



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Онлайновая библиотека



Т.А.Гермогорова

**Избранные труды.
Том 2**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Гермогорова Т.А. Избранные труды. Том 2. М.: ИПМ им.М.В.Келдыша, 2017. 260 с.
URL: <http://keldysh.ru/e-biblio/germogenova-2>

2

Т. А. Гермогенова

Избранные труды



Т. А. Гермогенова

Избранные труды

Том 2

**ИПМ им. М.В. Келдыша
Москва — 2017**

УДК 517.958
ББК 22.161
Г388

Г388 Гермогенова Т.А. **Избранные труды** / сост. Л.П. Басс, А.М. Волощенко, О.В. Николаева. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2017. — 260 с.

В трехтомный сборник трудов Т.А. Гермогеновой вошли работы 1957-2002 годов.

Тематика статей второго тома: численные схемы, грубосеточные приближения.

Идея и материалы для обложки — Ю.Н. Днестровский

Оглавление

От составителей	4
О решении уравнения переноса при сильно неизотропном рассеянии	5
О решении уравнения переноса при сильно неизотропном рассеянии. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.....	11
К уточнению приближения для малых углов в задачах о многократном рассеянии	18
Решение уравнения переноса методом средних потоков	21
Численные методы решения краевых задач для уравнения переноса в теории радиационной защиты реактора	38
Пространственное и угловое распределения быстрых нейтронов в конических защитах	72
ОКС – пакет программ константного обеспечения.....	84
Об обратных задачах атмосферной оптики.....	92
Математическое обеспечение задач радиационной защиты	99
Методы дискретных ординат в двумерных задачах с (r,z) – геометрией.....	112
Сопряженное уравнение переноса в задачах о точечном источнике у границы раздела.....	119
К развитию численных методов в задачах о распространении излучения.....	124
Characteristic values of the transport equation as functions of the problem parameters	135
К развитию численных методов решения уравнения переноса излучения	162
Numerical solution of the time-dependent transport equation with pulsed sources	174
Грубосеточные аппроксимации уравнения переноса излучения. Задачи с существенным поглощением	197
Грубосеточные аппроксимации уравнения переноса излучения. Задачи со слабым поглощением.....	226

От составителей

В трехтомный сборник избранных трудов Т.А. Гермогеновой вошли работы 1957-2002 годов: статьи, препринты. Работы сгруппированы по следующим темам.

Том 1 – Асимптотические разложения. Спектры.

Том 2 – Численные схемы. Грубосеточные приближения.

Том 3 – Прикладные задачи.

Во 2-м томе рассматриваются вопросы учета анизотропии рассеяния, ускорения сходимости итерационного процесса по столкновениям и другие проблемы развития численных методов теории переноса.

Созданная Т.А. Гермогеновой научная школа (сотрудники, ученики, последователи) успешно продолжает работу по решению задач теории переноса в самых разных приложениях.

10.05.2017

Л.П. Басс, А.М. Волощенко, О.В. Николаева

Доклады Академии наук СССР
1957. Том 113, №2, стр.297-300.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Т.А.Гермогенова

О РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ПРИ СИЛЬНО НЕИЗОТРОПНОМ РАССЕЙАНИИ

(Представлено академиком М.В.Келдышем 3 XII 1956)

Для решения краевой задачи

$$\cos \theta \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \psi(\theta, \varphi, \tau) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} \sin \theta' d\theta' \psi(\theta', \varphi', \tau) P(\cos \chi), \quad (1^1)$$

$$\cos \chi = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi'), \quad (1^2)$$

$$\psi(\theta, \varphi, 0) = f_1(\theta, \varphi); \quad \psi(\theta, \varphi, h) = f_2(\theta, \varphi),$$

возникающей при исследовании рассеяния излучения плоским слоем вещества конечной оптической толщины, обычно применяются метод сферических гармоник или интерполяционные методы (¹⁻³). Эти методы дают хорошие результаты в случае медленно меняющейся функции $P(\cos \chi)$. Рассеянию сильно неизотропному (рассеянию света в мутных средах, рассеянию нейтронного излучения с энергией в несколько мегаэлектронвольт в тяжелых веществах, рассеянию заряженных частиц) отвечают функции $P(\cos \chi)$ резко меняющиеся, с высоким максимумом в области малых углов χ . Развитие в последнее время методы «малоуглового приближения» (^{4,5}) в применении к этим задачам позволяют найти решение с достаточной степенью точности только в области малых углов θ , в то время как в ряде вопросов интересен характер решения при больших углах θ (⁶).

Предлагаемый метод является обобщением методов интерполяционного типа. Качественное исследование уравнения переноса или соответствующего интегрального уравнения позволяет установить форму решения и, если оно оказывается сильно меняющейся функцией углов θ и φ , выделить предполагаемые особенности в виде известного множителя, так чтобы новой неизвестной функцией была функция достаточно гладкая, с большой степенью точности представляемая полиномом невысокого порядка по θ и φ с коэффициентами, зависящими от τ . Искать такой полином можно двумя путями, один из которых подобен методу сферических гармоник, другой – методу Чандрасекара.

Обратимся к задачам, в которых можно отказаться от учета зависимости решения от азимута φ и привести поэтому уравнение (1¹) и граничные условия (1²) к виду

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \psi(\mu, \tau) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} p(\mu, \mu') \psi(\mu', \tau) d\mu' + f(\mu, \tau), \quad (2^1)$$

$$\psi(\mu, 0) = 0, \quad 0 \leq \mu \leq 1; \quad \psi(\mu, h) = 0, \quad -1 \leq \mu \leq 0. \quad (2^2)$$

Здесь через μ обозначен $\cos \theta$ и $p(\mu, \mu') \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P(\cos \chi) d\varphi'$.

Представим решение и функции $p(\mu, \mu')$ и $f(\mu, \tau)$ произведениями:

$$\psi(\mu, \tau) = \omega(\mu) F(\mu, \tau), \quad p(\mu, \mu') = \omega(\mu) \omega(\mu') \gamma(\mu, \mu'),$$

$$f(\mu, \tau) = \omega(\mu) g(\mu, \tau),$$

где «вес» $\omega(\mu)$ грубо описывает резкие изменения $\psi(\mu, \tau)$ при изменении μ .

В интерполяционном n - приближении будем искать функцию $F(\mu, \tau)$ в форме интерполяционных полиномов Лагранжа

$$F^{(n)}(\mu, \tau) = \sum_{i=1}^n L_i^{(+)} F^{(n)}(\mu_i, \tau) \quad \text{при } \mu > 0, \quad (3)$$

$$F^{(n)}(\mu, \tau) = \sum_{i=-1}^{-n} L_i^{(-)} F^{(n)}(\mu_i, \tau) \quad \text{при } \mu < 0.$$

Через $L_i^{(+)}$ и $L_i^{(-)}$ обозначены множители Лагранжа: μ_i - узлы интерполяции.

Для определения коэффициентов $F^{(n)}(\mu_i, \tau)$ получим систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\mu_i \frac{dF^{(n)}(\mu_i, \tau)}{d\tau} + F^{(n)}(\mu_i, \tau) - \frac{1}{2} \sum_{j=-n}^n a_j \gamma^{(n,n)}(\mu_i, \mu_j) F^{(n)}(\mu_j, \tau) = g^n(\mu_i, \tau) \quad (i = -n, \dots, -1, +1, \dots, +n) \quad (4^1)$$

с граничными условиями

$$F^{(n)}(\mu_i, 0) = 0, \quad i > 0; \quad F^{(n)}(\mu_i, h) = 0, \quad i < 0. \quad (4^2)$$

Квадратурные формулы, использованные для приближенного представления интеграла, входящего в уравнение переноса, таковы, что имеют место равенства

$$\int_0^{\pi} \pi_l(\mu) [\omega(\mu)]^2 d\mu = \sum_{j=1}^n a_j \pi_l(\mu_j), \quad \int_{-1}^0 \pi_k(\mu) [\omega(\mu)]^2 d\mu = \sum_{j=-1}^{-n} a_j \pi_k(\mu_j),$$

если $\pi_k(\mu)$ и $\pi_l(\mu)$ - производные полиномы степени k и l ; $k, l \leq n$ при любом выборе узлов интерполяции и $k, l \leq 2n-1$, если в качестве узлов интерполяции взяты нули полиномов $p_n(\mu)$ из систем полиномов, ортогональных с весом $[\omega(\mu)]^2$ на интервалах $(0, 1)$ и $(-1, 0)$. Функции $\gamma(\mu, \mu')$ и $g(\mu, \tau)$ представлены в уравнениях (4¹) полиномами $\gamma^{(n,n)}(\mu, \mu')$ и $g^n(\mu, \tau)$, совпадающими с точными функциями в узлах μ_i .

В полиномиальном n - приближении будем искать функцию $\psi(\mu, \tau)$ при $\mu > 0$ в виде разложения по системе полиномов $\{p_k^{(+)}(\mu)\}$, ортогональных с весом $[\omega(\mu)]^2$ на интервале $(0, 1)$, ограничиваясь n членами разложения решения $\psi(\mu, \tau)$, а также функций $p(\mu, \mu')$, $f(\mu, \tau)$:

$$\begin{aligned}\psi^{(n)}(\mu, \tau) &= \omega(\mu) \sum_{r=1}^n \psi_r^{(n)}(\tau) p_{r-1}^{(+)}(\mu); \\ p^{(n,n)}(\mu, \mu') &= \omega(\mu)\omega(\mu') \sum_{r,s=1}^n P_{r,s} p_{r-1}^{(+)}(\mu) p_{s-1}^{(+)}(\mu'); \\ f^{(n)}(\mu, \tau) &= \omega(\mu) \sum_{r=1}^n f_r(\tau) p_{r-1}^{(+)}(\mu).\end{aligned}\quad (5)$$

При $\mu < 0$ воспользуемся аналогичными разложениями по системе полиномов $\{p_k^{(-)}(\mu)\}$, ортогональных с весом $[\omega(\mu)]^2$ на интервале $(-1, 0)$. Коэффициенты $\psi_r^{(n)}(\tau)$ ($r = -n, \dots, -1, +1, \dots, n$) определяются системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}b_{j-1} \frac{d\psi_{j-1}^{(n)}}{d\tau} + c_j \frac{d\psi_j^{(n)}}{d\tau} + d_{j+1} \frac{d\psi_{j+1}^{(n)}}{d\tau} + \psi_j^{(n)} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{k=-n}^n P_{jk} \psi_k^{(n)} = f_j(\tau), \quad j > 0; \\ b_{j+1} \frac{d\psi_{j+1}^{(n)}}{d\tau} + c_j \frac{d\psi_j^{(n)}}{d\tau} + d_{j+1} \frac{d\psi_{j+1}^{(n)}}{d\tau} + \psi_j^{(n)} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{k=-n}^n P_{jk} \psi_k^{(n)} = f_j(\tau), \quad j < 0,\end{aligned}\quad (6^1)$$

с граничными условиями

$$\psi_j(0) = 0, \quad j > 0; \quad \psi_j(h) = 0, \quad j < 0. \quad (6^2)$$

При выводе системы (6¹) использовано справедливое для произвольной ортонормированной с весом системы полиномов соотношение

$$\mu p_j(\mu) = b_{j+1} p_{j+1}(\mu) + c_{j+1} p_j(\mu) + d_{j+1} p_{j-1}(\mu)$$

(b_j, c_j, d_j - числа, $d_{+1}, d_{-1} = 0$).

Исследование системы (4¹) и (6¹) позволяет убедиться в справедливости следующего утверждения:

Теорема 1. Решения задач (4) и (6) совпадают, и, следовательно, полиномиальный и интерполяционный методы вычисления функций $\psi(\mu, \tau)$ эквивалентны, если: 1) в качестве узлов интерполяции в выражении (3) и системе (4¹) взяты нули полиномов $p_n^{(+)}(\mu)$ и $p_n^{(-)}(\mu)$ из систем полиномов, ортогональных с весом $[\omega(\mu)]^2$ на интервалах (0, 1) и (-1, 0) соответственно; 2) приближенные функции $p^{(n,n)}(\mu, \mu')$ и $f^{(n)}(\mu, \tau)$ в обоих случаях одинаковы.

Введем функции источника точной задачи $I(\mu, \tau)$ и приближенной $I^{(n)}(\mu, \tau)$:

$$I(\mu, \tau) \equiv \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} [\omega(\mu')]^2 \gamma(\mu, \mu') F(\mu', \tau) d\mu' + g(\mu, \tau);$$

$$I^{(n)}(\mu, \tau) = \sum_{i=-n}^n L_i(\mu) I^{(n)}(\mu_i, \tau)$$

$$I^{(n)}(\mu_i, \tau) = \frac{1}{2} \sum_{k=-n}^n a_k \gamma^{(n,n)}(\mu_i, \mu_k) F^{(n)}(\mu_k, \tau) + g^n(\mu_i, \tau).$$

Изучение интегральных уравнений, соответствующих точной (2) и приближенной (4) задачам, дает возможность сформулировать следующую теорему о сходимости приближенной функции $I^{(n)}(\mu, \tau)$ и полученной с помощью интегрального уравнения приближенной задачи первой итерации решения $\tilde{\psi}^{(n)}(\mu, \tau)$ к соответствующим решениям точной задачи при увеличении порядка n приближения.

Теорема 2. Если функции $p(\mu, \mu')$ и $f(\mu, \tau)$ обладают ограниченными производными по μ и μ' , то определенными выше полиномиальными и интерполяционными методами могут быть найдены последовательности приближенных решений $I^{(n)}(\mu, \tau)$ и $\tilde{\psi}^{(n)}(\mu, \tau)$, сходящиеся равномерно к решениям точной задачи. Если при этом для аппроксимации функций $p(\mu, \mu')$ и $f(\mu, \tau)$ используются полиномы наилучшего приближения по μ и функция $p(\mu, \mu')$ обладает достаточно большим числом производных по μ' , то имеют место оценки

$$\left| I - I^{(n)} \right| \sim \frac{1}{n}, \quad \left| \psi - \tilde{\psi}^{(n)} \right| \sim \frac{1}{n}.$$

Если в качестве приближенных функций $r(\mu, \mu')$ и $f(\mu, \tau)$ взяты соответствующие отрезки рядов Фурье (5), справедливы аналогичные оценки для средних квадратичных отклонений:

$$\int_{-1}^{+1} [\omega(\mu)]^2 [I - I^{(n)}]^2 d\mu \sim \frac{1}{n^2}, \quad \int_{-1}^{+1} [\psi - \tilde{\psi}^{(n)}]^2 d\mu \sim \frac{1}{n^2}.$$

При вычислении приближенных решений (3) и (5) существенным моментом является определение корней характеристических уравнений соответствующих дифференциальных систем. Ряд сведений о корнях дает исследование матриц коэффициентов этих систем. В частности, справедливы следующие предложения.

Теорема 3. В тех случаях, когда функция $r(\mu, \mu')$ удовлетворяет неравенствам

$$1) \quad r(\mu, \mu') \geq 0: \quad \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} r(\mu, \mu') d\mu' \leq 1, \quad (7)$$

а для представления приближенной функции $r^{(n,n)}(\mu, \mu')$ берутся первые n^2 членов разложения точной функции $r(\mu, \mu')$ по какой-либо ортогональной с весом системе полиномов, корни характеристических уравнений приближенных задач действительны.

Условия (7) выполняются, например, для всех задач о распространении излучения в рассеивающих и поглощающих средах.

Теорема 4. При решении методом сферических гармоник или методом Мертенса задач об изотропном рассеянии по закону $P(\cos \chi) = 1 + \omega_1 \cos \chi$ корни $\lambda_p^{(n)}$ характеристического уравнения приближения порядка n ограничены по модулю снизу $|\lambda_p^{(n)}| > 1$ за исключением двойного нулевого корня. При $n \rightarrow \infty$ и фиксированном p $|\lambda_p^{(n)}| \rightarrow 1$.

В некоторых задачах оказывается удобным провести разложения функций $\psi(\mu, \tau)$, $r(\mu, \mu')$ и $f(\mu, \tau)$ по системам полиномов, ортогональных на различных частях интервала $(-1, +1)$. Для такого «многоинтервального» варианта справедливы аналогичные теоремы об эквивалентности интерполяционного и полиномиального методов, о сходимости, о действительности корней.

Предлагаемый метод может быть также применен при решении задач с учетом зависимости искомой функции от азимута и задач, связанных с более сложной геометрией, например, сферической.

Автор приносит глубокую благодарность проф. Е.С.Кузнецову за руководство работой.

Отделение прикладной математики
Математического института им. В.А.Стеклова
Академии наук СССР

Поступило
13 XI 1956 г.

Цитированная литература

1. *R.E.Marshak*, Phys. Rev., 71, 443 (1947).
2. *С.Чандрасекар*, Перенос лучистой энергии, ИЛ, 1953.
3. *Е.С.Кузнецов*, Изв. АН СССР, сер. геофиз., №4 (1951).
4. *H.Bethe*, Phys. Rev., 89, 1256 (1953).
5. *J.W.Spencer*, Phys. Rev., 90, 146 (1953).
6. *J.N.Cooper, J.Rainwater*, Phys. Rev., 97, 492 (1955)

АКАДЕМИЯ НАУК СОЮЗА ССР
ОТДЕЛЕНИЕ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА
имени В.А.СТЕКЛОВА

На правах рукописи

Т.А.Гермогенова

О РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА
ПРИ СИЛЬНО НЕИЗОТРОПНОМ
РАССЕЯНИИ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель –
Доктор физико-математических наук,
профессор Е.С.Кузнецов

Москва - 1957

Многочисленные научные и технические задачи физики элементарных частиц, геофизики и астрофизики связаны с изучением явлений, сопровождающих прохождение излучения через вещество, в частности, рассеяния моноэнергетического пучка частиц плоским слоем вещества конечной толщины h .

В тех случаях, когда можно пренебречь потерями энергии при столкновении, функция $\Psi(\Theta, \varphi, \tau)$, описывающая интенсивность излучения на глубине τ в направлении, задаваемом углами Θ с осью τ и φ - азимутальным углом – подчиняется уравнению переноса

$$\cos \Theta \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + \Psi(\Theta, \varphi, \tau) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi \sin \Theta' d\Theta' \Psi(\Theta', \varphi', \tau) P(\cos \chi)$$

с граничными условиями:

$$\Psi(\Theta, \varphi, 0) = \Phi_1(\Theta, \varphi) \quad 0 \leq \Theta \leq \frac{\pi}{2},$$

$$\Psi(\Theta, \varphi, h) = \Phi_2(\Theta, \varphi) \quad \frac{\pi}{2} \leq \Theta \leq \pi.$$

Угол χ есть угол между направлением распространения частицы до столкновения, определяемым Θ' и φ' и направлением после столкновения, определяемым Θ и φ . Глубина τ измеряется в длинах свободного пробега рассеяния. Функция $P(\cos \chi)$ - индикатриса рассеяния – вероятность рассеяния на угол χ в результате одного столкновения; функции $\Phi_1(\Theta, \varphi)$ и $\Phi_2(\Theta, \varphi)$ описывают излучение, падающее на границы слоя $\tau = 0$ и $\tau = h$.

С сильно неизотропным законом единичного рассеяния связаны задачи о распространении света в мутных средах, о рассеянии нейтронного излучения с энергией в несколько MeV в тяжелых веществах. Чрезвычайно сильной анизотропией отличается рассеяние заряженных частиц.

Существование и единственность решения задачи, а также возможность построения решения методом последовательных приближений доказаны Е.С.Кузнецовым(1) при весьма общих предположениях относительно функций $P(\cos \chi)$, $\Phi_1(\Theta, \varphi)$, $\Phi_2(\Theta, \varphi)$. Метод последовательных приближений в большинстве случаев оказывается связанным с медленно сходящимся процессом и слишком трудоемким.

Методы интерполяционного или полиномиального типа, широко применяемые при решении задач о рассеянии изотропном или близком к изотропному (метод Чандрасекара (2)) сферических гармоник (3), Мертенса (4), интерполяционный метод Кузнецова (5), практически непригодны при рассеянии сильно неизотропном. Решение задачи о многократном рассеянии заряженных частиц в «малоугловом приближении» (6), (7) позволяет получить с высокой степенью точности решение при малых углах. Однако в

ряде физических задач (исследовании влияния релятивистских поправок, разницы в рассеянии электронов и позитронов, поляризационных эффектов, влияния на рассеяние размеров ядра и характера ядерного потенциала и др.) интересным является рассмотрение рассеяния на большие углы.

В реферируемой работе (глава I) предлагается приспособленный для решения задачи о сильно неизотропном рассеянии метод интерполяционного или полиномиального типа, идея которого заключается в следующем: основываясь на предварительном, качественного характера, исследовании решения $\Psi(\Theta, \varphi, \tau)$ задачи, можно установить его форму, и, если функция $\Psi(\Theta, \varphi, \tau)$ окажется сильно меняющейся функцией углов Θ и φ выделить предполагаемые особенности решения в виде некоторого известного множителя, чтобы искомым функцией была функция достаточно гладкая, хорошо представляемая полиномом невысокой степени по Θ и φ с коэффициентами, зависящими от τ . При определении последних более тщательно должны исследоваться области, где можно ожидать наибольшего изменения новой неизвестной функции.

