимально удаленных от центра АЗ твэлов достигает трех раз. Поэтому, все представленные в данном отчете результаты расчетов бенчмарков приведены с потвэльным распределением источника нейтронов деления, как наиболее точным.

Использование комбинированного источника также допустимо, однако, учитывая что времена конвертации потвэльного и комбинированного источника на сетку задачи отличаются незначительно, предпочтение отдается потвэльному источнику, как обеспечивающему более высокую точность представления источника.

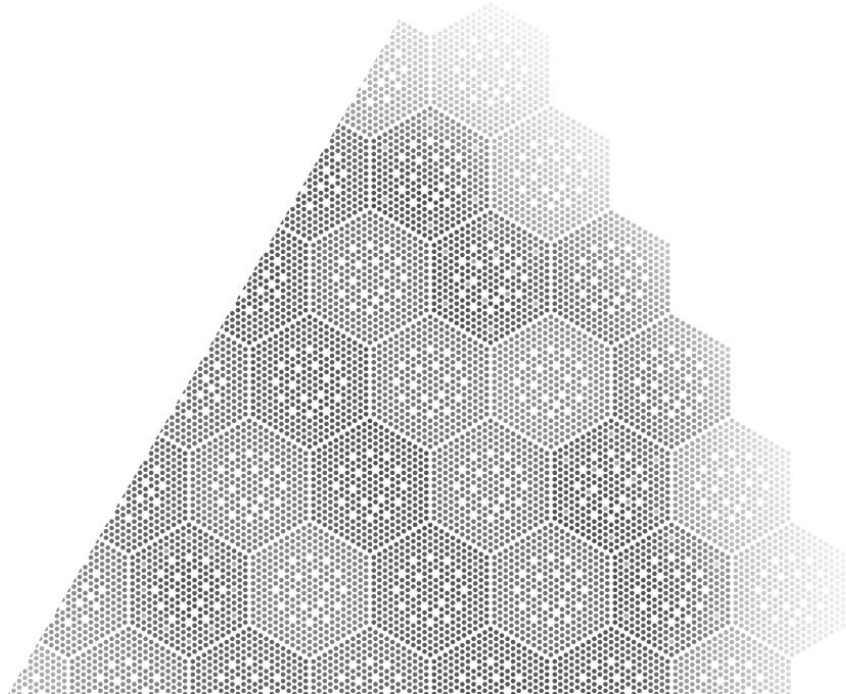


Рисунок 8.2.3 - Потвэльное распределение плотности нейтронов деления для 8-ой кампании РУ АЭС-2006 с подпиткой 42 ТВС для $z=6.23$ см от низа АЗ (1-ый слой по высоте АЗ) для сектора симметрии 60°

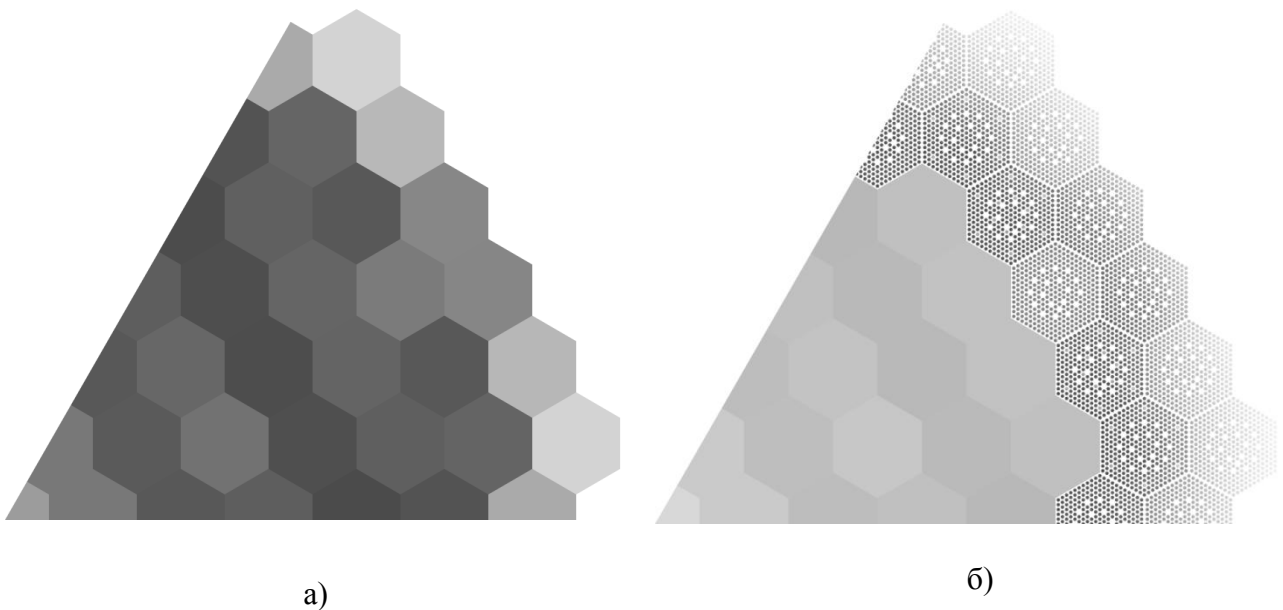


Рисунок 8.2.4 - Покассетное (а) и комбинированное (2 внешних ряда кассет - потвэльное, остальные - покассетное) (б) представления распределения плотности нейтронов деления для 8-ой кампании РУ АЭС-2006 с подпиткой 42 ТВС для $z=6.23$ см от низа АЗ (1-ый слой по высоте АЗ) для сектора симметрии 60°

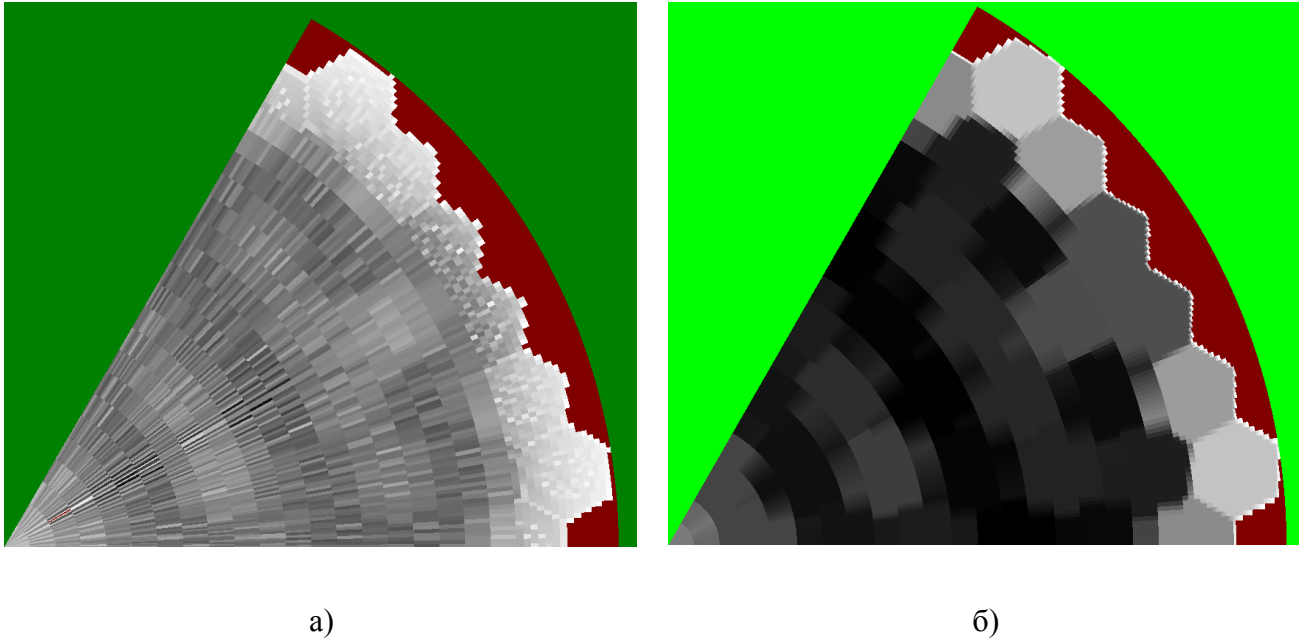


Рисунок 8.2.5 - Конвертированное на разностную сетку задачи потвэльное (а) и покассетное(б) распределения плотности нейтронов деления для 8-ой кампании с подпиткой 42 ТВС для $z=6.23$ см от низа АЗ (1-ый слой по высоте АЗ) для сектора симметрии 60°