Основное внимание уделено задачам, в которых можно не учитывать зависимость решения от азимута. Именно, задачам о рассеянии излучения, падающего перпендикулярно к границе слоя. В этом случае функция $I(\mu, \tau)$ ($\mu = \cos \Theta$), описывающая рассеянное излучение

$$I(\mu, \tau) = \Psi(\Theta, \varphi, \tau) - c^{-\frac{\tau}{\mu}} b(\mu - 1)$$

подчиняется уравнению

$$\mu \frac{\partial I}{\partial \tau} + I(\mu, \tau) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} p(\mu, \mu') I(\mu', \tau) d\mu' + \frac{1}{2} p(\mu) e^{-\tau}$$

и граничным условиям

$$I(\mu, 0) = 0 \quad \mu > 0,$$

$$I(\mu, h) = 0 \quad \mu < 0.$$

$$\text{Здесь } p(\mu, \mu') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P(\cos \chi) d\varphi,$$

а углы $\Theta, \Theta', \varphi, \varphi', \chi$ связаны соотношением

$$\cos \chi = \cos \Theta \cos \Theta' + \sin \Theta \sin \Theta' \cos(\varphi - \varphi')$$

Оказывается удобным представить решение в форме:

$$I(\mu, \tau) = \varphi(\mu) f(\mu, \tau),$$

где функция $\varphi(\mu)$ описывает «пик» излучения, функция же $f(\mu, \tau)$ сравнительно медленно меняющаяся функция угла. Искать функцию $f(\mu, \tau)$ в форме полинома можно двумя путями, из которых один

(полиномиальный) связан с разложением решения по системе полиномов ортогональных с весом $\{\varphi(\mu)\}^2$ на интервале $(-1, +1)$ или на частях его. Другой путь - интерполяционный отвечает некоторому обобщению метода Чандрасекара.

В § 1 показана эквивалентность полиномиального и интерполяционного методов отыскания функции в том случае, когда в качестве узлов интерполяции взяты нули полинома из системы полиномов ортогональных с весом $\{\varphi(\mu)\}^2$ на интервале $(-1, +1)$ или соответствующих частях его и приближенное представление функции $p(\mu, \mu')$ и граничных условий в обоих методах одинаково.

§ 2 посвящен исследованию формы приближенного решения, полученного полиномиальным или эквивалентным ему интерполяционным методом. Показано, что при выполнении условий

$$1) P(\cos \chi) \geq 0;$$

$$2) \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} P(\cos \chi) \sin \Theta' d\Theta' \leq 1$$

естественных для всякой задачи о чистом рассеянии или о рассеянии с поглощением, в том случае, когда в качестве приближенной функции $P^{(n,n)}(\mu, \mu')$ взят отрезок ряда Фурье по полиномам $P_k(\mu)$ представляющий точную функцию $P(\mu, \mu')$ на интервале $(-1, +1)$ или частях его

$$P^{(n,n)}(\mu, \mu') = \varphi(\mu)\varphi(\mu') \sum_{i,j=1}^n P_{ij} P_i(\mu) P_j(\mu'),$$

коэффициенты полинома по μ , являющегося приближенным решением задачи, изображаются суммой экспонент типа $e^{\lambda_\alpha \tau}$, где величины λ_α ($\alpha = 1, 2, \dots, n$) действительны. В задаче о чистом рассеянии возможно появление нулевых корней и соответственно функций $\varphi_1 = const$ и $\varphi_2 = \tau$ вместо экспонент.

Основываясь на теории положительно-определенных матриц, удастся провести некоторое исследование величин λ_α , в частности, показать, что при увеличении порядка приближения отличные от 0 λ_α могут только уменьшаться по абсолютной величине, и получить оценки в некоторых случаях. Для решения Мертенса или Чандрасекара задачи об изотропном рассеянии или рассеянии по закону $1 + x \cos \Theta$ величины λ_α , отличные от 0, ограничены снизу по модулю $|\lambda_\alpha| > 1$ и при увеличении порядка приближения стремятся по модулю к 1.

При исследовании сходимости рассматриваемого метода (§3) строятся интегральные уравнения, соответствующие точной и приближенной задачам, и проводится сравнение ядер и свободных членов полученных уравнений для оценки отклонения приближенного решения от истинного. Показано, что при достаточно высоком порядке приближения n , разность между решениями точным и приближенным (полученным полиномиальным или эквивалентным ему интерполяционным методом) есть величина порядка $\frac{1}{n}$. Однако получение указанным путем оценки сверху оказывается слишком громоздким и оценка завышенной.

В § 4 приводятся некоторые соображения о выборе веса и узлов интерполяции при решении конкретных задач, обосновывается, в частности, выбор в качестве веса функции $P(\mu)$ в задаче о прохождении через плоский слой излучения падающего перпендикулярно к границе. Рассматриваются также некоторые обобщения метода (многоинтервальная задача, общая задача с граничными условиями, зависящими от азимута и др.).

Предлагаемым методом проведен расчет задачи о сильно неізотропном рассеянии нейтронного излучения с энергией 3.7 Mev при прохождении через свинцовую пластинку толщиной в 1 и 3 свободных пробега рассеяния. Сравнение нескольких вариантов расчета позволяет судить о точности приближений различного порядка. При использовании 6 узлов интерполяции ошибка оказывается меньше 1% в пике и несколько больше в хвосте кривой выходящего излучения.

В § 5 сделана попытка построить более простой технически метод вычисления, основанный на разложении индикатрисы рассеяния и решения по функциям Бесселя. Используются 2 обстоятельства: возможность с помощью небольшого числа функций Бесселя представить гораздо более вытянутые индикатрисы, нежели с помощью того же числа полиномов Лежандра выполнение теоремы сложения, совпадающей при малых углах с аналогичной теоремой для полиномов Лежандра. Последнее позволяет развить метод аналогичный методу сферических гармоник, исследовать характер решения, сходимость. Аппарат функций Бесселя позволяет получить хорошее приближение к решению в области малых углов при чрезвычайно сильной анизотропии рассеяния. Проведенные численные расчеты показывают, однако, что в случае умеренно вытянутых индикатрис типа геофизических и нейтронных метод менее точен, нежели более сложный интерполяционный метод.

Исследованию методов малоуглового приближения посвящена глава II. Для математически строго сформулированной задачи о малоугловом приближении (§6) показано, что равномерно сходящийся ряд типа ряда Гаудсмита – Саундерсона (8) является единственным решением задачи. Приведен обзор различных приближенных методов вычисления этого решения и сравнение 2-х наиболее употребительных вариантов: Мольера (6)

и Спенсера (7). Для наиболее точного метода – метода Спенсера – удастся обосновать общий прием расчета, связанный с вычислением суммы медленно сходящегося ряда, для довольно широкого класса функций рассеяния, представимых выражениями типа

$$P(\cos \chi) = \sum_{i=1}^N \frac{A_i}{(1 + x_i - \cos \chi)k_i}$$

метод позволяет получить решение задачи в малоугловом приближении со сколь угодно малой погрешностью. Показано также, как методами малоуглового приближения можно получить приближенное решение задачи о рассеянии излучения, падающего наклонно к поверхности слоя.

Оценка точности малоуглового приближения в общей форме оказывается вопросом весьма сложным. В случае малых h ($h < 1$) удастся получить такую оценку, пользуясь общей теорией интегральных уравнений. При больших h оценка оказывается слишком завышенной.

В § 7 приводятся расчеты, по уточнению малоуглового приближения при больших h для сравнительно простого закона рассеяния

$$P(\cos \chi) = \frac{A}{(1 + x_0 - \cos \chi)^2}, \quad x_0 \ll 1.$$

Полученные результаты позволяют утверждать, что малоугловое приближение справедливо в области углов

$$\Theta^2 \ll x_0 \cdot h \ll 1.$$

Затруднения исследователей (7), (9) при объяснении различия между теоретическими кривыми, полученными в малоугловом приближении, и экспериментальными связаны в первую очередь с неправильностью расчета рассеяния на большие углы в малоугловом приближении. Проведенное исследование указывает на нецелесообразность прямого использования малоуглового приближения при уточнении решения задачи. В работе предлагается 2 метода расчета сильно анизотропного рассеяния на большие углы, один из которых интерполяционный, типа, рассматриваемого в главе I, другой, представляющий некоторое видоизменение метода последовательных приближений, основан на предварительном преобразовании интеграла, входящего в уравнение переноса, законном при сильной анизотропии однократного рассеяния.

Проведение предлагаемых расчетов с использованием современных вычислительных машин приобретает особую важность в связи с возможностью выяснения таким путем протяженности поля и характера потенциала ядра, определяющих рассеяние на большие углы (9).

В работе приведены результаты расчетов в малоугловом приближении решения задачи о рассеянии с менее вытянутой индикатрисой типа геофизических или нейтронных. Полученное приближение оказывается ближе к точному решению, нежели 1-ая итерация, и может использоваться в связи со сравнительной легкостью вычисления как хорошее приближение к

решению при углах малых. Более подробное изложение результатов работы приводится в статье автора (10).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Е.С.Кузнецов. Теория негоризонтальной видимости. Изв. АН СССР сер. геофизическая, № 5, 1943.
2. С.Чандрасекар. Перенос лучистой энергии. Москва, 1953.
3. R.E.Marshak. Note on the spherical harmonic method. Phys. Rev. 71, 443 (1947).
4. R.Mertens. Sur la diffusion multiple de Particules chargees. C. r. Acad. Sci. 236 1753 (1953).
5. Е.С.Кузнецов. Общий метод построения приближенных уравнений переноса лучистой энергии. Изв. АН СССР, сер. геофизич. №4, 1951.
6. G.Moliere. Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen. Z. Naturforsch (1948).
7. L.V.Spencer. Calculation of peaked Angular Distribution Phys. Rev. 90 146 (1953).
8. S.Goudsmith and J.Saunderson. Multiple Scattering of Electrons I. Phys. Rev. 57 24 (1940).
9. L.Cooper and G.Rainwater. Theory of Multiple Coulomb Scattering from Extended Nuclei. Phys. Rev. 97 492 (1955).
10. Т.А.Гермогенова. О решении уравнения переноса при сильно неизотропном рассеянии. ДАН, 113, №2 (1957).

К уточнению приближения для малых углов в задачах о многократном рассеянии

Журнал экспериментальной и теоретической физики АН СССР, том 33,
вып. 4 (10), 1957 г., с. 1067-1069.

Анализ рассеяния пучков заряженных частиц металлическими фольгами требует решения задачи о пространственном и угловом распределении плотности, возникающем в пучке в результате большого числа столкновений. Плотность частиц в моноэнергетическом ($E > 10 \text{ MeV}$) пучке $\psi(\mu, \tau)$ на глубине τ , направление распространения которых задается углом θ - с осью τ , $\mu = \cos \theta$, определяется из краевой задачи

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \psi(\mu, \tau) - \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi(\mu', \tau) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} P(\cos \chi) = 0, \quad (1.1)$$

$$\cos \chi = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi;$$

$$\psi(\mu, 0) = \delta(\mu - 1), \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad (1.2)$$

$$\psi(\mu, h) = 0, \quad -1 \leq \mu \leq 0.$$

Закон однократного рассеяния $P(\cos \chi)$ предполагается известным. Обычно задача решается в приближении малых углов, т.е. при упрощениях:

- 1) множитель μ перед производной в (1.1) полагается равным 1;
- 2) условия (1.2) заменяются начальным: $\psi(\mu, 0) = \delta(\mu - 1)$ при $-1 \leq \mu \leq 1$.

Предложенный Спенсером [1] численный метод позволяет найти решение в этом приближении со сколь угодно высокой точностью для широкого класса задач, допускающих представление функции $P(\cos \chi)$ суммой [2],

$$P(\cos \chi) = \sum_{i=1}^N A_i (1 + x_i - \cos \chi)^{-k_i}, \quad x_i \ll 1, \quad k_i = 1, 2, \dots \quad (2)$$

В работах [3, 4] отмечается, что наряду с хорошим совпадением решения в приближении малых углов с результатами экспериментов в области малых углов, имеется значительное расхождение при больших углах (свыше 15% при углах $\theta > 6^\circ$ при $E = 15.7 \text{ MeV}$), которое авторы не могут объяснить в рамках данного приближения. Исследование рассеяния при больших углах весьма важно в связи с изучением распределения заряда в ядре, характера ядерного потенциала [3], явлений, связанных с поляризацией, разницей в рассеянии положительно и отрицательно заряженных частиц и т.п.

Для уточнения приближения малых углов и выяснения области применимости был проведен ряд расчетов [2].

1. В задаче о рассеянии электронов с энергией 15.7 MeV найдены поправки к приближению малых углов, рассчитанному Спенсером [1].

В этой задаче

$$P(\cos \chi) = x_0(1 + x_0 - \cos \chi)^{-2}, \quad x_0 = 1.56 \cdot 10^{-6}, \quad h = 118.4.$$

Это приближение близко к функции Гаусса при малых углах $\theta^2 \leq x_0 h$, и стремится к функции $4x_0 h / \theta^4$ при больших углах.

Представим $\psi(\mu, \tau)$ суммой $\psi_0 + \psi_1 + \psi_2$, где ψ_0 - решение задачи в приближении малых углов; ψ_1 - поправка в том же приближении, т.е. решение уравнения

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial \tau} + \psi_1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu' \psi_1(\mu', \tau) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} P(\cos \chi) = (1 - \mu) \frac{\partial \psi_0}{\partial \tau} \quad (3)$$

при начальном условии $\psi_1(\mu, 0) = 0$ ($-1 \leq \mu \leq 1$), а поправка ψ_2 - решение неоднородного уравнения, соответствующего (1.1) с правой частью $(1 - \mu) \partial \psi_1 / \partial \tau$. Краевые условия для $\psi_2(\mu, \tau)$:

$$\psi_2(\mu, 0) = 0, \quad 0 \leq \mu \leq 1; \quad \psi_2(\mu, h) = -\psi_0(\mu, h) - \psi_1(\mu, h), \quad -1 \leq \mu \leq 0.$$

Решение задачи (3) в области малых углов хорошо представляется функцией Гаусса (по θ), умноженной на некоторый полином по θ^2 ; асимптотика в области больших углов дается выражением $2x_0 h / \theta^2$. Отсутствие сильной анизотропии в неоднородностях задачи для $\psi_2(\mu, \tau)$ позволяет искать решение на каждом из интервалов $(0, 1)$ и $(-1, 0)$ в форме разложения по полиномам Лежандра $P_n(\mu)$, $n \leq 3$. В таблице приведены значения $\psi_1(\mu, h)$, $\mu \geq 0$, полученные численным интегрированием по методу Спенсера, и результаты расчета $\psi_2(\mu, h)$, $\mu \geq 0$.

Таблица

$\cos \theta$	1	0.999	0.99	0.95	0.90
$\psi_1(\mu, h)$	0.1478	0.2349	0.02623	0.004384	0.001985
$2x_0 h / \theta^2$		0.1940	0.01834	0.003668	0.001814
$\psi_2(\mu, h)$	0.2804	0.2788	0.2651	0.2071	0.1413

2. При произвольном законе рассеяния, степень анизотропии которого определяется малостью параметра

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} (1 - \mu) P(\mu) d\mu,$$

т.е. малостью среднего квадрата угла при однократном рассеянии, были установлены некоторые общие результаты. Приближение малых углов представляется суммой

$$\delta(\mu - 1)e^{-\tau/\mu} + I_0(\mu, \tau),$$

где $I_0(\mu, \tau)$ близко к функции Гаусса $\exp(-\theta^2 / \bar{\theta}^2)$, $\bar{\theta}^2 \approx \varepsilon h$, при малых углах ($\theta^2 \leq \varepsilon h$). Если $P(\cos \chi)$ взято в форме (2), асимптотика при больших углах дается выражением

$$2^\eta A_\eta h \theta^{-2\eta}, \quad \eta = \min k_i.$$

Свободный член уравнения (3) есть величина порядка ε . Функция $\psi_1 = O(\varepsilon h \psi_0)$ при малых углах ($\theta^2 \leq \varepsilon h$). $\psi_1 = O(\theta^2 \psi_0 / 2)$ при больших углах. Таким образом, поправка ψ_1 при $\varepsilon h \ll 1$, как и следовало ожидать, мала в области $\theta^2 / 2 \ll 1$. С другой стороны, сравнительно большая величина поправки $\psi_2(\mu, \tau)$ в рассмотренном примере ограничивает область применения приближения малых углов неравенством $\psi_0 \gg \psi_2$, т.е. $\theta^4 \ll \varepsilon h$. Поскольку в этой задаче $\varepsilon = x_0 \ln x_0$, следует ожидать, что здесь приближение хорошо в области $\theta \leq 1/10$ и применимо при $\varepsilon h \ll 1$. Для получения решения с достаточной степенью точности при больших углах предполагается использовать интерполяционный метод, развитый в [2, 5].

Математический институт
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
18 июля 1957 г.

Литература

1. *L.V.Spencer*. Phys., Rev., 90, 146, 1953.
2. *Т.А.Гермогенова*. Диссертация, Отд. прикл. мат. при МИАН СССР, 1957 г.
3. *L.V.Cooper, G.Rainwater*. Phys., Rev., 97, 492, 1955.
4. *L.V.Spencer, J. Blanchard*. Phys., Rev., 93, 114, 1954.
5. *Т.А.Гермогенова*. ДАН СССР, 113, 2, 1957.

Решение уравнения переноса методом средних потоков (Совместно с Т.А. Сушкевич)

Сб. "Вопросы физики защиты реакторов",
Атомиздат, вып. 3, с. 34–46, 1969

Введение

Характерное для последнего времени обращение ко все более сложным задачам теории переноса, связанным с проблемами оптимизации, анализом многомерных задач и т. п., требует развития высокоэффективных методов численного решения уравнения переноса. Одним из наиболее результативных приемов, лежащих в основе таких методов, является делинеаризация задачи – переход от линейного уравнения переноса к такой эквивалентной нелинейной задаче, решение которой оказывается гораздо проще. К методам этого типа относятся $S - T$ -метод [1], связанный с расчетом коэффициентов отражения и пропускания и успешно используемый при решении задач с одномерной геометрией, а также квазидиффузионный метод [2]. В основе последнего лежат итерационное определение углового профиля решения путем интегрирования уравнения переноса и расчет интегральных величин (плотности и потока), необходимый для ускорения сходимости итерационного процесса. Итерационный характер делает квазидиффузионный метод особенно удобным в задачах, связанных с повторным решением уравнения переноса в близких условиях: нелинейных, оптимизационных и др.

В настоящей работе излагаются некоторые результаты исследования эффективности метода средних потоков (СП-метод). Этот метод более удобен при обобщении его на задачи с неизотропными индикатрисами и многомерными геометриями.

Первый раздел посвящен описанию метода в применении в основном к геометрически одномерным задачам (плоским и сферическим). Используя некоторые вариационные принципы, удается дать обоснование СП-метода, по крайней мере для задач, приводимых к самосопряженной форме. Обсуждается также способ решения двумерной задачи СП-методом.

В простейшей форме в одномерных задачах с изотропным рассеянием метод средних потоков применялся Ш. С. Николайшвили в работе [3].

Второй раздел содержит анализ большого расчетного материала, полученного при решении уравнения переноса в различных задачах как СП-методом, так и другими приемами.

СП-Метод

Для наглядности изложим основные идеи метода на примере односкоростной задачи с плоской геометрией. Пусть на плоский слой конечной оптической толщины h падает моноэнергетический поток

излучения. Если θ – угол между рассматриваемым направлением и направлением внутренней нормали, а $\mu = \cos \theta$, то интенсивность рассеянного излучения $\Phi(x, \mu)$ в точке x в направлении θ для азимутально-симметричных задач определяется уравнением

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \Phi(x, \mu) = \int_{-1}^{+1} \Phi(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu' + f(x, \mu), \quad (1)$$

где

$$x \in [0, h]; \quad \mu \in [-1, 1],$$

или

$$L\Phi = S\Phi + f(x, \mu), \quad (1a)$$

где

$$f(x, \mu) = \frac{F}{2\pi} e^{-\mu_0 x} \gamma(x, \mu, \mu_0);$$

F – интенсивность излучения; μ_0 – угол наклона падающего излучения; $\gamma(x, \mu, \mu')$ – индикатриса рассеяния.

Краевые условия задачи:

$$\Phi(x, \mu) \Big|_{x=0, \mu>0} = 0; \quad \Phi(x, \mu) \Big|_{x=h, \mu<0} = 0. \quad (2)$$

Задачу (1), (2) назовем основной, в отличие от вспомогательной задачи, возникающей в связи с использованием приемов ускорения сходимости.

Для решения основной задачи используем итерационный метод с интегрированием источника, а именно: если $\Phi^{(s)}(x, \mu)$ – некоторое приближение к решению $\Phi(x, \mu)$, то следующее $(S+1)$ – приближение определяем из уравнения

$$L\Phi^{(s+1)} = S\tilde{\Phi}^{(s)} + f(x, \mu) \quad (3)$$

С краевыми условиями:

$$\Phi^{(s+1)}(x, \mu) \Big|_{x=0, \mu>0} = 0; \quad \Phi^{(s+1)}(x, \mu) \Big|_{x=h, \mu<0} = 0,$$

где $\tilde{\Phi}^{(s)}(x, \mu)$ выражается через $\Phi^{(s)}(x, \mu)$ в зависимости от приема ускорения сходимости. Случай $\tilde{\Phi}^{(s)} \equiv \Phi^{(s)}$ называем простым итерационным процессом.