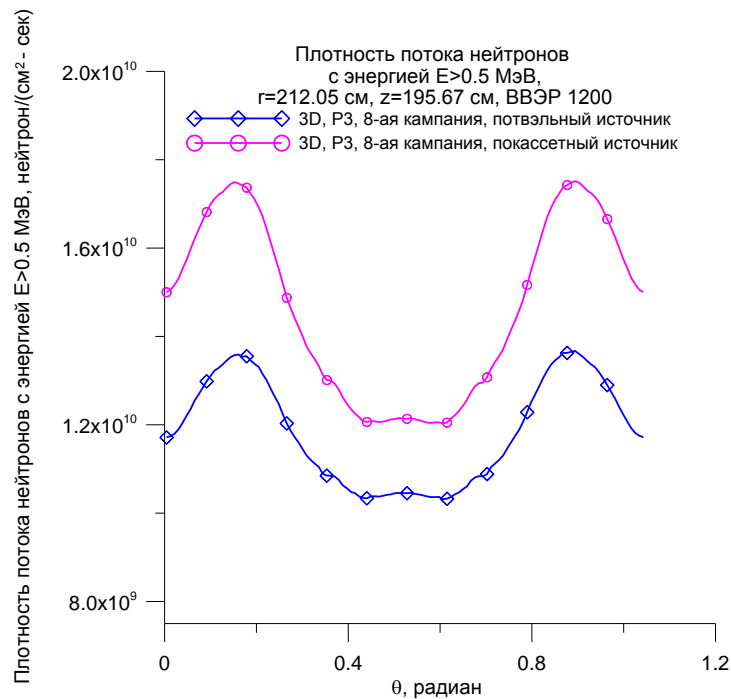


Рисунок 8.2.6 - Азимутальное распределение плотности потока нейтронов с энергией $E>0.5$ МэВ в радиационной защите ВВЭР-1200 вблизи внутренней поверхности корпуса реактора при $r = 212.05$ см и $z=195.67$ см (106.57 см от низа АЗ), полученное с использованием потвэльного и покассетного источника нейтронов для 8-ой кампании без учета блоков с образцами-свидетелями

При конвертации комбинаторного представления источника на пространственную сетку задачи, осуществляемой посредством утилиты ConSource [161], по радиальной и азимутальной естественно воспользоваться той же пространственной сеткой, которая используется в ConDat для конвертации геометрии задачи. Однако, по аксиальной переменной используется пространственная сетка, на которой подготовлен комбинаторный источник. В программе КАТРИН производится интерполяция вводимого источника на разностную сетку задачи.

8.3. Чувствительность результатов расчёта к параметрам пространственной сетки

Использование VF метода, поддерживающего локальный баланс материалов в ячейках пространственной сетки, позволяет повысить точность аппроксимации геометрии задачи на сетке и, соответственно, точность получаемого разностного решения [168, 169, 171].

Построение и исследование скорости сходимости сеточных аппроксимаций геометрии задачи, поддерживающих локальный баланс масс материалов (VF метода), рассматривалось различными авторами, в частности, при расчете модельных задач C5G7 MOX бенчмарка [164, 165, 166], а также при решении более реалистичных задач [160, 168, 169].

В работах [170, 171] было рассмотрено влияние локального сохранения баланса масс на точность расчета радиационных полей в защите РУ ВВЭР-1200. Хотя в данной задаче доля ячеек с дополнительными смесями невелика (~5%), поддержание локального баланса масс за счет VF метода обеспечивает более быструю сходимость разностного решения. Однако в областях с сильными градиентами решения реальным способом повышения точности решения остается сгущение пространственно-угловой сетки задачи.

На Рисунках 8.3.1 и 8.3.2 представлены результаты расчёта для сектора поворотной симметрии 60° в 2D r, ϑ геометрии для поперечного сечения $z=201.7$ см (112.6 см от низа АЗ) ВВЭР-1200 азимутального распределения плотности потока нейтронов с энергией $E>0.1$ МэВ при $r = 167.75$ см (область выгородки) и при $r = 212.05$ см (внутренняя поверхность корпуса РУ) с введением (VF метод) и при использовании стандартной аппроксимации геометрии задачи (без введения дополнительных смесей материалов).

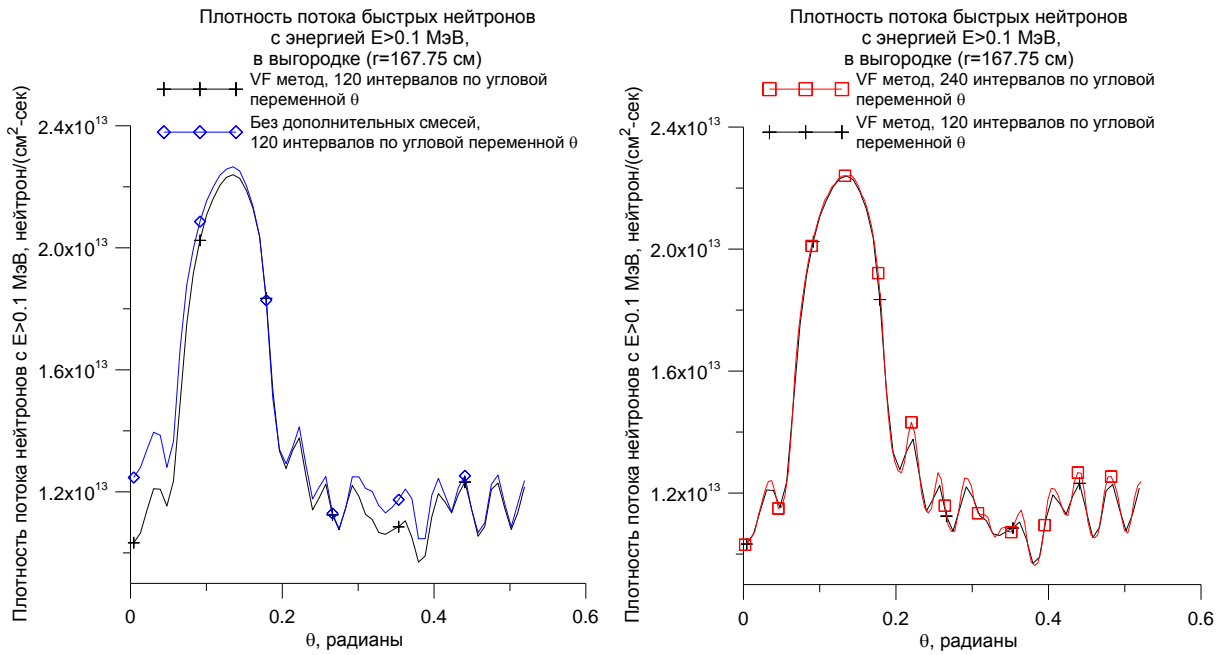


Рисунок 8.3.1 - Результаты расчёта в 2D r, θ геометрии азимутального распределения плотности потока нейтронов с энергией $E > 0.1$ МэВ для сектора симметрии 60° ВВЭР-1200 при $z = 201.7$ см (112.6 см от низа АЗ) и $r = 167.75$ см (область выгородки) с введением (VF метод) и без введения дополнительных смесей материалов

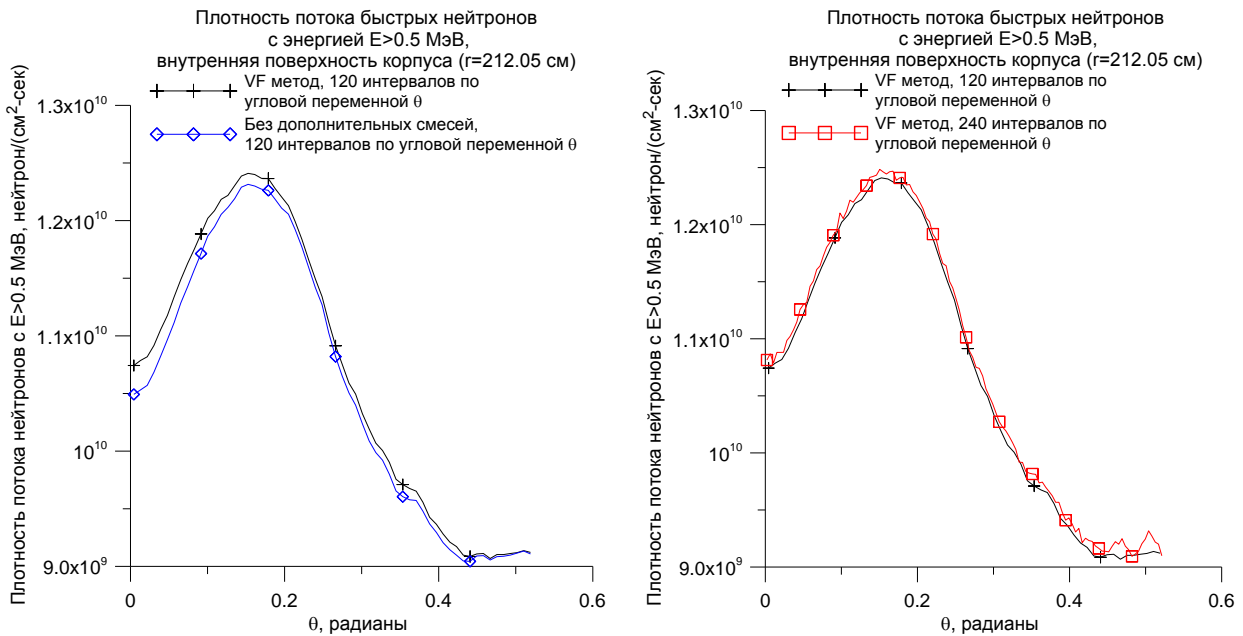


Рисунок 8.3.2 - Результаты расчёта в 2D r, θ геометрии азимутального распределения плотности потока быстрых нейтронов с энергией $E > 0.5$ МэВ для сектора 60° ВВЭР-1200 при $z = 201.7$ см (112.6 см от низа АЗ) и $r = 212.05$ см (внутренняя поверхность корпуса) с введением (VF метод) и без введения дополнительных смесей материалов

Приведём далее результаты расчёта сектора симметрии 60° активной зоны ВВЭР-1000 с отражателем в двумерной r, ϑ -геометрии с учётом геометрии твэлов без гомогенизации (Рисунок 8.3.3). На Рисунке 8.3.4 показана аппроксимация этого сечения в r, ϑ -геометрии на пространственной сетке размером 1052×960 , полученная в результате преобразования комбинаторной геометрии в растровую с помощью конвертера ConDat. Рассчитанные с использованием различных приближений значения $k_{эф}$ приведены в Таблице 8.3.1. Групповые сечения подготовлены с использованием 28- и 299-групповых библиотек константной системы CONSYST/ABBN-93.3а. S_N -расчёты проведены по программе КАСКАД-С в P_3 -приближении с точностью сходимости внутренних итераций 10^{-4} , внешних по области термализации $2 \cdot 10^{-4}$, $k_{эф} - 10^{-4}$, плотности нейтронов деления 10^{-3} , с введением и без введения дополнительных смесей. Для ускорения внутренних итераций и внешних по области термализации нейтронов использовалась согласованная KP_1 схема.