В основе СП-метода лежит перенормировка углового профиля решения на S -итерации по правилу:

$$\tilde{\Phi}^{(s)}(x, \mu) = \begin{cases} \bar{n}^{(s)}(x) \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu); \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu) \equiv \Phi^{(s)}(x, \mu) \text{ для } \mu > 0; \\ \bar{n}^{(s)}(x) \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu); \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu) \equiv \Phi^{(s)}(x, \mu) \text{ для } \mu < 0, \end{cases} \quad (4)$$

где $\Phi^{(s)}(x, \mu)$ – результат интегрирования уравнения (3), $n^{+(s)}$ и $n^{-(s)}$ – аналоги средних потоков в положительном и отрицательном направлениях и являются решениями следующей вспомогательной задачи.

Проинтегрируем уравнение (1), в котором $\Phi(x, \mu)$ везде заменим на $\tilde{\Phi}^{(s)}(x, \mu)$, по μ отдельно от -1 до 0 и от 0 до 1 с некоторой весовой функцией $V(x, \mu)$. В результате получим систему двух обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \mu^{+(s)}(x) \frac{dn^{+(s)}}{dx} + a^{+(s)}(x)n^{+(s)}(x) + b^{+(s)}(x)n^{-(s)}(x) &= f^{+}(x); \\ \mu^{-(s)}(x) \frac{dn^{-(s)}}{dx} + a^{-(s)}(x)n^{+(s)}(x) + b^{-(s)}(x)n^{-(s)}(x) &= f^{-}(x). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Здесь $\mu^{+(s)}(x)$ и $\mu^{-(s)}(x)$ - «средние косинусы»:

$$\left. \begin{aligned} \mu^{+(s)}(x) &= \int_0^1 \mu V(x, \mu) \Phi^{+(s)}(x, \mu) d\mu, \\ \mu^{-(s)}(x) &= \int_{-1}^0 \mu V(x, \mu) \Phi^{-(s)}(x, \mu) d\mu, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

а коэффициенты и правые части уравнений (5), - интегральные величины по μ :

$$\begin{aligned} a^{+(s)}(x) &= \int_0^1 V(x, \mu) \Phi^{+(s)}(x, \mu) d\mu + \int_0^1 \mu V(x, \mu) \frac{d\Phi^{+(s)}}{dx} d\mu - \\ &- \int_0^1 V(x, \mu) d\mu \int_0^1 \Phi^{+(s)}(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'; \\ b^{+(s)}(x) &= - \int_0^1 V(x, \mu) d\mu \int_{-1}^0 \Phi^{-(s)}(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'; \\ a^{-(s)}(x) &= - \int_{-1}^0 V(x, \mu) d\mu \int_0^1 \Phi^{+(s)}(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \bar{b}^{(s)}(x) &= \int_{-1}^0 V(x, \mu) \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu) d\mu + \int_{-1}^0 \mu V(x, \mu) \frac{d\bar{\Phi}^{(s)}}{dx} d\mu - \\ &- \int_{-1}^0 V(x, \mu) d\mu \int_{-1}^0 \bar{\Phi}^{(s)}(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'; \\ f^+(x) &= \int_0^1 V(x, \mu) f^+(x, \mu) d\mu; \quad f^-(x) = \int_{-1}^0 V(x, \mu) f^-(x, \mu) d\mu. \end{aligned} \quad (7)$$

В силу условий (2), находим

$$n^{(s)+}(x) \Big|_{x=0} = 0, \quad n^{(s)-}(x) \Big|_{x=h} = 0. \quad (8)$$

Определение $n^{(s)+}(x)$ и $n^{(s)-}(x)$ как решения системы (5) с коэффициентами (6), (7) и краевыми условиями (8) и вычисление $\tilde{\Phi}^{(s)}(x, \mu)$ по формулам (4) называем вспомогательной («ускоряющей») задачей. Одна полная итерация СП-метода состоит из решения двух задач: 1) интегрирование уравнения (3), вычисление «средних косинусов» (6) и коэффициентов уравнения по формулам (6), (7) и 2) решение вспомогательной задачи. Таким образом, решение линейного уравнения переноса сводится к нелинейному итерационному процессу.

Как известно [4], для симметричных по μ индикатрис и свободных членов уравнение переноса (1) при граничных условиях (2) с помощью замены

$$\left. \begin{aligned} 2u(x, \mu) &= \Phi(x, \mu) + \Phi(x, -\mu) \\ -2\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= \Phi(x, \mu) - \Phi(x, -\mu) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

приводится к самосопряженной форме

$$L_0 u - S u = f(x, \mu), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} L_0 u &= -\mu^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(x, \mu); \\ S u &= 2 \int_0^1 u(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'; \end{aligned}$$

$$x \in [0, h]; \quad \mu \in [-1, 1].$$

При этом $u(x, \mu)$ удовлетворяет однородным граничным условиям

$$u + \mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=h} = u - \mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (11)$$

Построение итерационного процесса для решения задачи (10), (11) СП-методом проводится аналогично описанному выше. Приближение $u^{(s+1)}(x, \mu)$ определяем интегрированием уравнения

$$L_0 u^{(s+1)} = S \tilde{u}^{(s)} + f$$

при краевых условиях (11). Согласно уравнению (9), $u(x, \mu)$ - симметричная функция μ , поэтому достаточно положить

$$\tilde{u}^{(s)}(x, \mu) = n^{(s)}(x) u^{(s)}(x, \mu),$$

где $n^{(s)}(x)$ - поток, усредненный по профилю $u^{(s)}(x, \mu)$, находится из обыкновенного дифференциального уравнения

$$\int_0^1 \left[-\mu^2 \frac{\partial^2 (n^{(s)} u^{(s)})}{\partial x^2} + (n^{(s)} u^{(s)}) \right] V d\mu = 2 \int_0^1 V d\mu \int_0^1 (n^{(s)} u^{(s)}) \gamma d\mu' + \int_0^1 V f d\mu \quad (12)$$

при граничных условиях

$$\frac{dn^{(s)}}{dx} \Big|_{x=h} = \frac{dn^{(s)}}{dx} \Big|_{x=0} = 0, \quad (13)$$

которые можно получить интегрированием выражения (11) по μ от 0 до 1 с весом V , учитывая, что $u^{(s)}(x, \mu)$ также удовлетворяет условиям (11).

Проведенные нами многочисленные методические расчеты решения уравнения переноса СП-методом для случаев плоской (с изотропными и анизотропными индикатрисами) и сферической (с изотропным рассеянием) одномерной геометрии показали, что объем вычислительной работы сокращается в десятки раз по сравнению с расчетами простым итерационным методом. Понимание механизма этого явления необходимо не столько для математического обоснования метода, сколько для обобщения его на более сложные задачи, например двумерные, энергетические. Правильный выбор, уравнений и граничных условий в этих задачах связан не только с заданием весовой функции V , но и с определением самой структуры приближенной задачи.

В общем случае основой качественного понимания эффекта, по-видимому, являются соображения, о незначительной роли ошибок в угловом профиле при вычислении функционалов, описывающих коэффициенты системы уравнений вспомогательной задачи для средних потоков.

Более четкие результаты удается получить для задач, допускающих приведение к самосопряженной форме, т. е. с симметричными по μ индикатрисами и свободными членами и однородными краевыми условиями. В этом случае, как показано в работе [4] решение задачи (10), (11) сообщает минимум квадратичному функционалу

$$G[u] = (L_0 u, u) - (Su, u) - 2(u, f)$$

в пространстве H симметричных по μ функций $u(x, \mu)$ со скалярным произведением

$$(u, v) = \int_0^h dx \int_{-1}^{+1} u(x, \mu) v(x, \mu) d\mu = 2 \int_0^h dx \int_0^1 uv d\mu.$$

Эти функции удовлетворяют условиям абсолютной непрерывности вдоль характеристик уравнения (10), с условиям интегрируемости весьма общего характера и граничным условиям (11).

Всякая последовательность, минимизирующая функционал $G[u]$, сходится по среднеквадратичной норме с некоторым весом к решению уравнения (10). Выберем в качестве допустимых функций

$$u(x, \mu) = n(x)\psi(x, \mu),$$

где $\psi(x, \mu)$ - некоторая фиксированная функция из пространства H . Чтобы найти функцию $n(x)$, сообщающую минимум функционалу $G[u]$, построим уравнения Эйлера для функционала $G[n\psi]$, считая ψ - заданной функцией.

Воспользовавшись результатами работы [4], положим

$$\tilde{G}\left(n, \frac{dn}{dx}\right) = \int_0^1 \left\{ (n\psi)^2 + \mu^2 \left[\frac{\partial(n\psi)}{\partial x} \right]^2 - (n\psi) \int_0^1 (n\psi) \gamma(x, \mu, \mu') d\mu' - 2(n\psi) f \right\} d\mu;$$

$$M[n(h)] = \int_0^1 \mu (n\psi)^2 d\mu \Big|_{x=h};$$

$$M[n(0)] = \int_0^1 \mu (n\psi)^2 d\mu \Big|_{x=0};$$

Уравнения Эйлера для нашей задачи с естественными краевыми условиями (см. [5]) запишутся так:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dx} \tilde{G}'_{\frac{dn}{dx}} - \tilde{G}'_n &= 0 \\ \tilde{G}'_{\frac{dn}{dx}} + M'_n \Big|_{x=h} &= 0 \\ \frac{d}{dx} \tilde{G}'_{\frac{dn}{dx}} - N'_n \Big|_{x=0} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Подставив в (14) соответствующие выражения, приходим к уравнению, совпадающему с уравнением СП-метода (12), если положить $V = \psi$. Краевые условия (14) также совпадают с условиями (13) СП-метода.

Таким образом, становится понятным механизм ускорения сходимости СП-методом: на каждой итерации выбираем наилучшее, в смысле среднеквадратичной нормы, приближение к решению. Применение СП-метода к сферически симметричной задаче аналогично плоскому случаю, но имеет одну особенность: требуется знание $\Phi^{(s)}(r, \mu)$ при $\mu = 0$. Последнее легко выполнимо при интегрировании уравнения переноса по характеристикам.

Итерационный процесс типа СП-метода нетрудно построить и при отыскании решения в более общих задачах – в общей энергетической задаче, в двумерных цилиндрических и сферических задачах. В этом случае необходимо ввести четыре интегральные величины, например для цилиндра с осевой симметрией ($\mu = \cos \theta$, $\eta = \cos \varphi$):

$$\tilde{\Phi}^{(s)}(r, z, \mu, \eta) = \begin{cases} ++ \\ n(r, z) \Phi^{(s)}(r, z, \mu, \eta) (0 < \mu < 1, 0 < \eta < 1); \\ +- \\ n(r, z) \Phi^{(s)}(r, z, \mu, \eta) (0 < \mu < 1, -1 < \eta < 0); \\ -+ \\ n(r, z) \Phi^{(s)}(r, z, \mu, \eta) (-1 < \mu < 0, 0 < \eta < 1); \\ -- \\ n(r, z) \Phi^{(s)}(r, z, \mu, \eta) (-1 < \mu < 0, -1 < \eta < 0), \end{cases}$$

где функции $n^{++}, n^{+-}, n^{-+}, n^{--}$ являются решением вспомогательной задачи, включающей систему четырех дифференциальных уравнений, получающихся двойным интегрированием уравнения переноса по μ и η :

$$\begin{aligned} 0 \leq \mu \leq 1, & \quad 0 \leq \eta \leq 1; \\ 0 \leq \mu \leq 1, & \quad -1 \leq \eta \leq 0; \\ -1 \leq \mu \leq 1, & \quad 0 \leq \eta \leq 1; \\ -1 \leq \mu \leq 1, & \quad -1 \leq \eta \leq 0; \end{aligned}$$

Анализ численных результатов и сравнение с другими методами

Для многомерных, энергетических и некоторых других задач решение вспомогательной задачи само по себе представляет значительные трудности. Расчеты свидетельствуют о целесообразности усложнения задачи путем использования нелинейных приемов ускорения.

Для задачи (1), (2) с изотропной [$\gamma(\mu, \mu') = \omega_0$] и рэлеевской [$\gamma(\mu, \mu') = \omega_0 + \omega_2 P_2(\mu) P_2(\mu')$] индикатрисами проведено методическое исследование нескольких приемов ускорения, а именно: двух линейных – релаксационного ускорения и ускорения по выбранным направлениям и двух нелинейных – квазидиффузионного ускорения и СП-метода с весовой

функцией $V(x, \mu) \equiv 1$. Решение основной задачи проводилось методом интегрирования по характеристикам.

Остановимся кратко на линейных приемах ускорения.

Релаксационное ускорение. Пусть

$$y = Ay + f \quad (15)$$

неоднородное уравнение с линейным оператором A . [Уравнение (1a) приводится к виду (15) при интегрировании по характеристике.] Если $\tilde{y}^{(s)}$ – некоторое приближение к решению уравнения (15), то положим $y^{(s+1)} = A\tilde{y}^{(s)} + f$. Определение очередного приближения $\tilde{y}^{(s+1)}$ по формуле $\tilde{y}^{(s+1)} = \beta\tilde{y}^{(s)} + \alpha y^{(s+1)}$, где α и β – некоторые параметры, называем релаксационным ускорением. Очевидно, что такой итерационный процесс является линейным.

Простейший случай релаксации, когда $\beta = 1 - \alpha$. Нетрудно показать, что устойчивая сходимость таких итераций будет обеспечена при $\alpha \in (0, a_{\max})$;

$a_{\max} \approx \frac{2}{1 + \delta}$; $\delta = 1 - \lambda_{\max}$, где $0 < \lambda_{\max} < 1$ – максимальное собственное число основной задачи. Область $(1, a_{\max})$ дает релаксацию с экстраполяцией. При этом число итераций

$$S \sim \frac{|\ln \varepsilon|}{\alpha \delta}.$$

Следовательно, можно получить ускорение лишь в α раз, в лучшем случае $a_{\max} \approx 2$, обычно $a_{\max} < 2$.

Ускорение по выбранным направлениям. После интегрирования уравнения (3) по всей сетке $x_k \times \mu_j$ по найденному

$\Phi^{(s)}(x, \mu)$ считаются итерации на редкой сетке по углам, в частности для

двух выбранных направлений $\mu^+ > 0$ и $\mu^- < 0$, а затем полагается

$$\tilde{\Phi}^{(s)}(x, \mu) = \begin{cases} \frac{\Phi^{(s)}(x)}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \Phi^{(s)}(x, \mu) & (\mu > 0) \\ \frac{\Phi^{(s)}(x)}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \Phi^{(s)}(x, \mu) & (\mu < 0), \end{cases}$$

где $\Phi^{(s)}(x)$ и $\Phi^{(s)}(x)$ – результат итераций по редкой сетке (решения вспомогательной задачи). Наилучшей сходимости такого итерационного процесса, вероятно, можно достичь посредством оптимального выбора μ^+, μ^-

, который определяется требованиями линейной интерполяции между этими лучами:

$$\int_0^1 \frac{\Phi^{(s)}(x, \mu')}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \gamma(x, \mu, \mu')^+ d\mu' + \int_{-1}^0 \frac{\Phi^{(s)}(x, \mu')}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \gamma(x, \mu, \mu')^+ d\mu' \leq 1;$$

$$\int_0^1 \frac{\Phi^{(s)}(x, \mu')}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \gamma(x, \mu, \mu')^- d\mu' + \int_{-1}^0 \frac{\Phi^{(s)}(x, \mu')}{\Phi^{(s)}(x, \mu)} \gamma(x, \mu, \mu')^- d\mu' \leq 1.$$

Очевидно, что μ^+ и μ^- , должны совпадать с направлениями максимальных значений $\Phi(x, \mu)$ для положительных и отрицательных μ .

Для сравнения приведем данные о количестве итераций, полученных при различных приемах ускорения сходимости (табл. 1).

Можно отметить следующие характерные особенности линейных методов (простых итераций, релаксационного ускорения и ускорения по редкой сетке).

1. Различная скорость сходимости итерационного процесса для физически разных вариантов. Медленно сходятся задачи с большими толщинами и чистым рассеянием (вариант I, II, III). Гораздо быстрее сходятся варианты с малыми h и с поглощением (сравните варианты I и IV, I и II). По сравнению с простыми итерациями метод редких сеток дает ускорение в 3–5 раз, а иногда и больше.

2. Даже при значительной относительной точности

$$\varepsilon_n = \max_{x \in [0, h]} \frac{|n^{(s+1)}(x) - n^{(s)}(x)|}{n^{(s+1)}(x)}$$

или

$$\varepsilon_\Phi = \max_{\substack{x \in [0, h] \\ \mu \in [-1, 1]}} \frac{|\Phi^{(s+1)}(x, \mu) - \Phi^{(s)}(x, \mu)|}{\Phi^{(s+1)}(x, \mu)}$$

отклонение полученного приближенного решения от точного решения задачи существенное. Например, результат, полученный с $\varepsilon_n, \varepsilon_\Phi \approx 10^{-5}$, может отличаться от решения с $\varepsilon_n, \varepsilon_\Phi \approx 10^{-3}$ почти везде во второй цифре, а в некоторых точках и в первой цифре.

Эти особенности, по существу, являются и недостатками указанных методов. Свободными от них оказываются нелинейные приемы. Для изотропных и рэлеевских индикатрис квазидиффузия и СП-метод зарекомендовали себя одинаково хорошо: скорость сходимости итерационного процесса у них одного порядка и не зависит от физических параметров задачи (сравните варианты I, II, III, IV). Как правило, профиль решения устанавливается уже за 2–3 итерации. На рис. 1 и 2 приведена картина

изменения профиля потока $n^{(s)}(x) = n^{+(s)}(x) + n^{-(s)}(x)$ (результаты ускорения на S-итерации обозначены на рисунке 1-у, 2-у и т. д.;

$n^{(s)}(x) = \int_{-1}^{+1} \Phi^{(s)}(x, \mu') d\mu'$ обозначается – 1-х, 2-х и т. д.) и углового

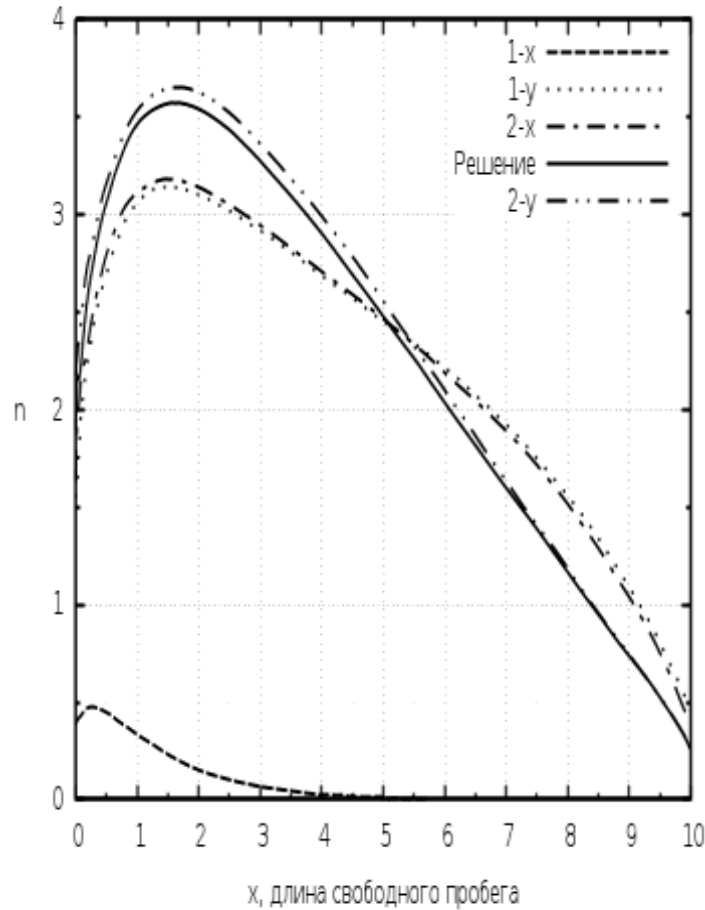


Рис.1. Изменение профилей $n^{(s)}(x)$ и $n^{(s)}(x)$ по итерациям для варианта I с изотропным рассеянием.

Таблица 1

Количество итераций при различных приемах ускорения сходимости

Но- мер вари- анта	Толщина слоя h , длина свобод- ного пробега	Индикат- риса рассеяния	ε	Простые итерации		Релаксационное ускорение			Ускорение по выбранным направлениям		Квазидиффу- зионное ускорение		СП-метод	
				колич- ество итера- ций	t, мин	α_{rel}	количе- ство итера- ций	t, ми- н	количе- ство итера- ций	t, ми- н	количе- ство итера- ций	t, мин	количе- ство итера- ций	t, ми- н
I	10	$\omega_0=1$	10^{-5}	≈ 400	≈ 90	1,5	≈ 280	–	33	–	8	–	8	–
II	10	$\omega_0=0.9$	10^{-3}	56	–	1,25 1,5 1,85	47 36 29	– – –	13	–	5	–	5	–
III	1-й слой $h_1=5$ 2-й слой $h_2=5$	$\omega_0=1$ $\omega_0=1$ $\omega_1=0$ $\omega_2=0,1$	10^{-5}	≈ 400	≈ 90	1,5	≈ 300	≈ 60	35	17	10	2	9	2
IV	1	$\omega_0=1$	10^{-5}	20	–	1,1 1,5 1,75	17 14 27	– – –	10	–	8	–	7	–

распределения пропущенного $\Phi(h, \mu)$ и отраженного $\Phi(0, \mu)$ излучения для варианта I по СП-методу. Существенные изменения профиля $n(x)$ и

значений интеграла $\int_{-1}^{+1} \Phi^{(s)}(x, \mu') \gamma(x, \mu, \mu') d\mu'$ вызывает вспомогательная

задача, а интегрирование основной задачи только подправляет их. За 8–10 итераций получаем 5–6 установившихся знаков.

Такой характер установления решения позволяет плодотворно использовать нелинейные методы как для приближенной оценки решения (просчитав 2–3 итерации), так и для получения решения с повышенной точностью при незначительных дополнительных затратах машинного времени.

Однако СП-метод имеет ряд преимуществ по сравнению с квазидиффузией:

1) он одинаково применим для изотропных и анизотропных индикатрис, при этом не требуется обязательного разложения функции $\gamma(x, \mu, \mu')$ по полиномам Лежандра или выделения какой-то части индикатрисы, как в квазидиффузии;

2) вспомогательная задача естественно расщепляется и решается итерационно с интегрированием, аналогичным решению основной задачи, что может оказаться полезным для многомерных задач;

3) внешние краевые условия ускоряющей системы ставятся точно (не зависят от итераций);

4) построение СП-метода для многомерных задач оказывается более удобным.

Можно заметить (см. рис 1,2), что уже после первых итераций

$$\int_0^h n^{(s)}(x) dx \approx \int_0^h n(x) dx.$$

Это подтверждает балансный принцип СП-метода.

Кроме того, СП-метод слабо зависит от начального приближения. Например, если вести счет с ускорением, начиная с первой итерации или после нескольких простых итераций, то с момента подключения ускорения для достижения нужных $\varepsilon_n, \varepsilon_\Phi$ потребуется одинаковое количество итераций.

Проводилась серия расчетов вариантов с различными анизотропными индикатрисами (отношение доли рассеянного излучения вперед к доле излучения назад бралось ~ 100 и ~ 40) для различных оптических толщин ($h=1; 9,10$ длин свободных пробегов) с различной степенью поглощения ($\lambda = 1$ – чистое рассеяние и $\lambda = 0,9; 0,7$ – с частичным поглощением). Рассчитывались также различные двухслойные варианты. СП-метод и здесь сохраняет свое свойство быстрой сходимости. За 3–5 итераций устанавливается профиль решения, за 7–12 итераций получаем 3–4

установившиеся цифры. Сходимость СП-метода оказывается в десятки раз быстрее простых итераций.

Для иллюстрации работы СП-метода в плохих условиях [$h=10$, $\lambda=1$, функция $\gamma(x, \mu, \mu')$ при $\mu' = 1$ изображена на рис. 3, вариант V] на рис. 4 и 5 показаны картины установления по итерациям профилей $n(x)$, $\Phi(h, \mu)$, $\Phi(0, \mu)$. Обозначения те же, что и на рис. 1 и 2.

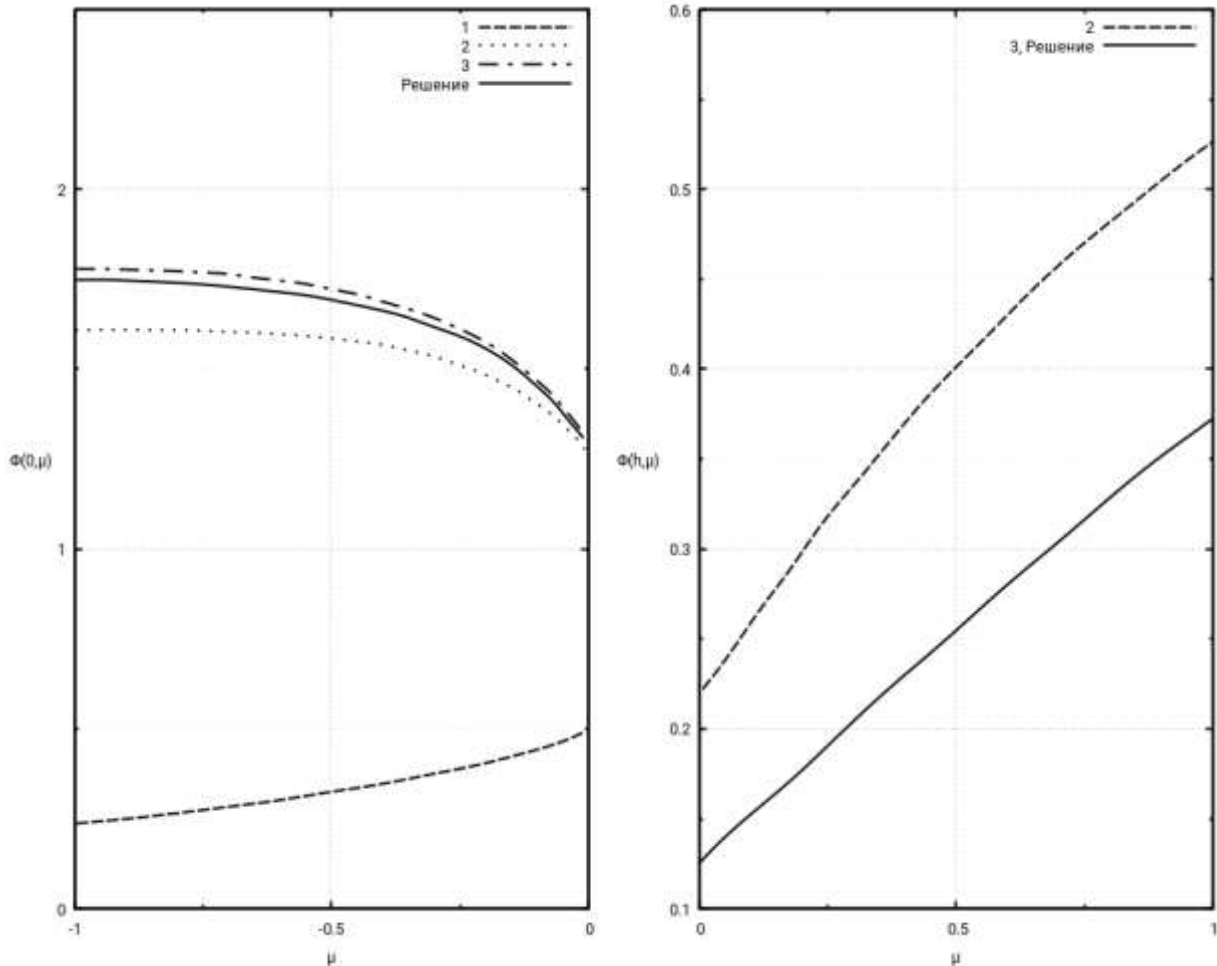


Рис. 2. Установление угловых распределений пропущенного $\Phi(h, \mu)$ и отраженного $\Phi(0, \mu)$ излучения для варианта 1 (цифры у кривых означают номер итерации).

В табл. 2 приводятся некоторые данные для сравнения сходимости СП-метода (с/у) и простых итераций (б/у) при

$$\mu_1 \approx 0,013, \mu_2 \approx 0,987, n_{\max} = n \quad (x = 2,6).$$

Исследование СП-метода с $V(r, \mu) \equiv 1$ в сферически-симметричном случае проводилось с точечным источником при изотропном рассеянии среды. Как известно, решение такой задачи имеет особенность вида

$\frac{1}{r\sqrt{1-\mu^2}}$. Выделение особенности лучше проводить не в исходном

уравнении, а в численном алгоритме, в том числе и в самой ускоряющей задаче, получаемой стандартным образом из уравнения переноса. Для вариантов с большими оптическими толщинами ($h \approx 10$ длин свободных пробегов) и малым поглощением $\varepsilon_n, \varepsilon_\phi \sim 10^{-3}$ достигается за 7–10 итераций.

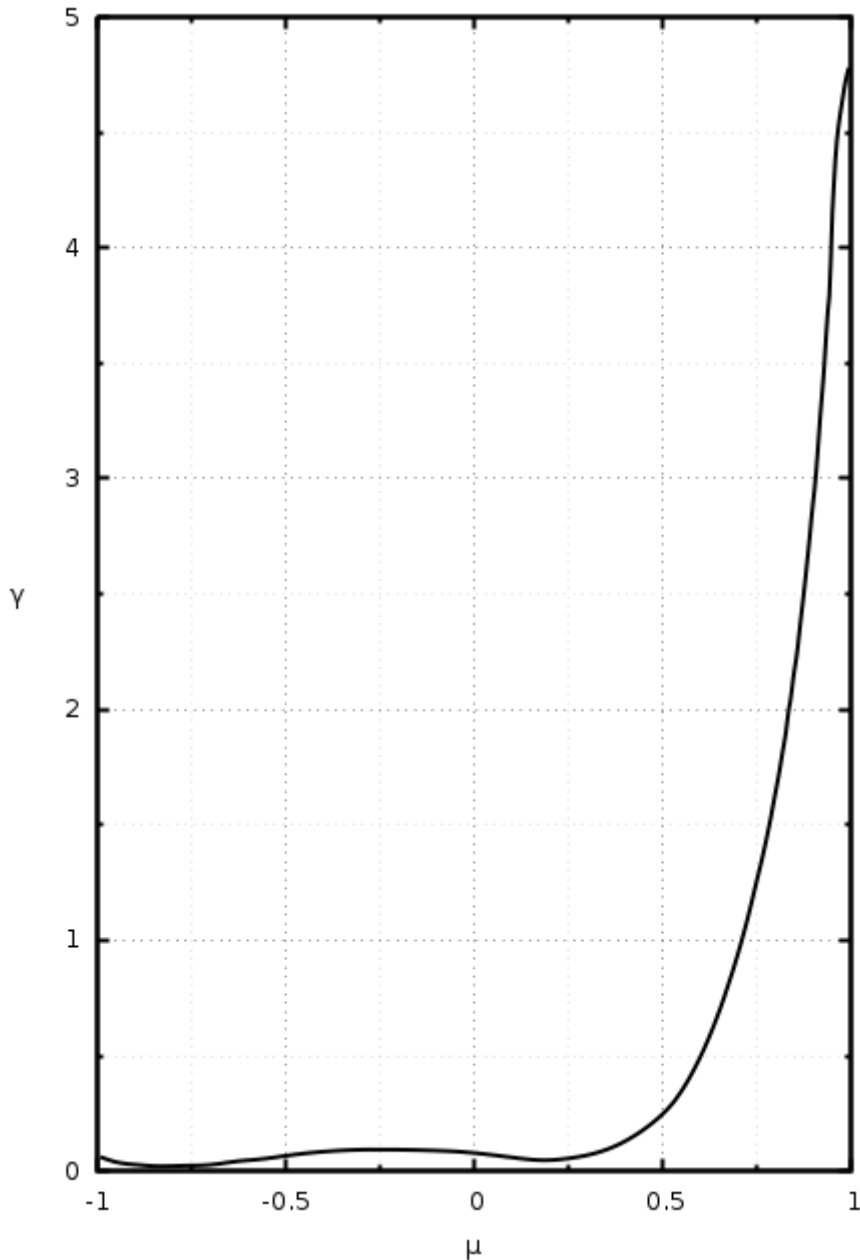


Рис.3. Индикатриса рассеяния варианта V (вытянутость ~ 100).

Общий вывод из анализа численного решения уравнения переноса с использованием различных приемов ускорения заключается в том, что для быстроходящихся задач (малые толщины, рассеяние с поглощением) удобно пользоваться линейными итерационными методами, например релаксацией хотя бы с $\alpha=1,5$. Для решения задач с медленной сходимостью (большие толщины, чистое рассеяние, анизотропные индикатрисы) необходимы нелинейные приемы. Нелинейные методы типа СП-метода обладают весьма

высокой эффективностью. Составление более сложной программы расчета при этом вполне окупается значительной экономией машинного времени, необходимого для просчетов большого количества вариантов или для решения задач типа оптимизационных или с нелинейными коэффициентами.

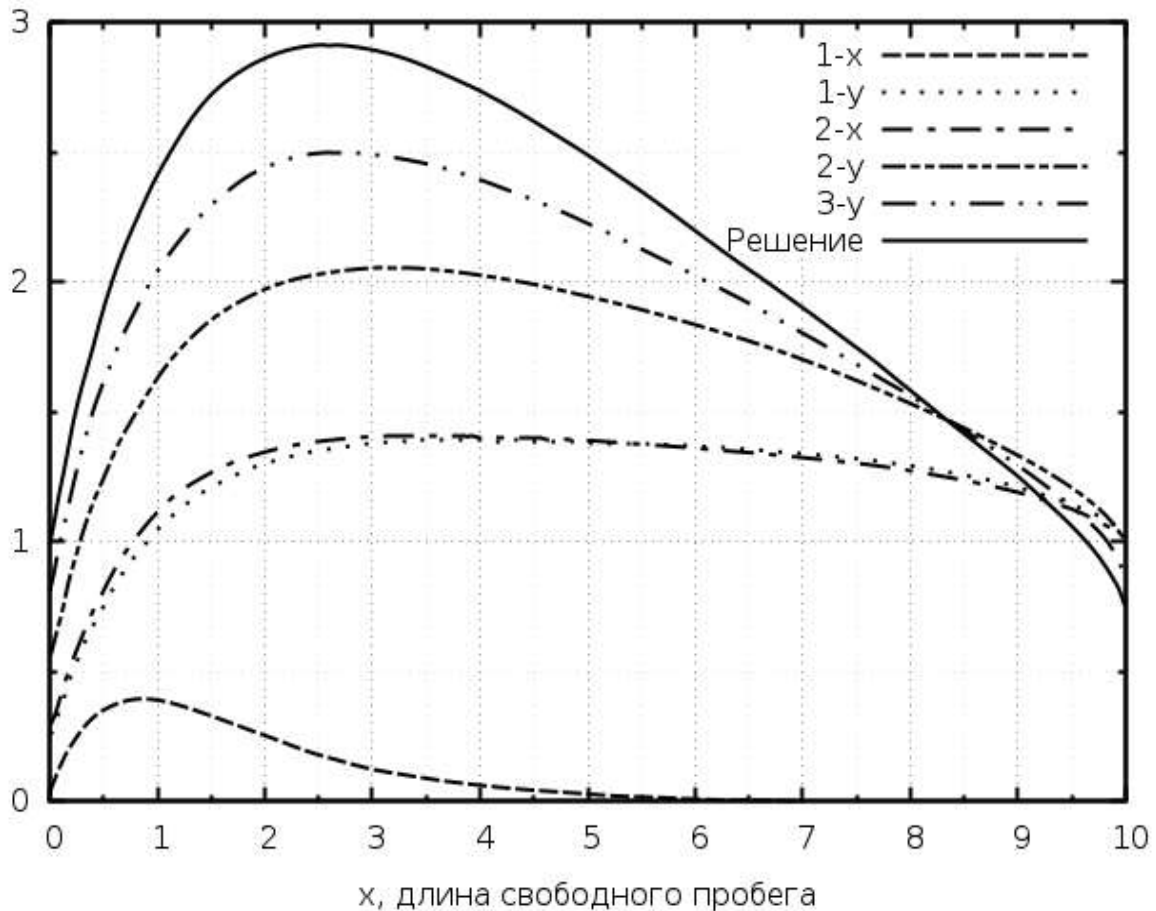


Рис.4. Изменение профилей $n^{(s)}(x)$ и $n^{(s)}(x)$ по итерациям для варианта V с неизотропным рассеянием.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гермогенова Т.А. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.» 1, 6, 1001 (1961).
2. Гольдин В.Я. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.» 4, 6, 1078 (1964).
3. Николайшвили Ш.С. «Атомная энергия» 20, 344 (1966).
4. Владимиров В.С. «Математические задачи односкоростной теории переноса частиц». Труды Математического института им. В.А. Стеклова LXI (1961).
5. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т. I, гл. IV. М–Л., Гостехиздат, 1951.

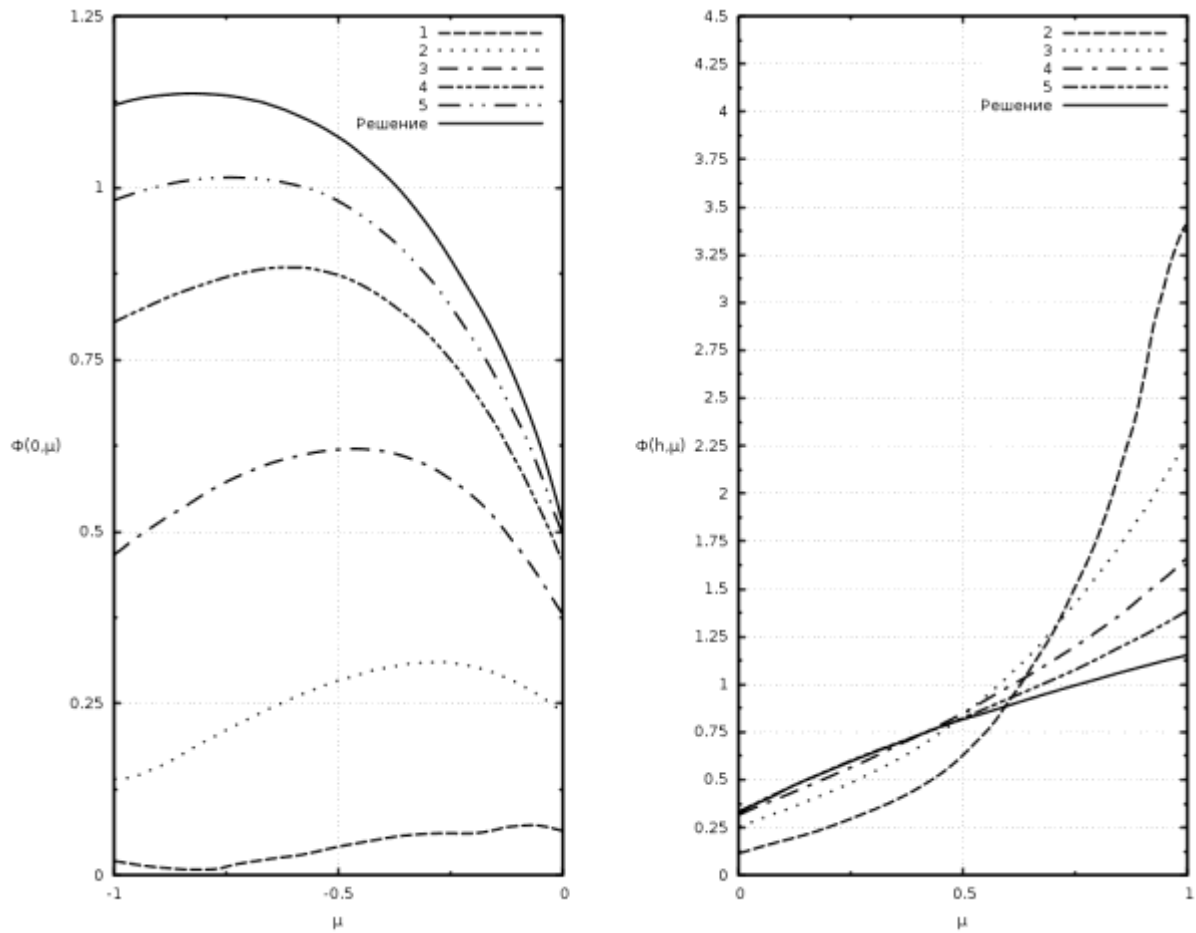


Рис.5. Установление угловых распределений пропущенного $\Phi(h, \mu)$ и отраженного $\Phi(0, \mu)$ излучения для варианта V по итерациям (цифры у кривых означают номер итерации).

Таблица 2

Изменение характерных величин в простом итерационном процессе (б/у) и при ускорении по СП-методу (с/у)

Но ме р ит S	Хар акт ери сти ка ите рпро ц	ε_Φ	ε_n	$n^{(s)}(0)$	$n_{\max}^{(s)}$	$n^{(s)}(h)$	$\Phi^{(s)}(0, \mu_1)$	$\Phi^{(s)}(0, \mu_2)$	$\Phi^{(s)}(h, \mu_1)$	$\Phi^{(s)}(h, \mu_2)$	$n^{(s)}(0)$	$n_{\max}^{(s)}$	$n^{(s)}(h)$
1	б/у	1	1	$0,37 \cdot 10^{-1}$	0,172	$0,26 \cdot 10^{-3}$	$0,66 \cdot 10^{-1}$	$0,17 \cdot 10^{-1}$	$0,29 \cdot 10^{-5}$	$0,21 \cdot 10^{-2}$	0,250	1,22	1,03
	с/у	1	1	$0,37 \cdot 10^{-1}$	0,172	$0,26 \cdot 10^{-3}$	$0,66 \cdot 10^{-1}$	$0,17 \cdot 10^{-1}$	$0,29 \cdot 10^{-5}$	$0,21 \cdot 10^{-2}$			
2	б/у	0,958	0,769	$0,69 \cdot 10^{-1}$	0,40	$0,113 \cdot 10^{-2}$	$0,94 \cdot 10^{-1}$	$0,31 \cdot 10^{-1}$	$0,32 \cdot 10^{-4}$	$0,67 \cdot 10^{-2}$	0,563	2,03	1,005
	с/у	0,9999	0,9997	0,247	1,38	1,01	0,244	0,136	0,117	3,40			
3	б/у	0,825	0,655	0,104	0,632	$0,328 \cdot 10^{-2}$	0,115	$0,521 \cdot 10^{-1}$	$0,182 \cdot 10^{-3}$	$0,155 \cdot 10^{-1}$	0,801	2,48	0,898
	с/у	0,727	0,556	0,557	2,05	0,991	0,397	0,469	0,254	2,26			
5	б/у	0,629	0,495	0,176	1,01	$0,151 \cdot 10^{-1}$	0,153	0,109	$0,172 \cdot 10^{-2}$	$0,525 \cdot 10^{-1}$	0,960	2,79	0,798
	с/у	0,203	0,125	0,909	2,69	0,822	0,521	0,991	0,320	1,37			
10	б/у	0,322	0,239	0,360	1,56	0,114	0,241	0,307	$0,281 \cdot 10^{-1}$	0,261	1,00	2,89	0,775
	с/у	$0,495 \cdot 10^{-2}$	$0,281 \cdot 10^{-2}$	0,998	2,89	0,776	0,547	1,12	0,331	1,16			
13	б/у	0,209	0,152	0,456	1,77	0,206	0,287	0,425	$0,625 \cdot 10^{-1}$	0,408	1,00	2,89	0,775
	с/у	$0,624 \cdot 10^{-3}$	$0,391 \cdot 10^{-3}$	1,001	2,90	0,775	0,548	1,12	0,331	1,16			
80	б/у	$0,103 \cdot 10^{-2}$	$0,894 \cdot 10^{-3}$	0,974	2,85	0,752	0,531	1,09	0,317	1,13			

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ТЕОРИИ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ РЕАКТОРА

Совместно с В.И. Журавлевым, А.П. Суворовым, В.А. Уткиным

Вопросы физики защиты реакторов. Сб. статей. Вып. 5.