Из Таблицы 8.3.1 можно сделать вывод, что сеточный компонент погрешности расчёта $k_{эф}$ VF методом на r, ϑ -сетке из 552×480 ячеек составляет $\sim 0,04\%$, что обычно достаточно для практических приложений. Стандартный подход (без введения дополнительных смесей и поддержания балансов масс в системе) показывает медленную сходимость $k_{эф}$. Из Таблицы 8.3.1 следует также, что для получения приемлемого согласия с результатами расчёта методом Монте-Карло необходимо использовать мультигрупповые сечения, учитывающие гетерогенность при расчёте резонансной блокировки сечений.

На Рисунке 8.3.5 показаны некоторые радиальные и азимутальные пространственные распределения, рассчитанные в S_8P_3 -приближении, нормированные на один нейтрон источника в секторе 60° на 1 см высоты зоны. Из анализа этих рисунков можно сделать вывод о хорошей сходимости пространственного распределения плотности полного потока нейтронов.

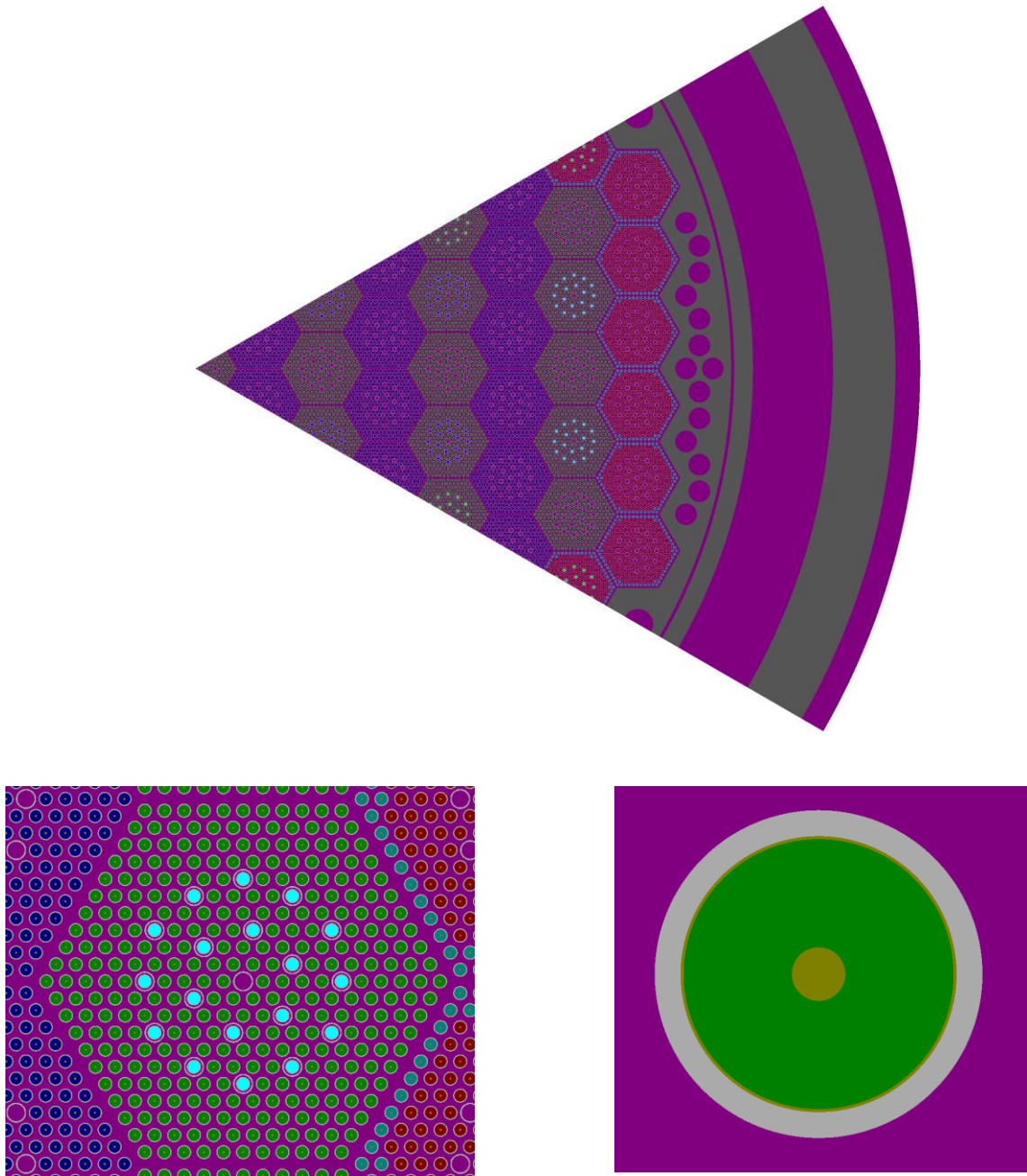


Рисунок 8.3.3 - Поперечное сечение сектора симметрии 60° активной зоны реактора ВВЭР-1000

Таблица 8.3.1 - Результаты расчёта $k_{эф}$ для 2D модели ВВЭР-1000 в r, ϑ геометрии

Метод Монте-Карло		S_N -расчёт				
MCU	MCNP	КАСКАД-C/CONSYST				
		Число групп	Угловая сетка	Пространственная r, ϑ сетка	VF метод	Без доп. смесей
1.0197 ($\sigma=0.01\%$)	1.02	28	S_8	552×480	1.0538 (0.04%)	1.085 (3%)
		28	S_{16}	552×480	1.0538	
		28	S_8	1052×960	1.0534	1.0583 (0.47%)
		299	S_8	552×480	1.014	

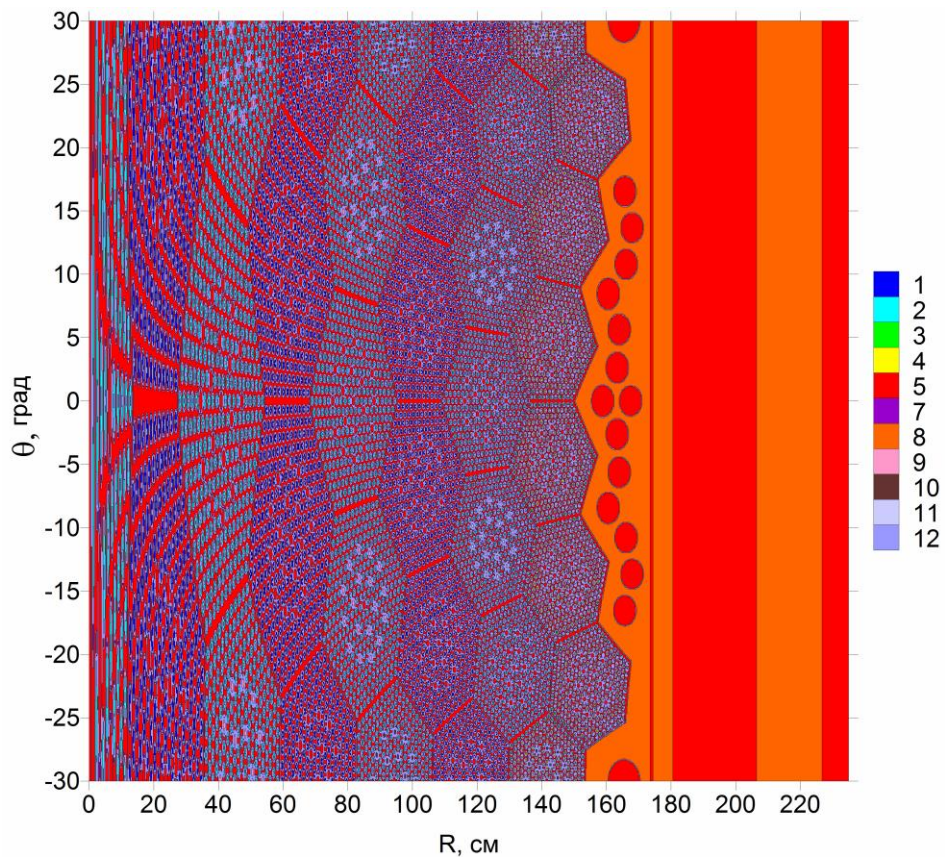


Рисунок 8.3.4 - Аппроксимация сектора симметрии 60° реактора ВВЭР-1000 в r, ϑ геометрии на сетке 1052×960 . Ячейки с дополнительными смесями обозначены как 12-ый материал