Под ред. Д.Л. Бродера и др. Атомиздат. 1972. Стр.22- 46.

Введение

При проектировании радиационной защиты реакторов приходится анализировать довольно сложную картину прохождения нейтронов и γ -квантов в слоях защиты. Один вид излучения – нейтроны – служит источником γ -излучения вследствие процессов деления, радиационного захвата и неупругого рассеяния нейтронов.

Пространственные, энергетические и угловые распределения полей излучения в защите могут быть получены решением многогрупповой системы кинетических уравнений. Для нейтронов эта система имеет следующий вид:

$$\frac{\partial F^i(r, \Omega)}{\partial \Omega} + \Sigma^i(r) F^i(r, \Omega) = \sum_{j=1}^i \int d\Omega' \Sigma_s^{j \rightarrow i}(r, \mu_s) F^j(r, \Omega') + q_0^i(r), \quad (1)$$

где $F^i(r, \Omega)$ – поток нейтронов i -й энергетической группы в точке r в направлении Ω ; $\Sigma^i(r)$ – полное сечение взаимодействия нейтронов i -й группы с ядрами среды в окрестности точки r ; $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(r, \mu_s)$ – дифференциальное сечение рассеяния на угол $\arccos \mu_s$ нейтронов j -й группы с переходом в i -ю группу; $q_0^i(r)$ – изотропные внутренние источники нейтронов i -й группы в активной зоне, обусловленные делением. (В некоторых случаях и γ -кванты могут создавать источники нейтронов – фотоделение и фотонейтронные процессы. Но в настоящей работе ввиду их малого значения эти случаи не рассматриваются, хотя и могут быть довольно просто учтены.)

Групповые константы Σ^i и $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ предполагаются постоянными внутри отдельных зон защиты, причем функции $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ могут быть представлены конечными разложениями по полиномам или являются, по крайней мере, кусочно-непрерывными. Каждая область защиты, состоящая из однородного материала, включает одну или большее число таких зон (в основном это зависит от размеров области). Групповые константы для каждого материала в большинстве случаев получают усреднением по спектру нейтронов в бесконечной однородной среде, состоящей из этого материала [1,2].

В общем случае граничное условие для потока нейтронов $F^i(r, \Omega)$ в некоторой выделенной области защиты, ограниченной поверхностью S и включающей произвольное число зон, имеет вид (при $n\Omega < 0$)

$$F^i(\mathbf{r}_S, \Omega) = f^i(\mathbf{r}_S, \Omega) + \sum_{j=1}^I \int_{n\Omega < 0} d\Omega' \int_S d\mathbf{r}'_S R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}'_S, \Omega'; \mathbf{r}_S, \Omega) F^j(\mathbf{r}', \Omega'), \quad (2)$$

где \mathbf{r}_S – точки поверхности S ; \mathbf{n} – внешняя нормаль к этой поверхности; функция $f^i(\mathbf{r}_S, \Omega)$ характеризует излучение, падающее извне на рассматриваемую область; I – число групп нейтронов; $R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}'_S, \Omega'; \mathbf{r}_S, \Omega)$ – дифференциальная функция отражения (альbedo) части пространства, прилегающей к рассматриваемой области защиты. Эта функция характеризует интенсивность отраженного излучения i -й энергетической группы в направлении Ω в точке \mathbf{r}_S при падении потока нейтронов единичной интенсивности) j -группы в направлении Ω' в точку \mathbf{r}'_S . Учитывая резкое убывание дифференциальной функции отражения $R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}'_S, \Omega'; \mathbf{r}_S, \Omega)$ с ростом $|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}'_S|$, благодаря чему отражение падающего в данную точку излучения в основном определяется ближайшей окрестностью этой точки, можно приближенно решать задачу, используя следующее граничное условие:

$$F^i(\mathbf{r}_S, \Omega) = f^i(\mathbf{r}_S, \Omega) + \sum_{j=1}^I \int_{n\Omega > 0} d\Omega' R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}_S, \Omega' \Omega) F^j(\mathbf{r}', \Omega') \quad \text{при } n\Omega > 0, \quad (3)$$

где

$$R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}_S, \Omega' \Omega) = \int d\mathbf{r}'_S R^{j \rightarrow i}(\mathbf{r}'_S, \Omega'; \mathbf{r}_S, \Omega), \quad (4)$$

функция отражения для одномерных задач [3]. Задачу с $R \equiv 0$ будем называть первой краевой задачей, а с $f \equiv 0$ – второй краевой задачей. Следует отметить, что в тех случаях, когда окружающая часть пространства представляет собой неразмножающую среду, суммирование по j в левых частях формул (2) и (4) проводится от $j=1$ до $j=i$.

Для потока γ -квантов t -й энергетической группы $I^t(\mathbf{r}, \Omega)$ уравнение переноса записывается в виде, весьма близком по форме к уравнению (1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial I^t(\mathbf{r}, \Omega)}{\partial \Omega} + \sum_{(\gamma)}^t(\mathbf{r}) I^t(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{p=1}^t \int d\Omega' \sum_{s(\gamma)}^{p \rightarrow t}(\mathbf{r}, \mu_s) I^p(\mathbf{r}, \Omega') + \\ + \sum_{i=1}^I \left[\nu_i^t \sum_{n, \gamma}^i(\mathbf{r}) + \beta_i^t \sum_{in}^i(\mathbf{r}) \right] F_0^i(\mathbf{r}) + q_{0(\gamma)}^t(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5)$$

где $\sum_{(\gamma)}^t$ и $\sum_{s(\gamma)}^{p \rightarrow t}$ – константы для γ -квантов, аналогичные нейтронным \sum и \sum_S ; $\sum_{n, \gamma}^i$ – сечение радиационного захвата нейтронов i -й группы; ν_i^t – выход γ -квантов t -й группы на захват одного нейтрона i -й группы; \sum_{in}^i – сечение неупругого рассеяния нейтронов i -й группы; β_i^t – соответствующий выход

при этом γ -квантов t -й группы на один неупруго рассеянный нейтрон; $F_0^i(\mathbf{r}) = \int d\Omega F^i(\mathbf{r}, \Omega)$ - скалярный поток нейтронов i -группы; $q_{0(\gamma)}^i(\mathbf{r})$ - распределение источников γ -квантов деления.

Граничные условия для потока γ -квантов записываются в форме, подобной условиям (2) и (4).

Многогрупповые системы сопряженных уравнений для нейтронов и γ -квантов имеют вид несколько более сложный, чем системы (1) и (5).

Системы уравнений (1) и (5) решаются аналогично друг другу, поэтому будем рассматривать только систему уравнений (1).

Некоторые теоретические результаты

Перейдем теперь к анализу различных методов решения краевых задач уравнения переноса излучения. Математические исследования прежде всего были предприняты в задачах о плоскопараллельных средах, где основой их является анализ проблемы задач Милна о распространении излучения в полубесконечном однородном слое [4-6]. Подробно исследовалась также задача о слое конечной оптической толщины, и получен ряд выражений для решения, содержащих сравнительно легко табулируемые функции и параметры [7-13]. Кэйс существенно расширил круг задач, поддающихся точному решению, введением сингулярных собственных функций уравнения переноса в плоской геометрии [11]. С помощью таких функций, определяемых из сингулярных интегральных уравнений, были найдены решения для слоев конечной толщины и решения некоторых энергетических задач [14,15]. Исследования характера пространственной и угловой зависимости решения, асимптотика на больших расстояниях от границ, решения вблизи границ, большое число детально исследованных частных случаев – все это служит основой для построения различных аналитических и численных методов решения задач (1) и (3) в случае плоскопараллельной среды [7-16].

Некоторые из асимптотических результатов обобщаются на одномерные задачи со сферической и цилиндрической геометрией [17-19]. Ряд таких задач также удается решить методом Кейса [10,15]. Однако для задач с неплоской геометрией структура решения оказывается, как правило, значительно сложнее. Это связано прежде всего с тем, что всякая поверхность раздела различных материалов, приводящая к разрыву коэффициентов уравнения переноса, т.е. групповых констант как функций пространственной координаты, порождает особенности в решении и его производных, распространяющиеся вдоль любого луча, касательного к поверхности разрыва. Так, в задаче о сферической гетерогенной защите (рис.1) в любой точке \mathbf{r} пространственные и угловые производные потока $F^i(\mathbf{r}, \Omega)$ обращаются в бесконечность $\Omega = \Omega^*_b$.

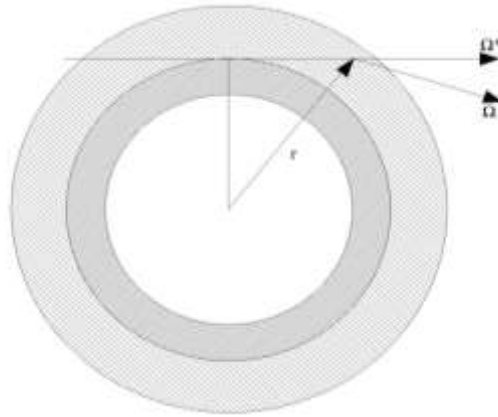


Рис.1 Схема сферической гетерогенной защиты.

Характер разрывов решений подробно исследован для достаточно общих задач [20-22]. Если дифференциальное сечение $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(r, \mu_s)$ - кусочно-гладкая функция своих аргументов, то интеграл столкновений в правой части уравнения (1) является дифференцируемой функцией r и Ω всюду за исключением поверхностей разрыва S_l функции Σ_s . На этих поверхностях интеграл столкновений также имеет разрыв, а его пространственные производные обращаются в бесконечность как $|\ln|r-r_{S_l}||$, где r_{S_l} - точки поверхности S_l . Само же решение $F(r, \Omega)$ (индекс группы для простоты далее опускаем), будучи непрерывным по r вдоль направления Ω как правило, терпит разрыв вместе со всеми производными вдоль луча, касательного к поверхности разрыва S_l сечений Σ и Σ_s . Разрыв в самом решении пропадает, оставаясь лишь в производных, в том случае, когда в точке касания кривизна поверхности S_l отлична от нуля, а эта поверхность не является граничной поверхностью источника или черного тела ($\Sigma = \infty$).

Разрыв в источниках q и f приводят к соответствующим разрывам в интенсивности нерассеянной части излучения. Более сложными особенностями обладают решения задач о локализованных источниках, в частности о точечном мононаправленном источнике [22, 23]. Построение точных и устойчивых алгоритмов численного решения задачи (1)-(2) требует аккуратного учета особенностей как самого решения, так и его производных. С другой стороны, столь сложная локальная структура решений заставляет отказаться от рассмотрения проблем существования и единственности решений в рамках классического анализа и воспользоваться аппаратом обобщенных решений. На этом пути создана теория разрешимости краевых задач (1)-(2), исследованы их спектральные свойства, а для самосопряженной формы, к которой может быть приведена первая краевая задача, построены вариационные функционалы [20, 22]. Минимальные значения этих функционалов соответствуют точным решениям задачи, а всякая

последовательность функций, минимизирующая значение функционалов, сходится к точному решению. Этим обстоятельством и определяется та важная роль, которую играют эти функционалы в анализе современных сложных вычислительных процессов.

Способы аппроксимации краевых задач при численном решении

Многообразие задач теории переноса привело к развитию большого числа различных вычислительных методов. Методы численного решения задач защиты (1)-(2) определяются, с одной стороны, способом приближенного описания при составлении алгебраической системы, аппроксимирующей исходную задачу, а с другой стороны – способами решения этой системы*.

Остановимся сначала на способах аппроксимации угловой зависимости решения. Требуя выполнения системы уравнений (1) и граничного условия (2) в выбранной конечной системе угловых векторов $\{\Omega_n\}_{n=1}^N$ и заменяя интегралы соответствующим квадратурными суммами, приходим к методам интерполяционного типа, общая формулировка которых (применительно к плоским задачам) была дана в работе [24]. Задача (1)-(2) сводится при этом к краевой задаче для системы обыкновенных линейных дифференциальных уравнений. В задачах для плоскопараллельных защит такие методы носят название методов дискретных ординат, ведущее свое происхождение от работ Вика [25] и Чандрасекара [7]. В литературе эти методы все чаще называют D_N -методами [26].

Как правило, пользуются разделением системы уравнений (1) на системы для отдельных гармоник потока по азимутальному углу φ . В случае облучения защиты мононаправленным пучком $f^i(\mu, \varphi) = f^i \delta(\mu - \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0)$ в решении обычно выделяют нерассеянную часть излучения, а остальную часть разлагают в ряд Фурье по углу φ [27]. Представляя интегральные члены в системе уравнений (1) квадратными суммами, получают следующую систему уравнений для функций $F_n(x) = F(x, \mu_n)$:

$$\mu_n \frac{\partial F_n}{\partial x} + \Sigma(x) F_n(x) = \sum_{n'} a_{n'} \sum_{s, m'} \Sigma_{s, m'}(x) F_{n'}(x) + B_n(x) = Q_n(x) \quad (6)$$

с соответствующими граничными условиями. Здесь $\sum_{s, m'}$ - значение азимутальной гармоники дифференциального сечения в узлах $\mu_n, \mu_{n'}$; B_n - часть интеграла столкновений в узлах μ_n , обусловленная переходом нейтронов из вышележащих (по энергии) групп (здесь и далее индекс группы i и индекс азимутальной гармоники для простоты записи опущен).

* В настоящей работе не будем касаться методов Монте-Карло, основанных на прямом моделировании процесса переноса излучения.

Для аппроксимации угловой зависимости решение $F(x, \mu)$ выражается в виде интерполяционного полинома:

$$F(x, \mu) = \sum_n F_n(x) L_n(\mu) \quad (7)$$

где $L_n(\mu)$ - интерполяционные множители Лагранжа:

$$L_n(\mu) = \frac{\prod_{n' \neq n} (\mu - \mu_{n'})}{\prod_{n' \neq n} (\mu_n - \mu_{n'})};$$

μ_n - узлы интерполяции. Величины $F_n(x)$ находят, решая задачу (1)-(2) для системы узлов μ_n .

В многомерных задачах с декартовыми координатами интерполяционная аппроксимация выделяет характеристические направления. В криволинейных системах координат, например сферической или цилиндрической, где координаты вектора зависят от положения точки r , логическим развитием метода дискретных ординат являются различные варианты метода характеристик [28-32].

Для задач с плоской и сферической геометрией показана эквивалентность полиномиальных методов, в которых решение ищется в виде суммы полиномов по угловым переменным с коэффициентами, зависящими от пространственных переменных, методом дискретных ординат при соответствующем выборе узлов [10, 33-35]. Более точно, интерполяционный полином, построенный по значениям решения, найденным D_N -методом, совпадает с соответствующим P_N -приближением или стремится к нему при $N \rightarrow \infty$ в зависимости от точности передачи граничных условий. Наиболее простой и поэтому широко известный вариант полиномиального метода – метод сферических гармоник – употребляется также при решении многомерных задач в тех случаях, когда интерес представляет пространственное распределение угловых моментов решения [20, 36]. Как правило, граничные условия в методе сферических гармоник передаются грубо, что приводит к сильным искажениям решения, особенно его угловой зависимости, в задачах, где граничные условия играют существенную роль. Введение систем полиномов, ортогональных на отдельных интервалах области изменения угловых переменных, для более точной передачи граничных условий ($2P_L$ - методы и т.п.) приводит к усложнению расчетной схемы. Поэтому в тех задачах, где существенна точная передача угловой зависимости, обычно пользуются интерполяционными вариантами угловой аппроксимации.

Формально более простая в большинстве задач аппроксимация угловой зависимости была принята S_N -методы, предложенном Карлсоном [37], где для получения разностей схемы проводится интегрирование уравнения переноса в ячейке фазового пространства в предположении о постоянстве

решения в этой ячейке или о линейной зависимости его от угловых переменных. В дальнейшем при усовершенствовании этого метода точность угловой аппроксимации повысилась [37, 38], а ее характер приблизился к аппроксимации, принятой в интерполяционных методах (DS_N - дискретный метод Карлсона).

В работе [39] предлагается общий подход, подобный развитому в работе [34] для единого описания как полиномиальных, так и интерполяционных методов, в том числе и метода Карлсона. Символ NP_L используется для обозначения метода, в котором решение представляется суммой $(L+1)$ полиномов из системы, ортогональной на каждом из N подынтервалов в интервале $[-1, +1]$. Так, метод сферических гармоник есть $1P_L$ - метод, метод Ивона - $2P_L, S_N$ - метод - NP_1 . Отметим здесь, что в последнее время в интерполяционных методах все чаще начинают применять специальные системы угловых узлов (асимметричные квадратуры), при выборе которых используется качественная картина предполагаемого решения. Например, для задач расчета глубокого проникновения излучения целесообразно использовать сетки с наибольшей концентрацией узлов в области малых углов ($\mu \sim 1$)[40]. Такой же подход иногда используется и в двумерных задачах [41].

В аппроксимации пространственной зависимости можно выделить два основных способа. Первый основан на интегрировании полученной системы обыкновенных дифференциальных уравнений вдоль характеристики [28] или в ячейке пространственной сетки с интерполяцией необходимых для этого значений на границе ячейки [29-32]. Этот метод широко использовался при решении одномерных задач. Устойчивость и точность его оценивается в работах [29-31]. На этом принципе построен и исследован для защит с осевой симметрией ряд разностных схем [31, 32, 42].

Проиллюстрируем преобразования по пространственной координате на примере одномерной задачи (7). Система уравнений (7) интегрируется на отрезке конечно-разностной сетки (x_k, x_{k+1}) в предположении о постоянстве или линейной зависимости правой части $Q_n(x)$:

$$\left. \begin{aligned} F_n^{k+1} &= CF_n^k + \frac{1-C}{\sum_{k+\frac{1}{2}}} Q_n^{k+\frac{1}{2}} && \text{при } \mu_n > 0, \\ F_n^k &= CF_n^{k+1} + \frac{1-C}{\sum_{k+\frac{1}{2}}} Q_n^{k-\frac{1}{2}} && \text{при } \mu_n < 0, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

где

$$C = \exp \left[- \frac{\sum_{k+\frac{1}{2}} (x_{k+1} - x_k)}{\mu_n} \right].$$

Более простые формулы получим, полагая в системе (7)

$$\frac{dF_n}{dx} = \frac{F_n^{k+1} - F_n^k}{x_{k+1} - x_k}$$

Другой способ построения разностной схемы состоит в формальном переходе от системы обыкновенных дифференциальных уравнений к конечно-разностной при условии баланса числа частиц фазового пространства, определяемых сеткой пространственных и угловых расчетных точек. Так строится разностная схема в методе Карлсона [37,38], где система уравнений (1) интегрируется по элементарной ячейке (μ_n, μ_{n+1}) , (x_k, x_{k+1}) в предположенной линейной зависимости F и правой части системы от x .

Вообще говоря, более точная, чем схема метода характеристик с линейной интерполяцией, и более простая в реализации схема метода Карлсона, однако, не всегда обладает устойчивостью, в то время как характеристические схемы безусловно устойчивы и разрывы решения и его производных в них легко могут быть учтены [31, 32]. При использовании метода Карлсона эти особенности приводят к неустойчивости счета, появлению колебаний в угловых распределениях и, хотя и в меньшей степени, в пространственной зависимости [31]. Поэтому в задачах с высокими требованиями к точности угловых распределений предпочтительнее характеристические схемы. В работе [43] разработан вариант таких схем со сравнительно простым алгоритмом. Это упрощение связано, с одной стороны, со спрямлением формы ячеек в криволинейных координатах и, с другой – со стандартизацией процесса интерполяции значений на границе ячейки разностной сетки и расчета длины пути вдоль характеристики в ячейке. Такие схемы оказываются практически незначительно сложнее схем метода Карлсона.

Основные методы решения приближенных систем уравнений

В настоящее время приняты два основных метода решения неоднородных линейных алгебраических систем, возникающих при аппроксимации (1)-(2): интерационный и матричной факторизации. Интерационный метод, в первоначальной форме отвечающий последовательному учету интенсивности нерассеянного излучения, однократно рассеянного, двукратно и т.д. в настоящее время значительно усовершенствовано введением различных приемов ускорения сходимости. Механизм их действия может быть понят на основе вариационного принципа. Задачу (1)-(2) можно сформулировать как самосопряженную для

функции $U(x, \mu) = \frac{1}{2}[F(x, \mu) + F(x, -\mu)]$ [20, 42]. С точки зрения ускорения сходимости особенно эффективным оказалось чередование простой итерации и вариационных приемов, позволяющих из некоторого класса функций V , содержащих последнюю посчитанную итерацию $U^{(v)}$, выбрать ту функцию $U^{(v+\frac{1}{2})}$, которая сообщает наименьшее в этом классе значение вариационному функционалу задачи $J[U]$. Те методы, в которых приближение $U^{(v+\frac{1}{2})}$ ищется в виде $U^{(v)} + u$, где u минимизирует значение функционала $j[u] = J[U^{(v)} + u]$ в классе V , на зависящее от $U^{(v)}$, называются линейными. Ряд интересных результатов в этом направлении получен при исследовании КР-методов [44, 45].

Весьма эффективны нелинейные методы, такие, как квазидиффузионный [46] и метод средних потоков [47-49], в которых выбор класса варьируемых функций определяется уже посчитанными итерациями.

В методе средних потоков приближение $U^{(v+\frac{1}{2})}$ ищется в виде произведения $m(r)U^{(v)}(r, \Omega)$, где $U^{(v)}$ - последняя посчитанная итерация, а $m(r)$ определяется соответствующим уравнением Эйлера для функционала $J[mU^{(v)}] = j_v[m]$. Это уравнение совпадает с тем, которое может быть получено для $m(r)$ интегрированием по Ω с весом $U^{(v)}$ уравнения переноса в самосопряженной форме. В практике расчетов вспомогательные уравнения для m обычно строятся усреднением по Ω исходной системы уравнений (1) по всей области изменения угловых переменных или по отдельным ее частям [47-49]. Так, в задачах о плоскопараллельных слоях полагают:

$$\left. \begin{aligned} F^{(v+\frac{1}{2})}(x, \mu) &= m^+(x) \tilde{F}^{(v)}(x, \mu) \text{ при } \mu > 0; \\ F^{(v+\frac{1}{2})}(x, \mu) &= m^-(x) \tilde{F}^{(v)}(x, \mu) \text{ при } \dots \mu < 0, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

и усреднение системы уравнений (1) проводится отдельно на интервалах (1,0) и (-1,0) для правильной передачи граничных условий. Выигрыш машинного времени за счет ускорения сходимости методом средних потоков может составлять до 10^2 [49]. Значительность эффекта объясняется большим числом варьируемых параметров, которыми являются значения $m^\pm(x)$ во всех точках разностной сетки по x .

Высокая скорость сходимости отличает также методы расщепления (или переменных направлений) [50-53]. В этих методах каждый итерационный шаг разбивается на ряд более простых операций, а введение свободных параметров позволяет добиться оптимальных качеств вычислительного процесса. В работах [52, 53] дано доказательство

сходимости этого метода в весьма широком классе задач и оценена скорость сходимости некоторых конкретных итерационных процессов.

Второй способ отыскания решения задачи (7) – использование методов матричной факторизации [54]. Эти методы используются сейчас лишь в одномерных задачах, где для каждого значения пространственной координаты x_k значения решения можно объединить в два вектора F_k^+ и F_k^- , компоненты которых отвечают различным угловым моментам [36] или различным направлениям [1] (при $\mu > 0$ и $\mu < 0$ соответственно). Полагая:

$$F_k^+ = \hat{R} F_k^- + T_k^- \quad (10)$$

получают для матриц \hat{R}_k и векторов T_k систему рекуррентных соотношений, позволяющих по известным из граничных условий значениям \hat{R}_0 и T_0 найти все остальные значения этих величин. Затем из подобных соотношений определяются компоненты векторов F_k^+ , F_k^- для всей пространственной сетки.

Устойчивым и удобным в счете, особенно в тех задачах, где нужны лишь внешние характеристики, описывающие отраженное и пропущенное излучение, оказывается альбедный вариант этого метода [13], когда вспомогательными величинами \hat{R}_k и T_k является матрица стражения и вектор пропускания слоя (x_0, x_k) . Уравнения для R и T могут быть построены в этом случае также на основе системы из двух нелинейных уравнений для этих величин, которая получается из исходной задачи (1)-(2) [8] или непосредственно из принципов инвариантности Амбарцумяна [7]. Иногда используется вариант этого метода, позволяющий по характеристикам отражения и пропускания каждого из соседних слоев найти соответствующие характеристики комбинации таких слоев [55].

Необходимо отметить, что методы решения уравнения переноса, основанные на переходе от исходной линейной задачи к нелинейной (метод средних потоков, альбедный и т.п.), относятся к числу наиболее эффективных расчетных методов.

Расчетные алгоритмы, используемые при решении уравнения переноса на ЭВМ, обычно построены на комбинациях описанных выше приемов. Для иллюстрации в табл. 1 приведены основные характеристики некоторых известных методов решения уравнения переноса, в том числе для некоторых вычислительных программ, описанных в последнем разделе настоящей статьи. Возможны и другие комбинации трех основных характеристик: способов аппроксимации угловой и пространственной зависимости потока и метода решений приближенной системы уравнений. Например, известна программа EOS, использующая разложение по полиномам Лежандра, интегрирование с использованием гауссовой квадратуры при вычислении

моментов разложения потока и интегрирование уравнения вдоль характеристик.

Полуаналитические методы

Ряд задач теории переноса может быть решен значительно проще, если воспользоваться некоторыми аналитическими результатами. Так, в одномерных задачах (в основном плоских) с успехом используются теории Н- и Х-, Y-функций Чандрасекара [7] и разложения по элементарным решениям, введенные Кэйсом [10]. При этом в сложных задачах исходное уравнение сводят к приближенной форме, более удобной для расчетов. Так, в работе [56] по схеме, близкой к методу Кэйса, предлагается многогрупповой метод расчета гетерогенных плоскопараллельных защит в P_L -приближении. Решение задачи представляется суперпозицией плоских волн, отвечающих многогрупповым источникам.

Таблица 1

Характеристика основных приближенных методов решения уравнений переноса

Название метода	Способы аппроксимации зависимости		Способ решения приближенной системы
	угловой	пространственный	
Вика-Чандрасекара [7,26]	Интерполяционный	Точное решение	Точное решение
Сферических гармоник [36]	Разложение по полиномам Лежандра на интервале (-1, +1) или на (-1, 0), (0, +1)	Линейность на каждом интервале	Итерационный
Карлсона [38]	Интегрирование по элементарной ячейке (μ_n, μ_{n+1}) и (x_k, x_{k+1}) в предположении линейности решения и правой части		Итерационный
Альбедный [1, 3]	Интерполяционный	Интегрирование уравнений вдоль характеристик на каждом интервале	Вариант матричной факторизации
РОЗ-IV, V [27]	Интерполяционный	То же	Итерации с ускорением по методу средних потоков

Известно полуаналитическое решение двумерной задачи переноса для точечных изотропного и мононаправленного источников, размещенных в одномерном плоском слое [57]. При этом односкоростное кинетическое уравнение с изотропным рассеянием, записанное в интегральной форме, с помощью преобразования Фурье – Лапласа сводится к одномерному интегральному уравнению с разностным ядром, преобразуемому далее в сингулярное интегральное уравнение, которое решается стандартными методами.

Разработан также подход к применению метода Кэйса для вычисления скалярного потока нейтронов в среде трехмерной геометрии произвольной конфигурации с изотропным рассеянием [58].

К полуаналитическим методам можно отнести также методы использования функции Грина для бесконечной однородной среды при решении задач для ограниченных сред, в том числе двумерных [59-61]. При этом для учета влияния соседних сред на границах размещаются фиктивные поверхностные псевдоисточники. Точность алгоритма и затраты вычислительного времени оказываются примерно такими же, как в методе сферических гармоник.

В задачах теории защиты реакторов (как и теории самих реакторов) одним из средств получения удобных для счета приближенных уравнений являются вариационные принципы [62]. Эти принципы могут быть сформулированы как для самого решения [20, 43], так и для всякого рода его интегральных характеристик [63]. Такие методы, в частности, используются при синтезировании решений в многомерных областях сложной конструкции, когда в качестве основных функций берутся результаты, полученные из расчетов задач с меньшей размерностью (синтетические методы) [62-65].

Простейшим вариантом синтетических методов является метод условного разделения переменных, который оказался весьма эффективным при решении задач [36]. При использовании этого метода предполагается, что функциональную зависимость потока нейтронов от координат можно представить в виде

$$F_0(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (11)$$

Этот метод в несколько обобщенном виде также успешно используется при решении одномерных уравнений в плоской, сферической и цилиндрической геометрии: при разделении пространственной и угловой переменной в пределах каждой зоны [66, 67].

Такой метод перспективен и для решения не одномерных задач [65, 68]. Алгоритм расчета нейтронных полей строится на предположении, что пространственные составляющие нейтронного поля разделяются в каждой зоне. При этом синтезируемые решения имеют разрывы на границах. Эти разрывы за счет некоторого усложнения алгоритма можно исключить, используя идеи работы [64].

В общем случае в трехмерных диффузионных задачах при использовании многогруппового синтетического метода поток нейтронов

каждой группы $F_0^i(x, y, z)$ представляют в виде суммы M известных функций $\varphi_m^i(x, y)$ с неизвестными коэффициентами, зависящими от z :

$$F_0^i(x, y, z) = \sum_{m=1}^M A_m^i(z) \varphi_m^i(x, y), \quad (12)$$

где M – число зон. Функции $\varphi_m^i(x, y)$ считаются известными из двумерных расчетов, которые в свою очередь, могут быть проведены синтетическим методом, т.е. с использованием известных результатов одномерных расчетов. При таком способе имеется $M \times I$ неизвестных. Возможны разновидности этого метода, например значения неизвестных выбираются одинаковыми для некоторых комплексов групп, в пределе одними и теми же для всех групп. Таким образом, число неизвестных сокращается.

Решение неодномерных задач переноса для углового потока нейтронов синтетическим методом оказывается существенно более сложным, чем решение диффузионных задач, хотя при этом используются те же принципы. Проиллюстрируем применение синтетического метода для задач переноса в (x, y) – геометрии в приближении дискретных ординат [64]. Запишем для этого случая уравнение (1) для углового потока нейтронов $F_n(x, y) = F(x, y, \Omega_n)$ в направлении Ω_n по форме, близкой к уравнению (7) (для простоты индекс группы опустим):

$$\Omega_n \nabla F_n(x, y) + \Sigma(x, y) F_n(x, y) = \sum_{n'} a_{n'} \sum_{s, m'} F_{n'}(x, y) + B_n(x, y) \quad (13)$$

Будем искать приближенное решение в следующем виде:

$$F_n(x, y) = \sum_{m=1}^M A_{m,n}(x) Y_{m,n}(y) \quad (14)$$

Аппроксимирующие функции $A_{m,n}(x)$ определяются из одномерных расчетов. Подставим выражение (14) в уравнение (13) и будем умножать результат поочередно на некоторые весовые функции $W_n^p(x)$, интегрируя затем по x . В итоге получим систему уравнений для функций $Y_{m,n}(y)$. Запишем ее в векторной форме для вектор-функции

$$Y_n(y) = \begin{bmatrix} Y_{l,n}(y) \\ \vdots \\ Y_{m,n}(y) \end{bmatrix} :$$

$$\begin{aligned} & \left[(j\Omega_n) \int W_n^p(x) A_{m,n}(x) dx \right] \frac{d}{dy} Y_n(y) + \left\{ \left[(i\Omega_n) \int W_n^p(x) \frac{d}{dx} A_{m,n}(x) dx \right] + \right. \\ & \left. + \left[\int W_n^p(x) \Sigma(x, y) A_{m,n}(x) dx \right] \right\} Y_n(y) = \end{aligned}$$

$$= \sum_{n'} a_{n'} \left[\int W_n^p(x) \Sigma_{s,n'}(x, y) A_{m,n}(x) dx \right] Y_{n'}(y) + \int W_n^p(x) B_n(x, y) dx. \quad (15)$$

Наиболее употребительны два метода выбора весовых функции: метод Галеркина – весовая функция совпадает с аппроксимирующей и вариационный – весовая функция представляет сопряженный поток, в то время как аппроксимирующая функция описывает поток нейтронов. Оба метода дают примерно одинаковую точность, но метод Галеркина оказывается более экономичным.

Кроме того, при использовании вариационного метода выбора весовых функций гораздо чаще встречаются случаи, когда решение задачи в широко распространенном в практике приближении, не учитывающем в формуле (12) зависимость коэффициентов A_m от номера группы, испытывает абсурдные с физической точки зрения знакопеременные колебания даже для скалярного потока нейтронов [69].

Трудоемкость решения неодномерных задач сильно увеличивается по мере возрастания углового приближения, т.е. при переходе от диффузионного рассмотрения к более точному. Это характерно и при применении различных синтетических методов, в основе которых могут лежать как метод условного разделения переменных, так и более общие подходы. Тем не менее, хотя синтетические методы до настоящего времени из-за трудоемкости не получили широкого развития при решении неодномерных задач переноса для углового потока нейтронов, в будущем они, по-видимому, явятся наиболее универсальными методами, пригодными для достаточно корректного расчета протяженных защит сложной композиции с трехмерной геометрией. Единственным исключением являются специальные модификации метода Монте-Карло, однако этот метод не позволяет рассчитать поле нейтронов во всем объеме защиты, что необходимо для расчета интенсивности вторичного γ -излучения. При этом следует отметить, что существенный недостаток синтетических методов – отсутствие удовлетворительной оценки ошибок. Поэтому для достижения уверенности в синтетическом методе необходимо сравнение с результатами более точных методов и с экспериментальными данными.

Из возможных применений синтетического метода, еще следует отметить пространственно-энергетический синтез [70], когда в качестве известных аппроксимирующих функций выбираются энергетические распределения нейтронов и ищутся пространственно-угловые распределения. Кроме того, синтетические методы могут быть использованы для ускорения сходимости итерационных процессов при решении неодномерных задач, например S_N -методом [71].

По существу, применением одного из вариантов синтетического метода к трехмерной задаче является сочетание асимптотического представления потока по двум пространственным координатам с использованием метода Кэйса по третьей координате [72].

Следует отметить, что идея пространственно-углового синтеза может быть использована, в частности, для обеспечения нестандартного подхода при выводе уравнения переноса в приближении дискретных ординат [73]. При этом аппроксимирующие функции выбираются как ступенчатые функции по направлению. Более того, ориентируя эти ступенчатые функции по-разному в прилегающих пространственных ячейках, можно легко получить уравнения дискретных ординат, относительно свободные от так называемых лучевых эффектов (Эти эффекты характерны для расчетов методом дискретных ординат и состоят в пространственных колебаниях потока в задачах с локализованными источниками [74]. Обычно с лучевыми эффектами борются путем использования густых угловых сеток, что приводит к существенному возрастанию вычислительного времени, или специальных угловых сеток, при выборе которых используется качественная картина предполагаемого решения [75].)

Отечественные программы расчета защиты, основанные на решении уравнения переноса

К настоящему времени из отечественных вычислительных программ расчета многослойной защиты, использующих решение уравнения переноса излучения, наибольшую известность получил комплекс программ РОЗ («Расчет одномерной защиты») в плоской геометрии [2, 27]. Работа над этим комплексом была начата в 1959 г., и в его создании участвовал большой коллектив. В табл. 2 приведены параметры различных программ РОЗ.

Таблица 2

Параметры программ РОЗ

Программа	Тип ЭВМ	Год создания	$N_{\text{макс}}$	$L_{\text{макс}}$	$I_{\text{макс}}$	$K_{\text{макс}}$	Ограничения	Максимальное число веществ	Пространственная зависимость	Индикатриса	Метод решения
РОЗ-0	БЭСМ-4 (М-20)	1964	26	26	1	128	900	7	Линейная	P_L	Альбедный
РОЗ-I	БЭСМ-4 (М-20)	1963	7	7	16*	204	340	6*	»	P_L	»
РОЗ-II	Минск-2 (22)	1966	12	12	21	99	576	6	Интегрирование вдоль характеристики	P_L	»
РОЗ-III	М-20	1967	12	12	16	-	62	5	То же	P_L , дискретная	»
РОЗ-IV	Минск-22	1968	17	17	27	150	700	20	»	P_L , дискретная	Итерационный
РОЗ-V	БЭСМ-6	1969	26	50	30	200	800	20	»	P_L , дискретная	»

*В программе РОЗ-I допускается также возможность расчета при $I_{\text{макс}}=21$. В этом случае максимальное число веществ равно четырем.

При использовании программ РОЗ предполагалось, что защита имеет многослойную гетерогенную структуру, т.е. состоит из различных зон. Эти зоны однородны по своему составу и могут содержать несколько веществ,

каждое из которых характеризуется групповыми константами \sum^i и $\sum_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$. Константы могут относиться либо к нейтронам, либо к γ -квантам, и соответственно одни и те же программы используются для расчета полей нейтронов и полей γ -квантов. Внешнее по отношению к защите излучение описывается δ -функцией $\delta(\mu - \mu_0)$ или заданной функцией $q^i(\mu, \varphi)$. Максимальное число пространственных узлов конечно-разностной схемы обозначены $K_{\text{макс}}$, а максимальное число групп $I_{\text{макс}}$. Для каждого углового интервала $[-1,0]$, $[0,1]$ задается N дискретных значений μ_n .

Одним из способов задания индикатрисы рассеяния является так называемое P_L -представление. Например, для нейтронов:

$$\sum_s^{j \rightarrow i}(r, \mu_s) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{s,l}^{j \rightarrow i}(r) P_l(\mu_s). \quad (16)$$

Вопросы получения групповых констант $\sum_{s,l}^{j \rightarrow i}$ для нейтронов рассматриваются, например, в работах [1, 2, 76, 77], а для γ -квантов – в работе [78]. Далее $2D_N P_L$ -приближением будем называть приближение, при котором угловой поток излучения рассматривается в $2N$ узлах μ_n , а для индикатрисы используется P_L -представление.

Существуют, однако, задачи, например расчет угловых распределений нейтронов с большой энергией ($E > 7$ МэВ), особенно в водосодержащих материалах [79]; расчет угловых распределений γ -квантов в защитах; корректный расчет прохождения нейтронов в средах с резко выраженной резонансной структурой сечений [2], когда из-за плохой сходимости P_L -приближения индикатрисы рассеяния результаты расчетов в $2D_N P_L$ -приближении иногда оказываются неудовлетворительными, а в некоторых случаях получаются даже с отрицательным знаком. Особенно существенные неприятности при наличии отрицательных участков индикатрис встречаются в расчетах методом дискретных ординат при применении итерационных способов решения, в частности при использовании программ РОЗ-IV и РОЗ-V. Такие случаи характеризуются заметным ухудшением сходимости итерационного процесса, иногда вплоть до расходимости.

В качестве одной из мер улучшения характера индикатрис была рассмотрена так называемая отсечка отрицательных участков индикатрисы, когда, исходя из физического смысла сечений значения $\sum_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) < 0$, принимаются равными нулю. Таким образом, подправленные сечения $\tilde{\sum}_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ всегда положительны:

$$\tilde{\sum}_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) = d \cdot \frac{\sum_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) + \left| \sum_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) \right|}{2}, \quad (17)$$

где d – коэффициент перенормировки, выбираемый из условия сохранения интеграла индикатрисы по углу:

$$\int_{-1}^{+1} d\mu_s \Sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) = \int_{-1}^{+1} d\mu_s \tilde{\Sigma}_s^{j \leftarrow i}(\mu_s). \quad (18)$$

Такое представление было названо P_L -приближением индикатрисы рассеяния.

Другой способ улучшения характера индикатрис заключается в переходе от разложений (16) функции $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ к ее суммам Фейера

$$\tilde{\Sigma}_s^{j \rightarrow i}(\mu_s) = \sum_{l=0}^L \frac{L+1-l}{L+1} \cdot \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}^{j \rightarrow i} P_l(\mu_s). \quad (16a)$$

При этом используется равномерная сходимость последовательности сумм (16a) к индикатрисе $\Sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ (теорема Гронуола в теории сферических функций). Расчеты прохождения γ -квантов ($E_\nu > 9$ МэВ) с индикатрисами (16a) и (17) при $L \geq 7$ показали примерно одинаковую точность.

Однако более эффективным оказался переход к так называемому дискретному представлению индикатрисы рассеяния – заданию ее в виде таблицы чисел в узлах $\mu_{s,n}$. В частности, для упругого рассеяния на ядрах с массовым числом A [2].

$$\Sigma_{cl}^{j \rightarrow i}(\mu_s) = \frac{\beta_{ji}(\mu_s) \int_{E_{j \rightarrow i}} dE' \Sigma_{el}(E', \mu_s) \varphi(E')}{\int_{E_j} dE' \varphi(E')} \quad (19)$$

при

$$a_{ji}(\mu_s) = \max \left\{ \frac{E_i}{g(\mu_s)}, E_j \right\};$$

$$\beta_{ji}(\mu_s) = \min \left\{ \frac{E_{i-1}}{g(\mu_s)}, E_{j-1} \right\};$$

$$g(\mu_s) = \frac{1}{(A+1)^2} \left[(A^2 - 1 + \mu_s^2)^{\frac{1}{2}} + \mu_s \right]^2,$$

где $\Sigma_{el}(E', \mu_s)$ - дифференциальное угловое сечение упругого рассеяния нейтронов энергии E' ; $\varphi(E)$ - спектр, по которому проводится усреднение. В частности, для ядер водорода

$$\left. \begin{aligned} \sum_{el}^H(E', \mu_s) &= \sum_s^H(E') \frac{\mu_s + |\mu_s|}{2\pi}; \\ g^H(\mu_s) &= \mu_s^2. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

В качестве примера с помощью программы РОЗ-V были проведены пятигрупповые расчеты распределений быстрых нейтронов с $E > 1,4$ Мэв в плоской одномерной протяженной среде, состоящей из ядер водорода (полностью $0,111$ г/см³) и облучаемой широким изотропным пучком нейтронов спектра водо-водяного реактора. Решения в различных приближениях были сравнены с результатами расчетов в $2D_{12}$ – приближении потока и индикатрисы рассеяния, с использованием констант, полученных по формулам (19) и (20). При этом в качестве усредняющего спектра $\varphi(E)$ был принят равновесный спектр нейтронов в бесконечной водородной среде с источниками нейтронов деления. Оказалось, что расчеты в $2D_{12}P_{12}$ - и $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ -приближениях систематически занижают значения потока, причем их погрешность возрастает с расстоянием.