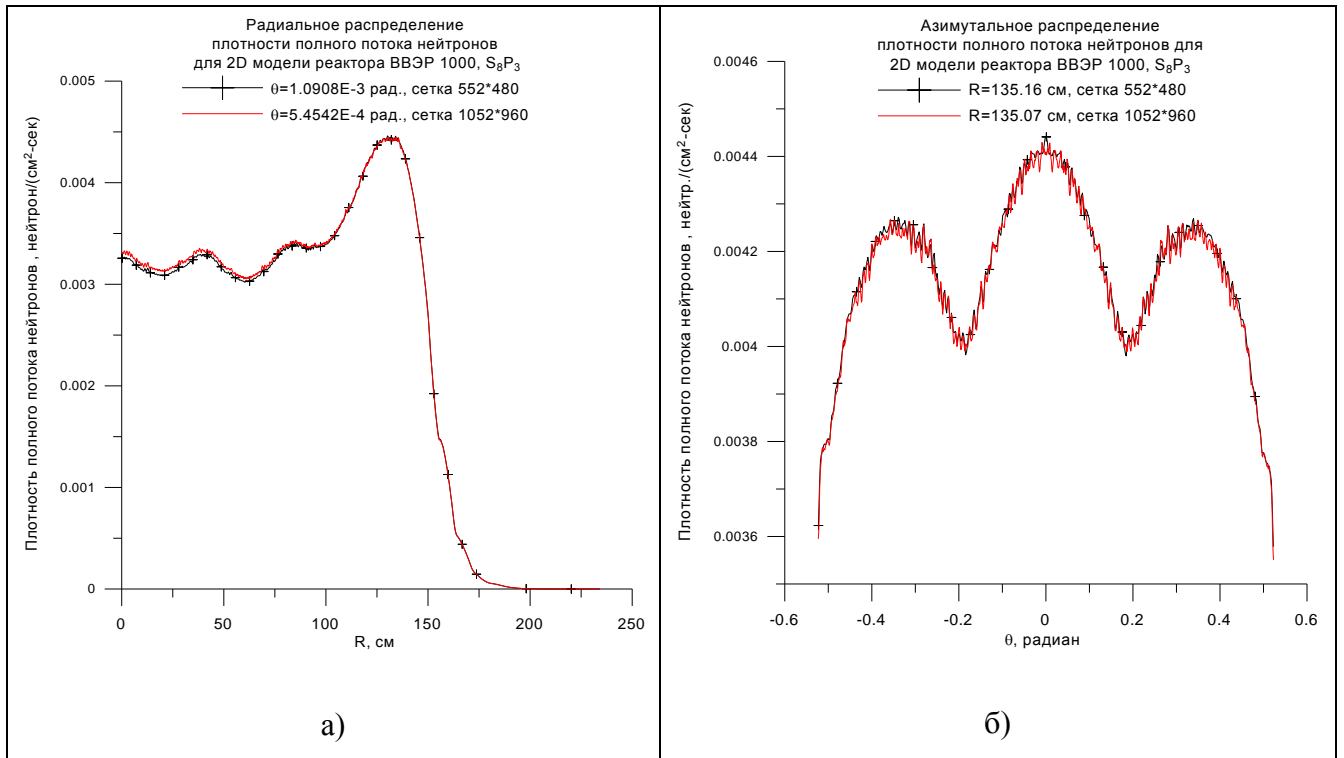


Рисунок 8.3.5 - Радиальное (а) и азимутальное распределения плотности полного потока нейтронов в 2D модели реактора ВВЭР-1000 в окрестности $\vartheta = 0$ и $r = 135$ см, соответственно

Важным преимуществом VF метода является также значительное уменьшение числа внешних итераций за счёт более быстрой сходимости пространственных распределений, в частности, плотности нейтронов деления, что, по-видимому, является следствием улучшения аппроксимации задачи.

В Таблице 8.3.2 приведены данные для интегральных объёмов материалов, иллюстрирующие сходимость метода трейсинга.

Таблица 8.3.2 - Площади материалов задачи в радиальном сечении сектора симметрии 60° для реактора ВВЭР-1000 в r, ϑ геометрии с пространственной сеткой 552×480 , рассчитанные посредством tracing алгоритма, в зависимости от числа лучей, приходящихся на интервал сетки $\Delta \vartheta_j$

Число лучей Материал	5	10	20	40	80	160
1	1.207536E+3	1.207485E+3	1.207526E+3	1.207512E+3	1.207510E+3	1.207510E+3
2	1.498070E+3	1.498181E+3	1.498216E+3	1.498222E+3	1.498206E+3	1.498206E+3
3	1.986767E+2	1.986684E+2	1.986470E+2	1.986750E+2	1.986725E+2	1.986719E+2
4	1.407555E+2	7.405336E+2	7.405243E+2	7.405053E+2	7.404997E+2	7.405028E+2
5	1.533608E+4	1.533517E+4	1.533527E+4	1.533528E+4	1.533532E+4	1.533531E+4
6	3.219862E+2	3.227748E+2	3.225554E+2	3.225749E+2	3.225953E+2	3.225944E+2
7	1.843542E+3	1.843782E+3	1.843832E+3	1.843813E+3	1.843777E+3	1.843784E+3
8	7.710103E+3	7.710148E+3	7.710192E+3	7.710178E+3	7.710180E+3	7.710180E+3
9	2.529765E+1	2.527576E+1	2.527462E+1	2.527552E+1	2.527656E+1	2.527666E+1
10	1.685192E+1	1.685910E+1	1.684927E+1	1.685031E+1	1.685116E+1	1.685096E+1
11	1.684026E+1	1.686066E+1	1.684668E+1	1.685070E+1	1.685159E+1	1.685111E+1

Из Таблицы 8.3.2 можно сделать вывод, что для достижения интегрального сохранения материалов с относительной точностью 0.01% в методе трейсинга достаточно провести 20 лучей через ячейку.

В r, ϑ, z геометрии обычно используется следующая *рекомендуемая* плотность траекторий: каждый интервал сетки по угловой переменной ϑ разбивается на 60 подинтервалов, а по переменной z - на 20 подинтервалов, что, обычно достаточно для разрешения мелких элементов конструкции и расчета долей исходных материалов в ячейке сетки с необходимой точностью. При измельчении основной пространственной сетки увеличивается и плотность покрытия расчетной области траекториями метода лучевого трассирования.

ПРИЛОЖЕНИЕ. Титульные страницы Аттестационных паспортов для программы КАТ-РИН

	Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору (Ростехнадзор) Федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (ФБУ «НТЦ ЯРБ»)	
ЭКСПЕРТНЫЙ СОВЕТ ПО АТТЕСТАЦИИ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ПРИ РОСТЕХНАДЗОРЕ		
		
<h3>АТТЕСТАЦИОННЫЙ ПАСПОРТ ПРОГРАММНОГО СРЕДСТВА</h3>		
Регистрационный номер	357	От 17 апреля 2014 года
Настоящий аттестационный паспорт устанавливает назначение и область применения программного средства		
«КАТРИН-2.5 вместе с пре- и пост- процессорами и библиотеками констант BGL1000, BGL1000_B7 и V7-200N47G»,		
которые указаны в разделе 2 приложения к настоящему аттестационному паспорту.		
Аттестационный паспорт выдан		
Федеральному государственному бюджетному учреждению науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).		
Юридический адрес: 125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 4.		
Открытому акционерному обществу «Ордена Трудового Красного Знамени и ордена труда ЧССР опытное конструкторское бюро «ГИДРОПРЕСС» (ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС»).		
Юридический адрес: 142103, Россия, Московская область, г. Подольск, улица Орджоникидзе, 21.		
<i>Настоящий аттестационный паспорт действует при соблюдении условий Приложения, являющегося его неотъемлемой частью.</i>		
Срок действия аттестационного паспорта		до 17 апреля 2024 года
Заместитель директора ФБУ «НТЦ ЯРБ», председатель экспертного Совета по аттестации программных средств при Ростехнадзоре		
		С.Н. Богдан
		


 Федеральная служба
 по экологическому, технологическому и атомному надзору (Ростехнадзор)
 Федеральное бюджетное учреждение
 «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности»
 (ФБУ «НТЦ ЯРБ»)
 

**ЭКСПЕРТНЫЙ СОВЕТ ПО АТТЕСТАЦИИ ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ
 ПРИ РОСТЕХНАДЗОРЕ**



**АТТЕСТАЦИОННЫЙ ПАСПОРТ
 ПРОГРАММНОГО СРЕДСТВА**

Регистрационный номер _____ 356 _____ От 17 апреля 2014 года

Настоящий аттестационный паспорт устанавливает назначение и область применения программного средства

«КАТРИН–2.5 вместе с пре- и пост- процессорами и библиотеками констант BGL440 и V7-200N47G»,

которые указаны в разделе 2 приложения к настоящему аттестационному паспорту.

Аттестационный паспорт выдан

Федеральному государственному бюджетному учреждению науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

Юридический адрес: 125047, Россия, Москва, Миусская пл., д. 4.

Открытому акционерному обществу «Ордена Трудового Красного Знамени и ордена труда ЧССР опытное конструкторское бюро «ГИДРОПРЕСС» (ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС»).

Юридический адрес: 142103, Россия, Московская область, г. Подольск, улица Орджоникидзе, 21.

Настоящий аттестационный паспорт действует при соблюдении условий Приложения, являющегося его неотъемлемой частью.

Срок действия аттестационного паспорта _____ до 17 апреля 2024 года

Заместитель директора
 ФБУ «НТЦ ЯРБ»,
 председатель экспертного Совета
 по аттестации программных средств
 при Ростехнадзоре


 С.Н. Богдан






ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Г. Карлсон, К. Д. Латроп, “Теория переноса. Метод дискретных ординат,” в сб. “Вычислительные методы в физике реакторов,” под ред. Х. Гринспена, К. Келбера и Д. Окренга, М., Атомиздат, 1972, стр. 102-157.
2. Белл Д., Глесстон С. Теория ядерных реакторов. пер. с англ., М.: Атомиздат, 1974.
3. Марчук Г. И., Лебедев В. И. Численные методы в теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1981.
4. Л. П. Басс. А. М. Волощенко и Т. А. Гермогенова, “Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения,” М., ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1986.
5. К. Кейз, П. Цвайфель, “Линейная теория переноса,” пер. с англ., М., Мир, 1972.

6. B. G. Carlson, "A method of characteristics and other improvements in solution methods for the transport equation," *Nucl. Sci. Eng.*, **61**, 408 (1976).
7. K. D. Lathrop, B. G. Carlson, "Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation," LANL Report LA-3186, 1965, pp. 1-48.
8. I. K. Abu-Shumays, "Compatible Product Angular Quadrature for Neutron Transport in X-Y Geometry," *Nucl. Sci. Eng.*, **64**, 299 (1977).
9. А. Н. Казаков, В. И. Лебедев, "Квадратурные формулы типа Гаусса для сферы, инвариантные относительно группы диэдра," *Тр. Матем. ин-та РАН*, **203**, 89-90 (1994).
10. А. М. Волощенко, А. А. Дубинин, "РОЗ-6.3 - программа для решения уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов в одномерных геометриях методом дискретных ординат," *ВАИТ, Сер. Физ. и техн. яд. реакт.*, 1984, вып. 6(43), с. 30.
11. А. М. Voloschenko, Т. А. Germogenova, "Numerical Solution of the Time-Dependent Transport Equation with Pulsed Sources," *Transp. Theory and Stat. Phys.*, **23**, No. 6, 845, 1994.
12. R. E. Alcouffe, "An Adaptive Weighed Diamond-Differencing Method for Three-Dimensional XYZ Geometry," *TANS*, 68A, 206 (1993).
13. А. М. Волощенко, "Алгоритм ускорения внутренних итераций по интегралу рассеяния и внешних итераций по области термализации нейтронов и его реализация в программе КАТ-РИН-1.5 для решения уравнения переноса нейтронов и фотонов методом дискретных ординат в трехмерной геометрии," *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-4-2003, М., 2003.
14. Voloschenko A.M. Consistent P_1 synthetic acceleration scheme for transport equation in 3D geometries. Proc. of Intern. Conf. on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications. Avignon, France, September 12–15, 2005, paper 070.
15. Warsa J. S., Wareing T. A., Morel J. A. Krylov iterative methods applied to multidimensional S_n calculations in the presence of material discontinuities // Proceedings of M&C 2003 – Nuclear Mathematical and Computational Sciences: A Century in Review – A Century Anew, paper No. 134, April 6-10, Gatlinburg, USA, 2003, on CD-ROM.
16. Волощенко А. М. Об использовании периодических граничных условий в КР1 методе ускорения внутренних итераций // Тезисы докладов IX Российской научной конференции «Радиационная защита и радиационная безопасность в ядерных технологиях», 24-26 октября, Обнинск, 2006. С. 39-41.
17. Волощенко А.М. "КР1 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.

18. А. М. Волощенко, Т. А. Гермогенова, "О решении уравнения переноса DS_N методом в гетерогенных средах. Часть 1. Плоская геометрия". В сб. "Численное решение уравнения переноса в одномерных задачах", под ред. Т. А. Гермогеновой, ИПМ АН СССР, 1981, стр. 33-63.
19. А. М. Волощенко, "О решении уравнения переноса DS_N методом в гетерогенных средах. Часть 2. Одномерные сферическая и цилиндрическая геометрии". В сб. "Численное решение уравнения переноса в одномерных задачах", под ред. Т. А. Гермогеновой, ИПМ АН СССР, 1981, стр. 64-91.
20. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, "Таблицы интегралов, сумм рядов и произведений," М., "Наука", 1971.
21. R. A. Vaidyanathan, "Finite Moments Algorithm for Particle Transport Problems," *Nucl. Sci. Eng.*, **71**, 46-54 (1979).
22. K. D. Lathrop, "Spatial Differencing of the Transport Equation: Positivity vs. Accuracy," *J. of Comp. Phys.*, **4**, 475-498 (1969).
23. S. M. Lee, R. A. Vaidyanathan, "Comparison of the Order Approximation in Several Spatial Difference Schemes for the Discrete Ordinate Transport Equation in One-Dimensional Plane Geometry," *Nucl. Sci. Eng.*, **76**, 1-9 (1980).
24. E. W. Larsen, P. Nelson, "Finite-Difference Approximation and Superconvergence for the Discrete-Ordinates Equations in Slab Geometry," *SIAM J. Numer. Anal.*, **19**, 334 (1982).
25. P. Barbucci, F. Di Pasquantonio, "Exponential Supplementary Equations for S_n Methods: One-Dimensional Case," *Nucl. Sci. Eng.*, **62**, 371-390 (1977).
26. B. Neta, H. D. Victory, "A New Fourth-Order Finite-Difference Method for Solving Discrete-Ordinates Slab Transport Equations," *SIAM. J. Numer. Anal.*, **20**, 94 (1983).
27. А. М. Волощенко, "Дважды консервативная схема 4-ого порядка точности для уравнения переноса в криволинейных геометриях," *Препринт ИПМ АН СССР*, №49, 1984.
28. Т. А. Гермогенова, А. М. Волощенко, "К развитию метода дискретных ординат," *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. ядерных реакторов*, №5, 57 (1985).
29. Т. А. Germogenova, А. М. Voloschenko and А. V. Shwetsov, "Adaptive Positive Nodal Method for the Transport Equation in Two-Dimensional Curvilinear Geometries," *Proc. Int. Conf. on the Physics of Reactors: Operation Design and Computation*, Marseille, France, April 23-26, 1990, vol. 2, p. XII-49.
30. А. М. Волощенко, Т. А. Гермогенова, А. В. Швецов, "Исследование устойчивости схем 3-4-ого порядка точности для уравнения переноса в x, y геометрии," Тезисы докладов семинара "Численные методы решения уравнения переноса," ИАФА АН Эстонии, Тарту, 15-18 мая 1990, стр. 33-36.

31. А. М. Волощенко, А. В. Швецов, “Опыт использования нодальных схем для решения стационарного уравнения переноса нейтронов и фотонов в двумерных защитных композициях,” *ВАИТ, Сер. Физ. и техн. ядерных реакторов*, №1, 31 (1992).
32. 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).
33. 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).
34. A. M. Voloschenko, “Adaptive Positive Nodal Scheme for Transport Equation in Curvilinear Geometry,” *Proc. of Intern. Conf. On Mathematics and Computations, Reactor Physics and Environmental Analyses*, April 30 - May 4, 1995, Portland, Oregon, USA, vol. 2, p. 989.
35. A. M. Voloschenko, “Geometrical interpretation of family of weighted nodal schemes and adaptive positive approximations for transport equation,” *Proc. Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications*, October 6-10, 1997, Saratoga Springs, NY USA, vol. 2, p. 1517.
36. A. M. Voloschenko, “Some Improvements in Solving of the Transport Equation by the Use of the Family of Weighted Nodal Schemes,” “*Proceedings of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*”, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011, paper 131.
37. E. W. Larsen, "Comparison of Spatial Approximation Methods for the S_n Equations in x, y Geometry," *TANS*, **33**, 317-318 (1979).
38. W. F. Walters and R. D. O'Dell, “A Comparison of Linear Nodal, Linear Discontinuous and Diamond Schemes for Solving the Transport Equation in (x, y) Geometry,” *TANS*, **39**, 465 (1981).
39. Y. Y. Azmy, “The Weighted Diamond-Difference Form of Nodal Transport Methods,” *Nucl. Sci. Eng.*, **98**, 29 (1988).
40. R. H. Szilard, G. C. Pomraning, “A Modified Linear Discontinuous Spatial Discretization Method in Planar Geometry,” *Transp. Theory and Stat. Phys.*, **18**, 255 (1989).
41. J. P. Hennart and E. del Valle, “A Generalized Nodal Finite Element Formalism for Discrete Ordinates Equations in Slab Geometry. Part I: Theory in the Continuous Moment Case,” *Transp. Theory and Stat. Physics.*, **24**, 449 (1995).
42. R. E. Alcouffe, "A Robust Linear Discontinuous Method for the RZ S_N Transport Equation," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **89**, 363-366 (2003).
43. W. A. Rhoades, W. W. Engle, “A New Weighted-Difference Formulation for the Discrete Ordinates Calculations,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **27**, 776-777 (1977).