На расстоянии $x=100$ см от облучаемой поверхности погрешность расчетов скалярного потока $2D_{12}P_{12}$ - приближении составляет 10%, а в $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ -приближении $\sim 15\%$. Кроме того, были проведены дополнительные расчеты в $2D_{12}$ -приближении, в которых использовались константы, полученные по формулам (19) и (20) при $\varphi(E) = 1/E$; для каждой группы принималось $\sum_s^H(E') = const$. Такое приближение позволяет провести аналитическое интегрирование в формуле (19) и оказывается довольно хорошим для нейтронов с энергией $E < 1$ Мэв. (Далее будем называть его $2D_{12}^*$ -приближением.) Что касается нейтронов с $E > 1$ Мэв, где спектр сильно отличается от спектра Ферми, то $2D_{12}^*$ -приближение для них приводит к заметному завышению значений скалярного потока нейтронов, возрастающему при удалении от источника. На расстоянии $x=100$ см в водороде погрешность $2D_{12}^*$ -приближения для скалярного потока около 50%.

Погрешность этих приближений для углового потока нейтронов оказывается гораздо большей. На рис. 2 приведено относительное угловое распределение потока нейтронов $F_{омн}(\theta) = F(\theta) / F_0$ [нормировка $\int F_{омн}(\theta) \sin \theta d\theta = 1$ при $x=100$ см, получено $2D_{12}$ -приближении]. Угловое распределение оказывается чрезвычайно вытянутым в направлении вперед. Коэффициент неравномерности углового распределения оказывается равным $F(\theta = 0^\circ) / F(\theta = 180^\circ) > 10^5$, а отношение $F(\theta = 0^\circ) / F(\theta = 90^\circ) > 50$. На рис. 2 проведено также сравнение расчетов углового потока в $2D_{12}$ – приближении, являющемся наиболее точным из всех рассмотренных, с другими приближениями.

Как видно, погрешность этих распределений существенно увеличивается с возрастанием угла θ . Наименьшей абсолютной погрешностью в относительном угловом распределении при $\theta < 150^\circ$ обладают расчеты в $2D_{12}P_{12}$ -приближении; при $\theta < 120^\circ$ их погрешность не превышает 20%. Однако для этого приближения при $\theta > 50^\circ$ характерно немонотонное отличие от точного решения, причем отклонения отношения решений от монотонной кривой около 3%. Кроме того, для углов $\theta > 100^\circ$ в некоторых группах появляются отрицательные значения угловых потоков (для суммарного углового потока нейтронов с $E > 1,4$ Мэв при $\theta > 150^\circ$). Такое поведение решения в $2D_{12}P_{12}$ -приближении связано с неточностью

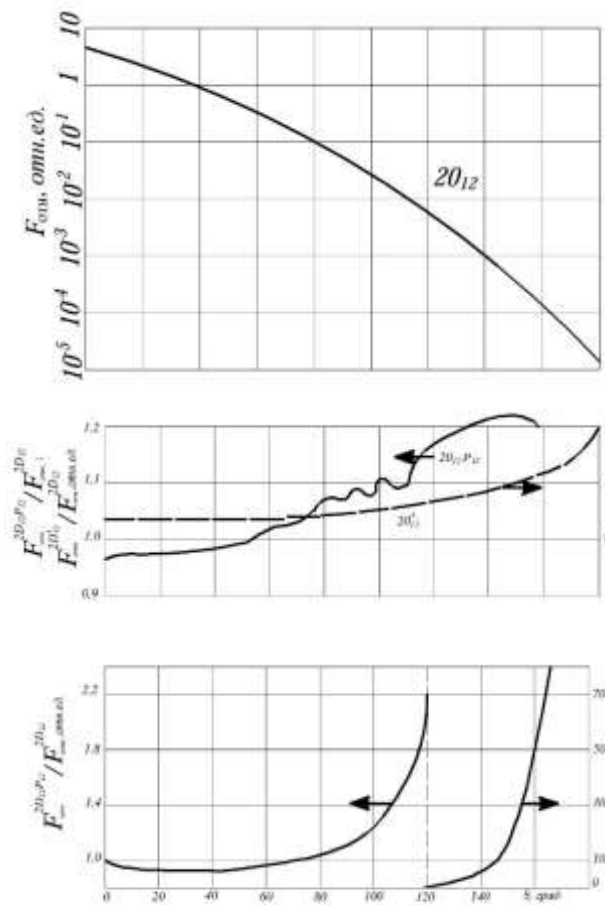


Рис.2. Относительное угловое распределение нейтронов с энергией $E > 1,4$ Мэв в водородной среде на расстоянии $x=100$ см от облучаемой поверхности.

описания индикатрисы рассеяния на ядрах водорода P_{12} -представлением. В частности, дифференциальные сечения рассеяния $\sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ в P_{12} -приближении оказываются отрицательными для некоторых углов рассеяния $\theta_s > 50^\circ$, а величины $\sigma_s^{j \rightarrow i}(\mu_s)$ при $j \neq i$ могут быть отрицательны даже при $\theta > 20^\circ$. Переход к \tilde{P}_{12} -представлению индикатрисы рассеяния устраняет колебания решения, однако погрешность углового потока в области больших углов резко возрастает (завышение точного решения менее чем на 20% при θ

$<90^\circ$, более чем в два раза для $\theta > 120^\circ$ и в несколько десятков раз при $\theta > 150^\circ$). Для расчетов $2D_{12}^*$ -приближении, отличающемся от точного лишь способом усреднения сечений, характерна погрешность (завышение) в относительном угловом распределении в несколько раз при $\theta > 120^\circ$. Что касается направлений от источника излучения ($\theta < 90^\circ$), то погрешность этого приближения для быстрых нейтронов в этом случае не превышает 40%.

Следующий пример относится к расчету плоской одномерной однородной водяной защиты водо-водяного реактора. На рис.3 приведено пространственное распределение быстрых нейтронов с энергией $E > 1,4$ Мэв,

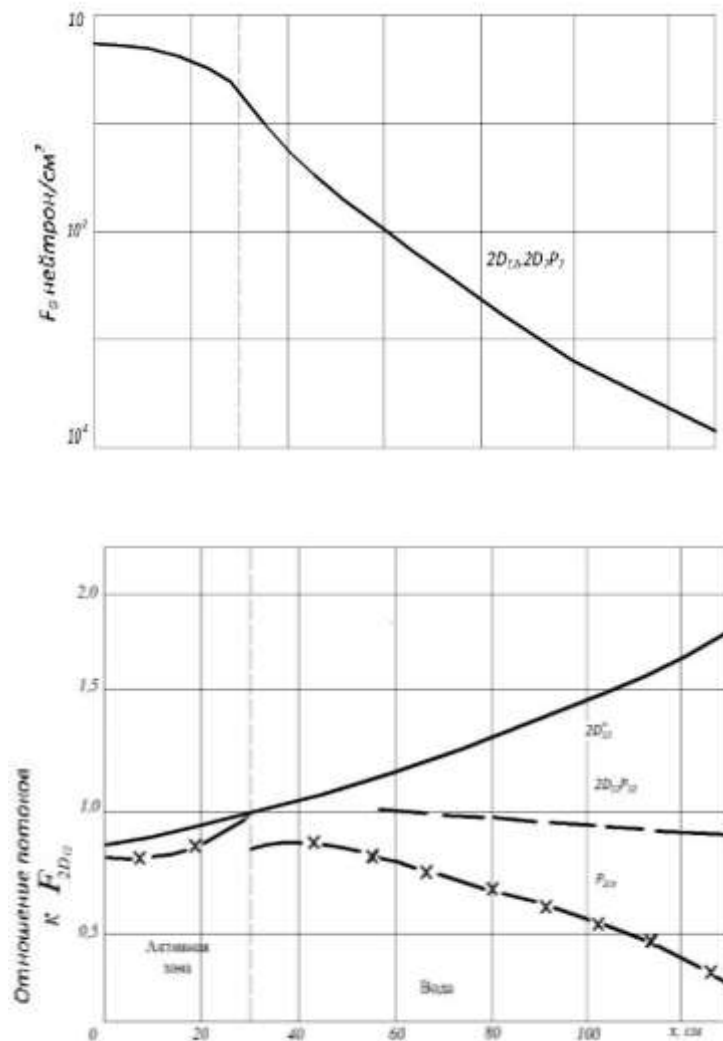


Рис. 3. Пространственное распределение потока быстрых нейтронов с энергией $E > 1,4$ Мэв в водяной защите толщиной 100 см водо-водяного реактора полутолщиной 30 см (нормировка на 1 нейтрон деления в 1 см^3 в центре активной зоны).

рассчитанное в пятигрупповом рассмотрении в различных приближениях. Как видно, характер пространственного распределения несколько отличается от экспоненциального. Для всех элементов активной зоны, кроме водорода, а

также для кислорода водяной защиты во всех случаях использовалось P_L -представление индикатрисы рассеяния (при $L=N$). Что касается водорода, то для него были использованы различные приближения. (Здесь и повсюду ниже в настоящей работе для краткости будем характеризовать приближение индикатрисы рассеяния именно по водороду).

Результаты расчетов в $2D_7P_7$ -приближении для скалярного потока нейтронов практически совпадают с данными в $2D_{12}$ -приближении. Погрешность $2D_{12}^*$ - и $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ -приближений метода дискретных ординат систематически возрастает с удалением от активной зоны. Как и в водороде, $2D_{12}^*$ -приближение завышает значение потока нейтронов (на расстоянии 100 см от активной зоны свыше двух раз). Довольно малой погрешностью для скалярного потока обладает $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ -приближение (на расстоянии 100 см около 10%). Значения скалярного потока в $2D_7\tilde{P}_7$ -приближении оказались практически совпадающими с результатами $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ -приближения. На рис. 3 проведено также сравнение с данными расчетов в $P_{2,tr}$ -приближении метода сферических гармоник, до сих пор часто используемого при расчетах защиты реакторов [80]. Погрешность $P_{2,tr}$ -приближения также монотонно возрастает с удалением от активной зоны, и на расстоянии 100 см от точного решения – около 5 раз. Характерной особенностью P_2 -приближения является наличие разрыва решения на границах раздела различных материалов. В частности, в рассматриваемом примере решение задачи, полученное в $P_{2,tr}$ -приближении, отличается от точного на границе активной зоны примерно на 20%.

Что касается относительных угловых распределений суммарного потока быстрых нейтронов в водяной защите реактора, то погрешность различных приближений при их расчете оказывается несколько меньше, чем в рассмотренном выше случае водорода. В частности, погрешность $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ и $2D_7\tilde{P}_7$ -приближений во всей области изменения углов оказывается меньше 20%. Наибольшей погрешностью из рассмотренных приближений в угловых распределениях в воде обладают $2D_{12}P_{12}$ -, $2D_7P_7$ и $2D_{12}^*$ -приближения (при $\theta > 150^\circ$ в пределах 20-80%).

Таким образом, P_L -представление индикатрисы рассеяния при расчете нейтронных полей в воде оказывается несколько точнее \tilde{P}_L -представления при получении скалярного потока нейтронов, но несколько хуже при получении углового потока при больших углах ($\theta > 90^\circ$). Интересно отметить весьма слабое отличие результатов расчетов в $2D_{12}P_{12}$ - и $2D_7P_7$ -приближениях между собой, а также в $2D_{12}\tilde{P}_{12}$ и $2D_7\tilde{P}_7$ -приближениях как для скалярного, так и для углового потока нейтронов.

Помимо возрастания погрешности расчетов с удалением от источника $P_{2,tr}$ -приближение характеризуется существенной погрешностью для случаев гетерогенных композиций, состоящих из слоев малой толщины. Для примера было исследовано распределение быстрых нейтронов в плоском одномерном макете внутрикорпусной защиты водо-водяного реактора, корпусе и закорпусной водяной защите. Сравнение результатов расчетов в различных приближениях приведено на рис. 4. Погрешность расчетов потока нейтронов в $P_{2,tr}$ -приближении в воде внутрикорпусной защиты в среднем более 70%, в железных экранах – от 50 до 100%, в зависимости от расстояния, в корпусе – более 100% и далее систематически возрастает в водяной защите.

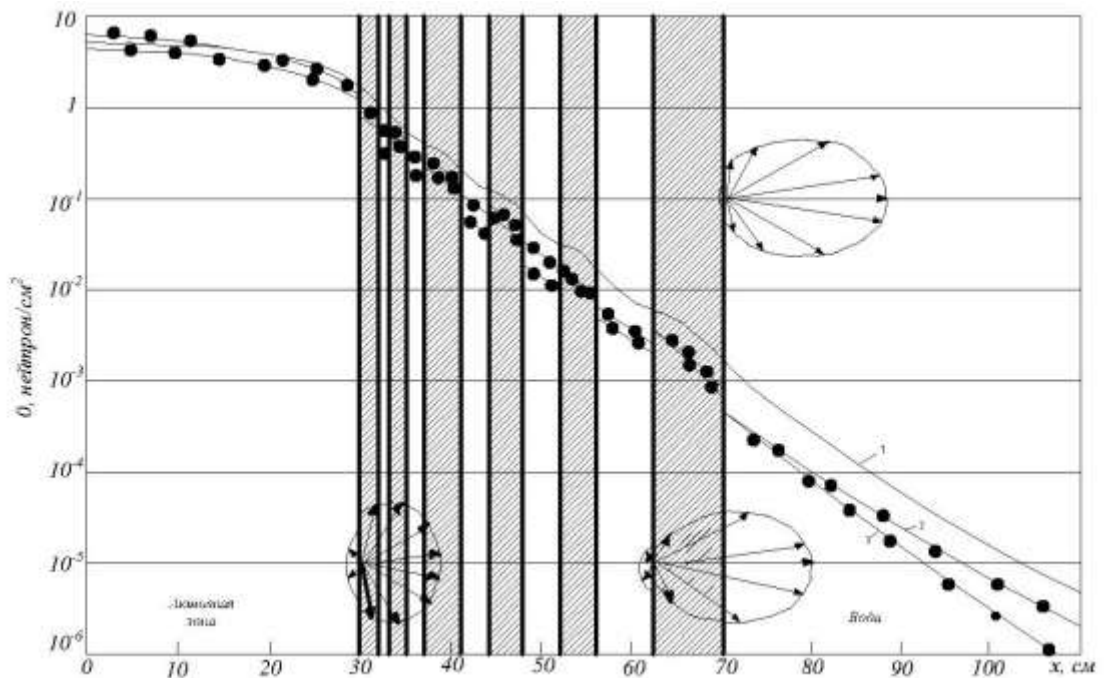


Рис. 4. Распределение потока быстрых нейтронов с энергией $E > 1,4 \text{ МэВ}$ в многослойной железо-водной защите водо-водяного реактора (2 см Fe+1 см H₂O+2 см Fe+2 см H₂O+ 4 см Fe+ 3 см H₂O+4 см Fe+4 см H₂O+4 см Fe+6 см H₂O+ 8 см Fe+ 50 см H₂O) (заштрихованы слои железа; нормировка результатов на 1 нейтрон деления в 1 см³ в центре активной зоны): 1-расчеты в $2D_{12}$ -приближении; 2- расчет в P_2, tr -приближении; 3- расчеты в P_2, tr -приближении с «поправленными» константами.

Гистограммы показывают относительные угловые распределения потока быстрых нейтронов из активной зоны, падающих на толстый слой железа и вылетающих из него (нормировка на одинаковую интенсивность тока нейтронов).

Расчеты в $2D_{12}$ - и $P_{2,tr}$ -приближениях были выполнены с помощью системы констант, базирующейся на данных работы [81]. В практике расчетов защиты получила применение также 21-групповая система констант

[82], в которой константы водородсодержащих материалов специальным образом подправлены с учетом экспериментальных данных по возрасту нейтронов и расчетных данных, полученных методом моментов [83]. Расчеты в $P_{2,tr}$ -приближении по этой системе констант оказываются более точными на больших расстояниях от активной зоны (более 40 см), но описывают распределение нейтронов в многослойной гетерогенной защите хуже, чем 26-групповая система констант [81]. Разрывы потока на границах зон увеличиваются. При этом возрастает погрешность расчетов потока в тонких водяных прослойках, и отличие от точного решения может быть в 2-3 раза.

На рис. 4 приведены также угловые распределения потока быстрых нейтронов, полученные в $2D_{12}$ -приближении. Показаны угловые распределения на границе активной зоны и на внутренней и внешней поверхностях толстого слоя железа, имитирующего корпус реактора. Как видно, с удалением от активной зоны угловое распределение становится все более вытянутыми в направлении вперед. При этом слои железа несколько увеличивают долю нейтронов в интервале углов $50^\circ < \theta < 90^\circ$.

Угловое распределение нейтронов в каждой точке в направлении назад сильно зависит от того, какой материал дальше следует. В частности, относительная интенсивность отраженного излучения от последующего слоя железа существенно больше, чем для воды.

При расчетах защиты реакторов необходимо учитывать, что существующие до сих пор программы РОЗ предназначены для расчета полей излучения в неразмножающих средах. Поэтому в случае наличия активной зоны в рассматриваемой композиции при расчете по программе РОЗ-II, IV, V, допускающим задание внутренних источников излучения, присутствие размножающих материалов учитывается приближенным образом. А именно при составлении групповых констант для урана считается, что нейтроны, родившиеся при делении ядер нейтронами данной группы, либо частично остаются в этой группе, либо рождаются с более низкими энергиями [84]. Таким образом, погрешность состоит в том, что при делении ядер нейтронами какой-либо энергии вторичным нейтронам более высоких энергий приписывается эта же энергия. Однако эта погрешность мала, поскольку неучтенная таким образом часть потока быстрых нейтронов существенно меньше потока быстрых нейтронов, образованного их источниками, распределение которых (полученное с помощью реакторных программ [36]) задается. Все это подтверждается сравнением спектров нейтронов в активной зоне, полученных разными методами. Кроме того, в дальнейшем в программе РОЗ-V предполагается обобщить алгоритм на случай размножающих сред.

Программы РОЗ-II, IV, V позволяют получить решение не только прямой, но и сопряженной задачи. Наличие в этих же программах возможности задания внутренних источников позволяет рассчитывать интенсивности источников вторичного γ -излучения и последующие расчеты распределения полей этого излучения. Во всех программах допускаются

композиции с максимальным числом зон, равным 20 (кроме РОЗ-III, где это число равно 5). Специализированная программа РОЗ-III в результате расчета одного варианта наряду с интенсивностью пропущенного излучения позволяет получать значения матриц отражения $R^{j \rightarrow i}(\mu, \mu', \varphi, \varphi')$ последовательность плоских слоев возрастающей толщины h . Элементами матриц являются значения дифференциального, углового и энергетического альbedo (потокowego) этих слоев.

Программы РОЗ-IV, V предусматривают возможность задания на границах защиты альбедных краевых условий типа (2). Первые четыре программы (0, I, II, III) используют альбедный метод решения задачи (7), последующие – итерационный с ускорением по методу средних потоков. Программы РОЗ-IV и РОЗ-V позволяют проводить комплексные расчеты прямых и сопряженных задач, например расчеты сопряженных функций для нейтронов с учетом вторичного γ -излучения. При этом вычисляются различные интегралы теории возмущений, скажем, градиенты дозы при изменении толщин слоев или концентраций отдельных веществ. В этих программах возможно использование как P_L -представления (16), так и дискретного представления функции сечения рассеяния (19). Такая же возможность, правда, лишь для нейтронов, не выбывающих из данной группы $\left[\sum_s^i(\mu_s) \right]$, предусмотрена в программе РОЗ-III.

В первых двух программах (0 и I) предполагается линейная пространственная зависимость потока между узлами конечно-разностной схемы, а в последующих программах на интервале между этими узлами проводится интегрирование уравнения переноса вдоль характеристик его дифференциальной части.

Все программы РОЗ наряду с расчетом пространственных, энергетических и угловых распределений потоков излучения позволяют рассчитывать всевозможные энергетические и угловые интегралы от этих распределений – токовых и дозовых величин, энергетических спектров, полных потоков, факторов накопления и т.п.