44. B. G. Petrovic, A. Haghghat, "Analysis of Inherent Oscillations in Multidimensional S_N Solutions of the Neutron Transport Equation," *Nucl. Sci. Eng.*, **124**, 31-62 (1996).
45. B. G. Petrovic, A. Haghghat, "A New Directional θ -Weighted S_N Differencing Scheme," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **73**, 195 (1995).
46. B. G. Petrovic, A. Haghghat, "Directional θ -Weighted Differencing Scheme to Pressure Vessel Fluence Calculations," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **73**, 346 (1995).
47. R. E. Alcouffe, E. W. Larsen, W. F. Miller and B. R. Wienke, "Computational Efficiency of Numerical Methods for the Multigroup Discrete Ordinates Neutron Transport Equations in Slab Geometry Case," *Nucl. Sci. Eng.*, **71**, 111 (1979).
48. А. М. Волощенко, Е. П. Кондратенко, " KP_1 схема ускорения внутренних итераций, согласованная с семейством WLM-WLD схем для уравнения переноса в одномерных геометриях," *Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР*, № 197, 1986.
49. А. М. Voloschenko, " P_1SA Scheme for Acceleration of Inner Iterations Convergence Consistent with the Weighted Nodal Scheme for Transport Equation in 1D Geometries," "*Proceedings of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*", Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011, paper 156.
50. А. М. Волощенко, " KP_1 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.
51. R. Aronson, "Critical Problems for Bare and Reflected Slabs and Spheres," *Nucl. Sci. Eng.*, **86**, 150-156 (1984).
52. R. M. Westfall, D. R. Metcalf, "Singular Eigenfunction Solution of the Monoenergetic Neutron Transport Equation for Finite Radially Reflected Critical Cylinders," *Nucl. Sci. Eng.*, **52**, 1-11 (1973).
53. W. H. Reed, "New Difference Schemes for the Neutron Transport Equation," *Nucl. Sci. Eng.*, **46**, №2, 309-314 (1971).
54. С. К. Годунов, "Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики," *Матем. сборник*, 47, №3, 271-306, 1959.
55. Н. Н. Калиткин, "Численные методы," М., "Наука", 1978.
56. А. М. Волощенко, А. А. Дубинин, "РОЗ-6.6 – программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения методом дискретных ординат в одномерных геометриях," Инструкция для пользователя, *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-25-2004, М., 2004.

57. А. М. Волощенко и А. В. Швецов. КАСКАД-С-3.0 - программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения методом дискретных ординат в двумерных геометриях, Инструкция для пользователя, Отчет ИПМ РАН, инв. № 6-2-2014, М., 2014.
58. А. М. Волощенко, В. П. Крючков, “КАТРИН-2.5 – программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения методом дискретных ординат в трехмерной геометрии,” Инструкция для пользователя, *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 6-21-2011, М., 2011.
59. A. M. Voloschenko, S. V. Gukov, V. P. Kryuchkov, A. A. Dubinin, O. V. Sumaneev, “The CNCSN: one, two- and three-dimensional coupled neutral and charged particle discrete ordinates code package”, *Proc. of International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, Avignon, France, September 12-15, 2005, on CD-ROM.
60. A. M. Voloschenko, S. V. Gukov, A. A. Russkov, M. I. Gurevich, D. A. Shkarovsky, V. P. Kryuchkov, O. V. Sumaneev, A. A. Dubinin, “The CNCSN-2: One, Two- and Three-Dimensional Coupled Neutral and Charged Particle Discrete Ordinates Code System”, *Proc. of International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics*, Saratoga Springs, USA, May 3-7, 2009, on CD ROM.
61. “CNCSN 2009: One, Two- and Three-Dimensional Coupled Neutral and Charged Particle Discrete Ordinates Parallel Multi-Threaded Code System,” *RSICC code package CCC-726*, 2009 (the abstract is online: <http://rsicc.ornl.gov/codes/ccc/ccc7/ccc-726.html>, <http://www.nea.fr/abs/html/ccc-0726.html>).
62. Воробьев Ю. В. Метод моментов в прикладной математике. М.: Физматгиз, 1958.
63. Морозов В. Н. О решении кинетических уравнений с помощью S_n метода // Теория и методы расчета ядерных реакторов. М.: Госатомиздат, 1962. С. 91-117.
64. Adams M. L., Larsen E. W. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // *Progress in Nuclear Energy*. 2002. V. 40. Issue 1. P. 3-159.
65. Лебедев В. И. КР-метод итераций для кинетического уравнения // Материалы Совещания по математическим методам решения задач ядерной физики. Дубна, 17-20 ноября 1964. с. 93-96.
66. Лебедев В. И. О КР -методе ускорения сходимости итераций при решении кинетического уравнения // *Числ. методы решения задач матем. физ.* М., 1966. С. 154-176.
67. Лебедев В. И. Об итерационном КР -методе // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1967. Т. 7. №6. С. 1250-1269.

68. Kopp H. J. Synthetic method solution of the transport equation // Nucl. Sci. and Eng., 1963, vol. 17, №1, pp. 65-74.
69. Alcouffe R. E. Diffusion synthetic acceleration methods for the diamond-differenced discrete-ordinates equations // Nucl. Sci. and Eng., 1977, vol. 64, №2, pp. 344-355.
70. Morel J. E. A synthetic acceleration method for discrete ordinates calculations with highly anisotropic scattering // Nucl. Sci. and Eng., 1982, vol. 82, №1, pp. 34-46.
71. Larsen E. W. Diffusion-synthetic acceleration methods for discrete-ordinates problems // Transp. Theory and Stat. Phys., 1984, vol. 13, №1&2, pp. 107-126.
72. Averin A. V., Voloschenko A. M. Consistent P_1 synthetic acceleration method for outer iterations // Transp. Theory and Stat. Phys., 1994, vol. 23, №5, pp. 701-730.
73. Волощенко А. М., Воронков А. В., Сычугова Е. П. Согласованная P_1SA схема ускорения внутренних и внешних итераций для уравнения переноса нейтронов и фотонов в одномерных геометриях в пакете РЕАКТОР // Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. 1996. № 2.
74. Voloschenko A. M. Completely consistent P_1 synthetic acceleration scheme for charged-particle transport calculations // Proc. 1996 Top. Meet. Radiation Protection and Shielding, April 21-25, 1996, No. Falmouth, USA. vol. 1, pp. 408-415.
75. Волощенко А. М. Полностью согласованная P_1 синтетическая схема ускорения внутренних итераций для задач переноса заряженного излучения // Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 1998, №39.
76. Voloschenko A. M. Consistent P_1 synthetic acceleration scheme for transport equation in two-dimensional r, z geometry // Proc. Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications, October 6-10, 1997, Saratoga Springs, USA, vol. 1, pp. 364-373.
77. Волощенко А. М. P_1 синтетическая схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в двумерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой // Препринт №38, М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 1998.
78. Voloschenko A. M. Experience in the use of the consistent P_1 synthetic acceleration scheme for transport equation in 2D geometry // Proc. of International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses in Nuclear Applications, 27-30 September, 1999, Madrid, Spain, V. 1. P. 104-113.
79. Трошиев В. Е., Юдинцев В. Ф., Федянин В. И. Об ускорении сходимости итераций при решении кинетического уравнения. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1968, т. 8, №2, с. 452.

80. Трощев В. Е., Юдинцев В. Ф. Итерационный метод постоянных поправок для решения спектральных задач переноса излучения. // *ВАНТ*, 1978, вып. 2, стр. 13.
81. Valougeorgis D., Williams M., Larsen E. W. Stability analysis of synthetic acceleration methods with anisotropic scattering// *Nucl. Sci. Eng.*, 1988, V. 99, №1, pp. 91-98.
82. Lorence L. J., Morel J. E., Larsen E. W. An S_2 synthetic acceleration method for the one-dimensional S_N equations with linear discontinuous spatial differencing // *Nucl. Sci. Eng.*, 1989, vol. 101, № 2, pp. 341-351.
83. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1964, т. 4, №6, с. 1078-1087.
84. Anistratov D. Y., Gol'din V. Y. Nonlinear Methods for Solving Particle Transport Problems // *Transp. Theory and Stat. Phys.*, 1993, vol. 22, p. 125.
85. Гермогенова Т. А., Сушкеич Т. А. Решение уравнения переноса методом средних потоков // Сб. "Вопросы физики защиты", Атомиздат, 1969, вып. 3, стр. 34-36.
86. Волощенко А. М. Численное решение нестационарного уравнения переноса с импульсными источниками // *ВАНТ, Сер. Физ. и техн. яд. реакт.*, 1986, вып. 4, стр. 17-21.
87. Трощев В. Е. Решение кинетического уравнения и уравнения квазидиффузии по согласованным разностным схемам // *Численные методы решения задач математической физики*, М., Наука, 1966. с. 177-185.
88. Larsen E. W. Unconditionally Stable Diffusion-Synthetic Acceleration Methods for the Slab Geometry Discrete Ordinates Equations. Part I: Theory. // *Nucl. Sci. Eng.*, 1982, vol. 82, pp. 47-63.
89. McCoy D. R., Larsen E. W. Unconditionally Stable Diffusion-Synthetic Acceleration Methods for the Slab Geometry Discrete Ordinates Equations. Part II: Numerical Results. // *Nucl. Sci. Eng.*, 1982, vol. 82, pp. 64-70.
90. A. M. Voloschenko, "A Remedy to Prevent the P1SA Scheme Degradation in Multidimensional S_n Calculations in the Presence of Material Discontinuities," *Proc. of International Conference Advances in Nuclear Analysis and Simulation – PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006, on CD-ROM.
91. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
92. Azmy Y. Y., Larsen E. W. Fourier analysis of the diffusion synthetic acceleration method for weighted diamond-differencing schemes in Cartesian geometries // *Nucl. Sci. and Eng.*, 1987, vol. 95, №2, pp. 106-115.
93. Аристова Е. Н., Гольдин В. Я., Колпаков А. В. Методика расчета переноса излучения в теле вращения // *Математическое моделирование*, 1997, т. 9, №3, с. 91-108.

94. Valougeorgis D. Boundary treatment of the diffusion synthetic acceleration method for fixed-source discrete-ordinates problems in x - y geometry // Nucl. Sci. and Eng., 1988, vol. 100, №2, pp. 142-148.
95. Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы. М.: Наука, 1977.
96. Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. М.: Изд. МФТИ, 1994.
97. Шишков Л. К. Методы решения диффузионных уравнений двумерного ядерного реактора. М.: Атомиздат, 1976.
98. Khalil H. A nodal diffusion technique for synthetic acceleration of nodal S_n calculations // Nucl. Sci. and Eng., 1985, vol. 90, №3, pp. 263-280.
99. Averin A. V., Voloschenko A. M. Consistent P_1 synthetic acceleration method for weighted diamond scheme in r, z geometry // Intern. Symp. Numerical Transport Theory, May 26-28, Moscow, 1992, pp. 45-48.
100. Евдокимов В. В., Шагалиев Р. М. Согласованный метод ускорения итераций при решении двумерных задач переноса на неортогональных сетках по схемам типа DS_N метода // Вопр. атом. науки и тех., сер. Мат. мод. физ. процес. 1994, №3, с. 11-17.
101. Morel J. E., Dendy J. E., Jr., Wareing T. A. Diffusion-accelerated solution of the two-dimensional S_N equations with bilinear-discontinuous differencing // Nucl. Sci. and Eng., 1993, vol. 115, №3, pp. 304-319.
102. Ramone G. L., Adams M. L. and Nowak P. F. A transport synthetic acceleration method for transport iterations // Nucl. Sci. and Eng., 1997, vol. 125, №3, pp. 257-283.
103. Adams M. L., Wareing T. A. Diffusion-synthetic acceleration given anisotropic scattering, general quadratures, and multidimensions // Trans. Am. Nucl. Soc. 1993. V. 68A. P. 203-204.
104. I. Slessarev, A. Tchistiakov, IAEA-ADS Benchmark (Stage 1), Results and Preliminary Analysis, RCM-Meeting, Bologna, March 24-26, 1997.
105. Марчук Г. И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
106. Morel J. E., Manteuffel T. A. An angular multigrid acceleration technique for S_N equations with highly forward-peaked scattering // Nucl. Sci. Eng. 1991. V. 107, № 4. P. 330-342.
107. K. M. Khattab, E. W. Larsen, "Synthetic acceleration methods for linear transport problems with highly anisotropic scattering, *Nucl. Sci. Eng.*, **107**, 217 (1991).
108. B. T. Adams and J. E. Morel, "A Two-Grid Acceleration Scheme for the Multigroup S_N Equations with Neutron Upscattering," *Nucl. Sci. Eng.*, **115**, 253 (1993).
109. B. T. Adams, J. E. Morel, "An Acceleration Scheme for the Multigroup S_N Equations with Fission and Thermal Upscattering," *Proc. of Joint International Conference on Mathematical*

- Methods and Supercomputing for Nuclear Applications*, Saratoga Springs, New York, USA, 5-9 October, 1997, vol. 1, p. 343 (1997).
110. J. E. White, D. T. Ingersoll, C. O. Slater, R. W. Roussin, "BUGLE-96: A Revised Multigroup Cross-Section Library derived from ENDF/B-VI for LWR and Pressure Vessel Dosimetry Applications," DLC-185, Radiation Safety Information Computational Center (1996).
111. J. Bucholz, S. Antonov, S. Belousov, "BGL440 and BGL1000 Broad Group Neutron/Photon Cross Section Libraries Derived from ENDF/B-VI Nuclear Data", IAEA, INDC(BUL)-15, 1996.
112. J. E. White, R. Q. Write, D. T. Ingersoll, R. W. Roussin, N. M. Greene and R. E. MacFarlane, "VITAMIN-B6: A Fine-Group Cross Section Library Based on ENDF/B-VI Release 3 for Radiation Transport Applications," DLC-184, Radiation Safety Information Computational Center (1996).
113. G. N. Manturov, M. N. Nikolaev and A. M. Tsiboulia, "BNAB-93 Group Data Library, Part1: Nuclear Data for the Calculations of Neutron and Photon Radiation Fields," Vienna, IAEA, INDC(CCP)-409, 1997.
114. Г. Н. Мантуров, М. Н. Николаев, А. М. Цибуля, "Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения," Препринт ФЭИ-2828, Обнинск, 2000, стр. 1-41.
115. B. Boehmer, J. Konheiser, G. Borodkin, E. Brodtkin, A. Egorov, A. Kozhevnikov, S. Zaritsky, G. Manturov, A. Voloschenko, "ANISN-DORT-ROZ-MCNP-TRAMO Neutron-Gamma Flux Intercomparison Exercise for a Simple Testing Model," to be published in *Proc. of ISRD 2002*.
116. А. М. Волощенко, С. В. Гуков, О. В. Николаева, "Пакет программ CEPXS-BFP/PO3-6.5/КАСКАД-С-2.0 для расчета электронно-фотонного каскада методом дискретных ординат в одномерной и двумерной геометриях," *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-5-2000, М., 2000, стр. 1-60.
117. А. М. Волощенко, Н. Т. Кулагин, О. В. Суманеев, "Разработка численной методики и программного обеспечения для расчета электрон-фотонного и адронного каскадов в мишенях", *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-2-2001, М., 2000, стр. 1-45.
118. A. M. Voloschenko, "An Experience in the Use of the S_N Method for Hadron and Electron-Photon Transport Problems in Boltzmann-Fokker-Planck Formulation," Proc. of short course "Neutron and Radiation Transport Simulation: Theory and Applications," ed. by Prof. Nam Zin Cho, KAIST, Taejon, Korea, February 19-22, 2001, p. 319.
119. A. M. Voloschenko, S. V. Gukov, "Some New Algorithms for Solving the Coupled Electron-Photon Transport Problems by the Discrete-Ordinates Method," *Proc. Int. Conf. On the New Frontiers of Nuclear Technology: Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing – PHYSOR 2002*, Seoul, Korea, October 7-10, 2002.

120. А. М. Волощенко, “CEPXS-BFP – версия программы CEPXS для подготовки групповых сечений для расчета электронно-фотонного каскада, адаптированная для решения задачи переноса заряженных компонент излучения в рамках уравнения Больцмана-Фоккера-Планка с использованием метода дискретных ординат,” *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-36-2004, М., 2004, стр. 1-18.
121. L. J. Lorence, Jr., J. E. Morel and G. D. Valdez, “User’s Guide to CEPXS/ONELD: A One-Dimensional Coupled Electron-Photon Discrete Ordinates Code Package,” Version 1.0, SAND89-1661, Sandia National Laboratories (1989).
122. L. J. Lorence, Jr., J. E. Morel and G. D. Valdez, “Physics Guide to CEPXS: A Multigroup Coupled Electron-Photon Cross-Section Generating Code,” Version 1.0, SAND89-1685, Sandia National Laboratories (1989).
123. L. J. Lorence, Jr., J. E. Morel and G. D. Valdez, “Results Guide to CEPXS/ONELD: A One-Dimensional Coupled Electron-Photon Discrete Ordinates Code Package,” Version 1.0, SAND89-2211, Sandia National Laboratories (1989).
124. G. J. Lockwood, L. E. Ruggles, G. H. Miller, J. A. Halbleib, “Calorimetric Measurement of Electron Energy Deposition in Extended Media – Theory vs. Experiment,” SAND79-0414 (1980).
125. D. V. Gorbatkov and V. P. Kryuchkov, “SADCO-2: A Modular Code System for Generating Coupled Nuclear Data Libraries to Provide High-Energy Particle Transport Calculation by Multigroup Methods,” *Nucl. Instr. & Meth. In Phys. Res.*, **A 372**, 297 (1996).
126. D. V. Gorbatkov, V. P. Kryuchkov, O. V. Sumaneev, “SADCO-2.4: A Modular Code System for Generating Coupled Nuclear Data Libraries to Provide High-Energy Particle Transport Calculation by Multigroup Methods,” User’s Guide, Institute for High-Energy Physics, 2005, pp. 1-11.
127. А. М. Волощенко, С. В. Гуков, А. В. Швецов, “ARVES-2.5 - комплекс программ, обслуживающих файл макроконстант в формате FMAC-M для решения многогруппового уравнения переноса,” Инструкция для пользователя, *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 7-24-2004, М., 2004, стр. 1-29.
128. K. Przybylski, J. Ligou, “Numerical Solution of the Boltzmann Equation Including Fokker-Planck Terms,” *Nucl. Sci. Eng.*, **81**, 92 (1982).
129. J. E. Morel, L. J. Lorence, Jr., R. P. Kensek, J. A. Halbeib, D. P. Sloan, “A Hybrid Multigroup/Continuous-Energy Monte Carlo Method for Solving the Boltzmann-Fokker-Planck Equation,” *Nucl. Sci. Eng.*, **124**, 369 (1996).
130. C. R. Drumm, W. C. Fan, J. H. Renken, “Forward and Adjoint Methods and Applications for Deterministic Electron-Photon Transport,” *Nucl. Sci. Eng.*, **108**, 16 (1991).
131. J. E. Morel, “Multigroup Legendre Coefficients for the Diamond Difference Continuous Slowing Down Operator,” *Nucl. Sci. Eng.*, **91**, 324 (1985).

132. M. Landesman, J. E. Morel, "Angular Fokker-Planck Decomposition and Representation Techniques," *Nucl. Sci. Eng.*, **103**, 1 (1989).
133. J. E. Morel, "An Improved Fokker-Planck Angular Differencing Scheme," *Nucl. Sci. Eng.*, **89**, 131 (1985).
134. J. E. Morel, A. Prinja, J. M. McGhee, T. A. Wareing, B. C. Franke, "A Discretization Scheme for the Three-Dimensional Angular Fokker-Planck Operator," *Nucl. Sci. Eng.*, **156**, 154-163 (2007).
135. A. M. Voloschenko, S. V. Gukov, "Singular component representation and treatment techniques for high anisotropical scattering problems," *Proc. 8th Intern. Conf. on Radiation Shielding*, Arlington, USA, 1994, **1**, p. 149.
136. А. М. Волощенко, С. В. Гуков и Е. П. Кондратенко, "К-шаговая полуявная схема для уравнения переноса," Препринт ИПМ РАН № 54, 1994.
137. S. V. Gukov, A. M. Voloschenko and E. P. Kondratenko, "Semiexplicit K-Step Scheme for Transport Equation: Analysis and Applications to Charged Particles Transport Calculations," *Proc. 8th Intern. Conf. on Radiation Shielding*, Arlington, USA, 1994, **1**, p. 572.
138. A. M. Voloschenko, "An S_n Algorithm for Spallation Target Neutronics and Shielding Calculations," *Proc. of International Conference on Mathematics and Computations, Reactor Physics, and Environmental Analyses in Nuclear Applications*, 27-30 September, 1999, Madrid, Spain, vol. 2, p. 975.
139. А. М. Волощенко, А. А. Руссков, "Результаты распараллеливания вычислений в программах КАСКАД-С и КАТРИН для решения уравнения переноса в двумерной и трехмерной геометриях." *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 6-06-2009, М., 2009, стр. 1-37.
140. R. S. Baker and R. E. Alcouffe, "Parallel 3-D SN Performance for DANTSYS/MPI on the Cray T3D," *Proc. of the Joint Intl. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing for Nucl. Applications*, 1, 377, Saratoga, NY (1997).
141. R. S. Baker and K. R. Koch, "An SN Algorithm for the Massively Parallel CM-200 Computer," *Nucl. Sci. Eng.*, 128, 312 (1998).
142. R. E. Alcouffe, R. S. Baker, J. A. Dahl, S. A. Turner, R. Ward, "PARTISN 4.00: Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System," LA-UR-05-3925 (May 2005); RSICC Code Package CCC-707, 2005.
143. 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 VVER vessel steel," *Atomic Energy*, **100**, №5, 332-339 (2006).

144. А. М. Волощенко, А. А. Руссков, С. М. Зарицкий, М. И. Гуревич, А. Л. Егоров, С. В. Марин, В. Ф. Бояринов, «Обоснование точности расчета радиационных нагрузок на ВКУ и корпус реактора ВВЭР-1000 с использованием кода КАТРИН 2.5,» *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 6-16-2011, М., 2011; Аттестационный паспорт №357 от 17.04.2014.
145. А. М. Волощенко, А. А. Руссков, С. М. Зарицкий, М. И. Гуревич, А. Л. Егоров, В. Ф. Бояринов, «Обоснование точности расчета радиационных нагрузок на ВКУ и корпус реактора ВВЭР-440 с использованием кода КАТРИН 2.5,» *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 6-17-2011, М., 2011; Аттестационный паспорт №356 от 17.04.2014.
146. A. Dzhalandinov, V. Tsofin, V. Kochkin, P. Panfyorov, A. Timofeev, A. Reshetnikov, D. Makhotin, D. Erak, A. Voloschenko, “Validation (testing) of 3D code KATRIN for fast neutron fluence calculation on VVER-1000 reactor pressure vessel by ex-vessel measurements and surveillance specimens results,” *Proceedings of 15-th International Symposium on Reactor Dosimetry*, 18-23 May 2014, Aix-En-Provence, France, paper E136.
147. A. M. Voloschenko, S. M. Zaritsky, A. L. Egorov, V. F. Boyarinov, “Updates of the cross-section libraries used in VVER-1000 reactor pressure vessel and vessel interior equipment dosimetry calculations,” *Proceedings of 15-th International Symposium on Reactor Dosimetry*, 18-23 May 2014, Aix-En-Provence, France, paper E133.
148. V. P. Kryuchkov, J. Chang, Y. S. Cho, A. M. Voloschenko and O. V. Sumaneev, “An Experience in the Use the S_n Method for 1D/2D/3D Spallation Target Neutronics and Shielding Calculations,” *Proc. of International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, Avignon, France, September 12-15, 2005, on CD-ROM.
149. R. E. Prael and H. Lichtenstein, “*User guide to LCS: The LAHET Code System*,” LA-UR-89-3014, Los Alamos National Laboratory (September, 1989).
150. John S. Hendricks, Gregg W. McKinney, Holly R. Trellue, Joe W. Durkee, Joshua P. Finch, Michael L. Fensin, Michael R. James, Denise B. Pelowitz, Laurie S. Waters, Franz X. Gallmeier, Jean-Christophe David MCNPX, VERSION 2.6.B, June 1, 2006; LA-UR-06-3248.
151. Dementyev A.V., Sobolevsky N.M. SHIELD - Universal Monte Carlo Hadron Transport Code: Scope and Applications. *Radiation Measurements*, 30 (1999) 553. URL <http://www.inr.ru/shield/>.
152. R. G. Vassil'kov and V. I. Yurevich, “Neutron emission from an extended lead target under the action of light ions in the GeV region,” *Proc. ICANS-XI International Collaboration on Advanced Neutron Sources*, KEK, Tsukuba, October 22-26, 1990, pp. 340-353 (1990).
153. P. A. Landeyro, M. Guidotti, V. Silvani and P. Neuhold, “Simulation of Thick Target Experiments for the Validation of Spallation Codes,” *Proc. Intern. Conf. on the Phys. of Nucl. Sci. and Techn.*, October 5-8, 1998, Long Island, NY, USA, Vol. 2, p. 1327 (1998).

154. M. S. Zucker, N. Tsoupas, P. E. Vanier, U. Von Wimmersperg, S. F. Mughabghab and E. Schmidt, "Spallation Neutron Production Measurements," *Nucl. Sci. Eng.*, **129**, p. 180 (1998).
155. V. A. Nevinitisa, 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.
156. 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. Nevinitisa, 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.
157. SCALE 6.1: "A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design," ORNL/TM-2005/39, Version 6.1 (June 2011), RSICC code package C00785.
158. R. Orsi, "BOT3P Version 5.1: A Pre/Post-Processor System for Transport Analysis," *ENEA report FIS-P9H6-014*, Italy, 2006.
159. М. И. Гуревич, А. А. Руссков, А. М. Волощенко, "ConDat 1.0 – программа преобразования исходных данных из комбинаторной геометрии в растровую с использованием алгоритма трейсинга (tracing). Инструкция для пользователя," *Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, № 12, 2007.
160. M. I. Gurevich, D. S. Oleynik, A. A. Russkov and A. M. Voloschenko, "About the Use of the Monte-Carlo Code Based Tracing Algorithm and the Volume Fraction Method for S_n Full Core Calculations," *Proc. of International Conference Advances in Nuclear Analysis and Simulation – PHYSOR 2006*, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006, on CD-ROM.
161. М. И. Гуревич, А. А. Руссков, А. М. Волощенко "ConSource – программа для конвертации источника деления, заданного средствами комбинаторной геометрии в формате программы MCU, на разностную сетку задачи с использованием алгоритма лучевого трассирования. Инструкция для пользователя" // *Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, № 17, 2009.
162. М. И. Гуревич, А. А. Руссков, А. М. Волощенко, "BurnDat – утилита для подготовки начальных данных о источнике деления в формате программы MCU на основе потвэльных и покассетных данных о выгорании, рассчитанных программами ПЕРМАК-А и БИПР-7А. Инструкция для пользователя" // *Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, № 16, 2009.

163. “Программа MCU-REA/2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Описание применения и инструкция для пользователя,” *Отчет ИЯР НИЦ “Курчатовский институт”*, инв. № 36/2004, М., 2004.
164. Jon A. Dahl and Raymond E. Alcouffe, “PARTISN Results for the C5G7 MOX Benchmark Problems,” *TANS*, **89**, 274 (2003).
165. J. A. Dahl, “3-D Extension C5G7 MOX Benchmark Results Using PARTISN,” *Proc. of International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France, Sept. 12-15, 2005*, on CD-ROM.
166. P. Humbert, “Results for the C5G7 3-D Extension Benchmark Using the Discrete Ordinates Code PANDA,” *ibid.*
167. J. E. White, et al., *ANS Rad. Prot. & Shield. Top. Meeting* (Falmouth, 1996); RSIC Data Library Collection DLC-185/BUGLE-96 (ORNL, 1996).
168. 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.
169. 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.
170. M. I. Gurevich, S. M. Zaritsky, D. S. Oleynik, V. V. Sinitza, A. A. Russkov, A. M. Voloschenko, V. I. Tsofin, A. D. Djalandinov, G. N. Manturov, “Experience in the Use of the Monte-Carlo Code Based Tracing algorithm and the Volume Fraction Method in VVER Radiation Shielding Calculations”, *Proc. of International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics, Saratoga Springs, USA, May 3-7, 2009*, on CD ROM.
171. М. И. Гуревич, С. М. Зарицкий, В. В. Сеница, В. И. Цофин, А. Д. Джаландинов, А. М. Волощенко, А. А. Руссков, Г. Н. Мантуров, “Об использовании аппроксимаций, поддерживающих баланс масс и нейтронов источника деления в разностной ячейке сетки, для расчетов радиационных полей в защите РУ АЭС 2006” , журнал “Русский инженер”, специальный выпуск, «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР», 26-29 мая 2009, ОКБ «ГИДРОПРЕСС», Подольск, Россия, стр. 20-28, 2009.
172. Wagner J.C. and Haghghat A. "Automated Variance Reduction of Monte Carlo Shielding Calculations Using the Discrete Ordinates Adjoint Function". *Nucl. Sci. Eng.*, vol. 128, 186, 1998.
173. 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.