Для расчета групповых констант $\sum_{s\gamma}^{p \rightarrow i}(\mu_s)$, описывающих дифференциальные сечения рассеяния γ -квантов, проводится интегрирование по энергии известной формулы Клейна-Нишины-Тамма. При этом в качестве переменной обычно выбирают не энергию γ -квантов E , а соответствующую длину волны, выраженную в комптоновских единицах $\lambda = 0.511 / E_\gamma$, где E_γ измеряется в мегаэлектронвольтах. Выражение групповых констант, описывающих рассеяние γ -квантов, имеет вид, близкий к аналогичной формуле (19) для нейтронов:

$$E_{s(\gamma)}^{p \rightarrow t}(\mu_s) = \frac{1}{\int_{\lambda_{p-1}}^{\lambda_p} d\lambda' \varphi(\lambda')} \int_{\lambda_{p-1}}^{\lambda_p} d\lambda' \varphi(\lambda') \int_{\lambda_{t-1}}^{\lambda_t} d\lambda k(\lambda' \rightarrow \lambda) \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu_s), \quad (21)$$

где $k(\lambda' \rightarrow \lambda) = \frac{n_0 r_0^2}{2} \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \left[\frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} - 1 + (1 - \lambda' - \lambda)^2 \right]$ при $\lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2$, вне этой области функция $k(\lambda' \rightarrow \lambda) = 0$; n_0 – число электронов в единице объёма; $r_0 = 2,82 \cdot 10^{-13}$ см – классический радиус электрона; $\varphi(\lambda')$ – спектр γ -квантов, по которому производится усреднение. В предположении постоянства спектра $\varphi(\lambda')$ внутри каждой группы можно получить аналитические выражения для групповых констант. В частности, при $\Delta\lambda_p > \Delta\lambda_t$ ($\Delta\lambda_p = \lambda_p - \lambda_{p-1}$):

$$\Sigma_{s(\gamma)}^{p \rightarrow t}(\mu_s) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\lambda_p} \left[\varphi(\lambda_p + 1 - \mu_s, \mu_s) - \varphi(\lambda_{t-1}, \mu_s) \right] & (22a) \\ \text{при } b_{p,t} \leq \mu_s \leq b_{p,t-1}; \\ \frac{1}{\Delta\lambda_p} \left[\varphi(\lambda_t, \mu_s) - \varphi(\lambda_{t-1}, \mu_s) \right] & \text{при } b_{p-1,t-1} \leq \mu_s \leq b_{p,t}; & (22б) \\ \frac{1}{\Delta\lambda_p} \left[\varphi(\lambda_t, \mu_s) - \varphi(\lambda_{p-1} + 1 - \mu_s, \mu_s) \right] & (22в) \\ \text{при } b_{p-1,t} \leq \mu_s \leq b_{p-1,t-1}; \\ 0 & \text{при остальных } \mu_s, & (22г) \end{cases}$$

где

$$\varphi(\lambda, \mu_s) = \frac{n_0 r_0^2}{2} \left[(1 + \mu_s^2) \lambda - 2(1 - \mu_s)(1 + \mu_s^2) \ln \lambda - (1 - \mu_s)^2 (2 + \mu_s^2) \frac{1}{\lambda} + \frac{(1 - \mu_s)^3}{2} \cdot \frac{1}{\lambda^2} \right];$$

$$b_{p,t} = \max \left[1 + \lambda_t - \lambda_p; -1 \right].$$

В случае $\Delta\lambda_p < \Delta\lambda_t$ получаются весьма близкие к (22а)-(22г) по форме выражения. В частности, формула (22а) справедлива при $b_{p-1,t-1} \leq \mu_s \leq b_{p,t-1}$;

формула (22в) справедлива при $b_{p-1,t} \leq \mu_s \leq b_{p,t}$. При $\Delta\lambda_p > \Delta\lambda_t$ в интервале $b_{p,t} \leq \mu_s \leq b_{p-1,t-1}$ справедлива следующая формула:

$$\sum_{s(\gamma)}^{p \rightarrow t} (\mu_s) = \frac{1}{\Delta\lambda_p} \left[\varphi(\lambda_p + 1 - \mu_s, \mu_s) - \varphi(\lambda_{p-1} + 1 - \mu_s, \mu_s) \right]. \quad (22д)$$

P_L -представление типа (16) для функции сечения рассеяния γ -квантов можно получить разложением формул (22а)-(22д) по полиномам Лежандра.

Для проведения расчетов по программам РОЗ создана специальная система групповых констант для быстрых нейтронов, описанная в работе [2]. Для нейтронов промежуточных энергий обычно использовались групповые константы из работы [81], для тепловых нейтронов – из работы [85].

С целью установления степени соответствия составленных групповых констант макроэкспериментам с помощью программ РОЗ проведены расчеты большого количества экспериментов. Например, $2D_7P_7$ -приближении рассчитаны угловые энергетические распределения быстрых нейтронов за защитными однородными барьерами различной толщины, облучаемыми плоским мононаправленным пучком нейтронов реакторного спектра. Рассмотрены различные защитные материалы: железо, вода, карбид бора и др. [2]. В большинстве случаев расхождение экспериментальных и расчетных данных в угловых энергетических распределениях при ослаблениях $\sim 10^5$ - 10^6 не превышает 20-30%. Имеются лишь отдельные случаи, например для карбида бора при $2,5 < E < 4$ Мэв, где расхождение доходит до двух раз. В этих случаях необходима некоторая корректировка констант.

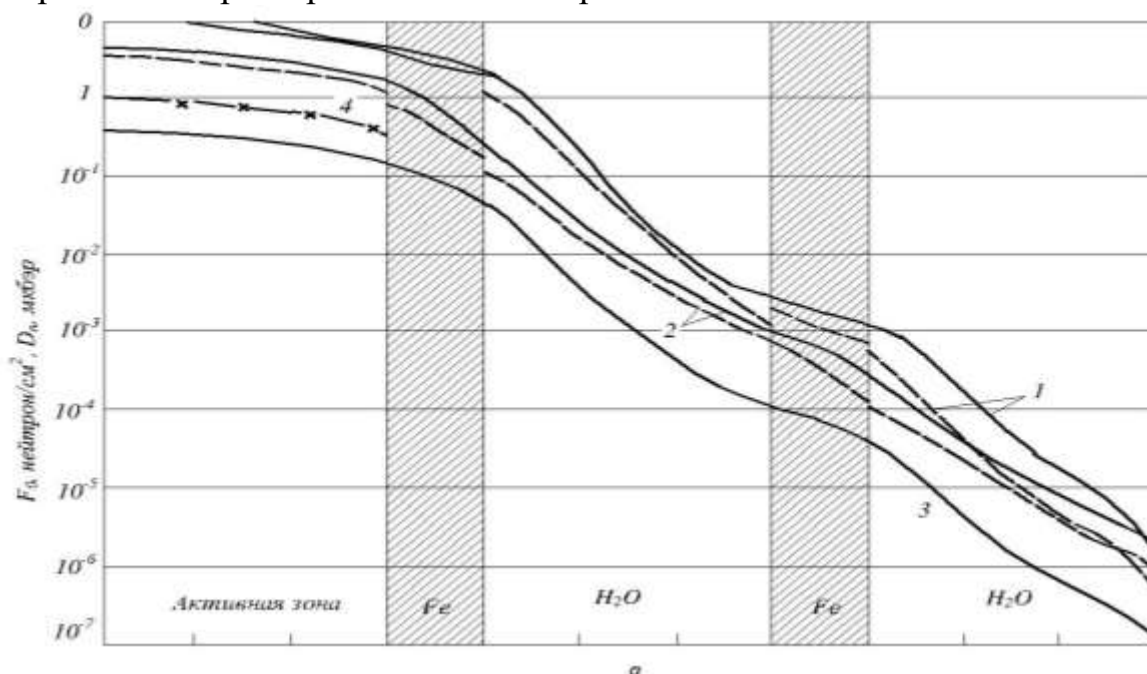
Проведены расчеты и сравнение с экспериментом по прохождению нейтронов промежуточных энергий через различные защитные материалы [86]. Слои этих материалов приставлялись вплотную к конвертеру промежуточных нейтронов, представляющему собой толстый блок железа, облучаемый пучком нейтронов реакторного спектра. Рассчитаны также дифференциальные угловые энергетические альbedo быстрых нейтронов реакторного спектра для слоев железа и воды [3]. Во всех случаях получено удовлетворительное согласие экспериментальных и расчетных данных.

В качестве примера полного расчета нейтронных и γ -полей в защите реактора была рассмотрена гетерогенная железо-водная защита водородного реактора, состоящая из четырех слоев (композиция изображена на рис. 5). Результаты 27-групповых расчетов потоков нейтронов в $2D_{12}$ -приближении сравниваются с расчетами в $P_{2,tr}$ -приближении. Основное различие в данных по быстрым нейтронам накапливается в слоях воды, и погрешность $P_{2,tr}$ -приближения в какой-либо точке примерно такая же, как на соответствующем расстоянии в воде (см. рис. 3), т.е. при равенстве толщины воды. Характер распределения потока надтепловых нейтронов в гетерогенной защите существенно отличается от экспоненциального. Погрешность $P_{2,tr}$ -приближения при расчете потока надтепловых нейтронов

несколько выше, чем для быстрых нейтронов (на рассмотренных расстояниях до 300%, в то время как для быстрых нейтронов погрешность не превышает 200%).

Распределение поля γ -квантов в этой композиции (как γ -квантов рождаемых при делении, так и вторичных γ -квантов) было рассчитано в $2D_{12}$ -приближении с использованием констант, полученных по формулам (22а) - (22д). Расчеты проведены для 14 групп γ -квантов с разбиением на группы, принятым в работе [78]. Распределение источников вторичных γ -квантов рассчитывалось на основании данных, полученных из расчета потока нейтронов в $2D_{12}$ -приближении. Сечения радиационного захвата и неупругого рассеяния нейтронов, соответствующий выход γ -квантов деления, сечения для γ -квантов и другие параметры были взяты из работ [87,88]. Характер пространственного распределения γ -квантов в гетерогенной защите существенно отличается от экспоненциального.

Весьма интересен вопрос об угловых распределениях γ -квантов на границе раздела различных сред. Угловые распределения γ -квантов, приведенные на рис. 6, обнаруживают существенную анизотропию потока жестких γ -квантов ($E_\gamma > 1$ Мэв) на границе раздела железо-вода и довольно слабую анизотропию мягких γ -квантов ($E_\gamma < 1$ Мэв). Для угловых распределений γ -квантов на границе активной зоны в рассматриваемом примере также характерна малая анизотропия.



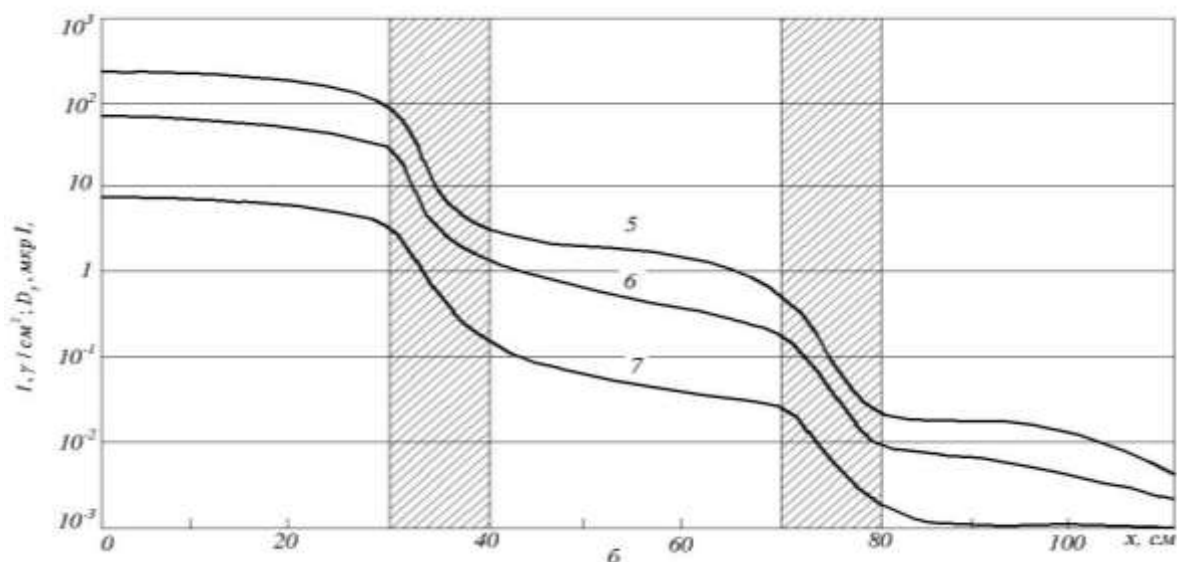
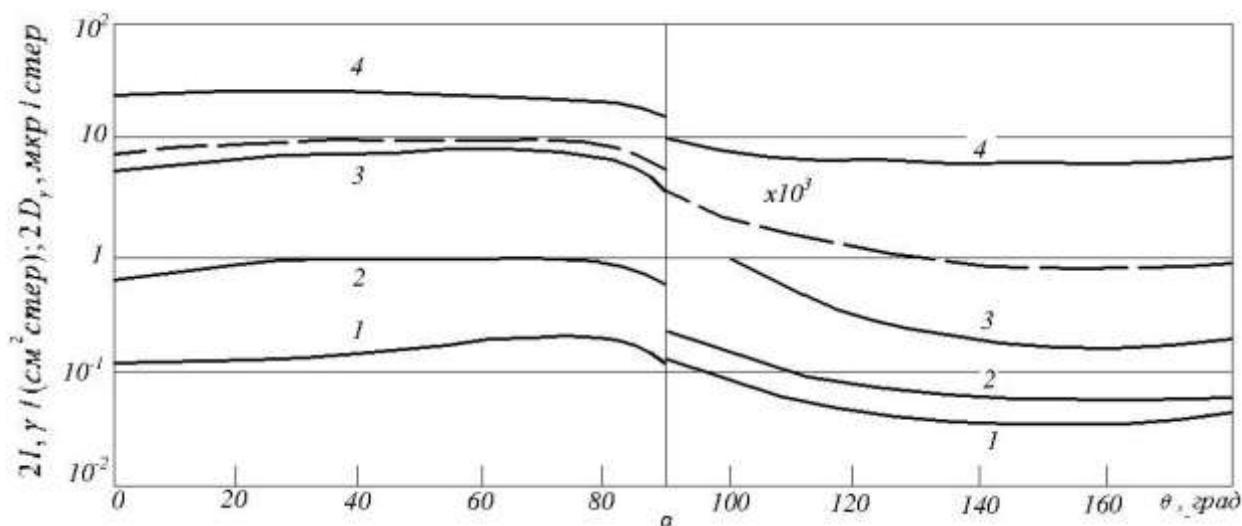


Рис.5. Пространственное распределение нейтронов (а) и γ -квантов (б) в гетерогенной железо-водной защите реактора (10 см Fe+30 см H₂O+10 см Fe+30 см H₂O) в 2D₁₂-приближении (сплошные кривые) и в P₂, tr-приближении (пунктирные кривые): 1 - поток надтепловых нейтронов с $E < 1,4$ Мэв; 2 - поток быстрых нейтронов с $E > 1,4$ Мэв; 3- доза нейтронов; 4- распределение источников нейтронов деления; 5- поток γ -квантов с $E_\gamma < 2,5$ Мэв ; 6 - доза γ -квантов; 7-поток γ -квантов с $E_\gamma > 2,5$ Мэв .

Перейдем теперь к программам расчета защиты, основанном на решении уравнения переноса в геометриях, отличных от плоской. В сферической геометрии наиболее широко известны многогрупповая программа расчета реактора и защиты в P₃- и P₅-приближениях метода сферических гармоник [89] и многогрупповая программа расчета распределений нейтронов от точечного изотропного источника, основанная на использовании метода характеристик [90].



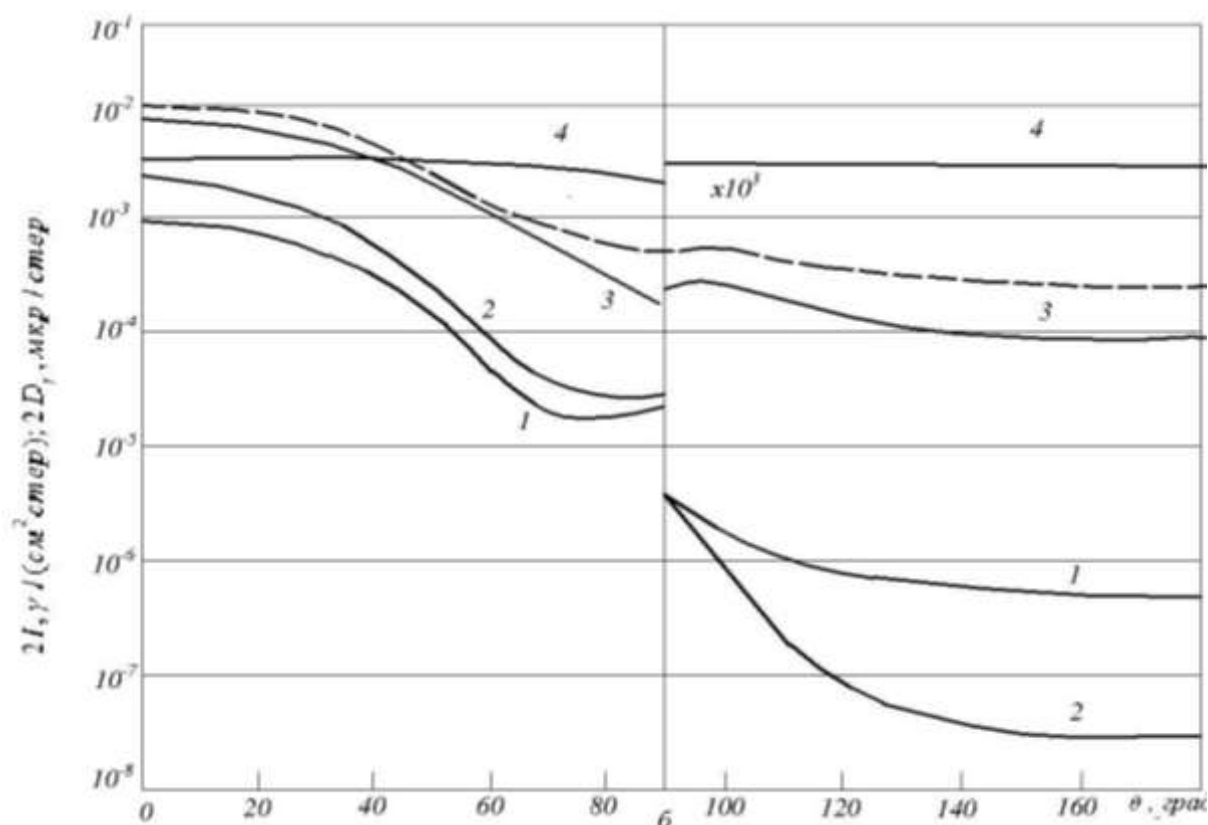


Рис. 6. Угловое распределение потока(-) и дозы (- -) γ –квантов в железоводной защите реактора на границе активной зоны (а) и на границе железовода на расстоянии 50 см от активной зоны (б): 1- $E_\gamma > 4,5 \text{ Мэв}$; 2 - $2,5 \text{ Мэв} < E_\gamma < 4,5 \text{ Мэв}$; 3- $0,75 \text{ Мэв} < E_\gamma < 2,5 \text{ Мэв}$; 4 - $E_\gamma < 0,75 \text{ Мэв}$.

Программы двумерного расчета защиты

Из программ двумерного расчета защиты в осесимметричной цилиндрической геометрии известны составленная Л.П. Бассом одногрупповая программа РЗД (расчет двумерной защиты) [32] и многогрупповая программа РАДУГа (расчет двумерных уравнений по группам) [91]. В РЗД используется метод характеристик с интерполяцией, разработанный в работе [31], в РАДУГе - модифицированный метод характеристик, приближенный по форме к S_N -методу. С помощью программы РЗД можно рассчитывать поля излучения в защитах, имеющих не более двух различных зон по радиусу и до трех зон вдоль оси симметрии. Соответствующие цифры для РАДУГи – 6 и 24. Максимально возможное полное число зон – 6 в РЗД и 24 в РАДУГе.

Максимально возможное число узлов пространственной сети не превышает 100 (РЗД) или 200 (РАДУГа) как в радиальном направлении, так и вдоль оси симметрии. Кроме того, произведение числа узлов сети в обоих этих направлениях не должно превышать 3000.

Программа РАДУГа позволяет проводить поэтапный расчет полей излучения с выделением отдельных областей защиты с постановкой граничных условий облучения и отражения, учитывающих наличие смежных областей. Границы зон могут описываться набором кривых второго порядка, которые при счете автоматически аппроксимируются ступенчатой функцией

с вершинами в узлах пространственной сети. В программе РЗД используется транспортное приближение индикатрисы рассеяния, в программе РАДУГа - \tilde{P}_L - представление ($L \leq 5$). Кроме того, в обеих программах при расчете потока однократно рассеянных нейтронов используется $2D_N$ -представление индикатрисы рассеяния ($N \leq 12$). Максимальное число узлов угловой сетки в обеих программах и для полярного, и для азимутального угла составляет 24. РАДУГа допускает расчеты методом характеристик для 10 групп нейтронов. Для задач с большим накоплением нейтронов промежуточных энергий предусматривается возможность добавления еще 11 энергетических групп. Расчет этих дополнительных групп проводится в P_1 -приближении. При этом имеется возможность для них использовать более густую пространственную сетку.

Для учета специфики задач с полостями в РАДУГе предусматривается возможность задавать независимые угловые сетки – несимметричные квадратуры в разных полупространствах по полярному и азимутальному углу. В случае наличия в рассматриваемой композиции размножающих зон в РАДУГе предусматривается возможность расчета реактора на критичность.

Кроме упомянутых выше программ для расчета защиты может быть использована также односкоростная программа решения двумерной сферической задачи с осевой симметрией АС [92], разработанная для решения атмосферных задач и основанная на методе характеристик с интерполяцией. В этой программе произведение числа зон по радиусу на число угловых зон не должно превышать 25. Число углов в каждом полупространстве не превышает 21 для угла θ и 11 для азимутального угла φ . Максимальное число пространственных узлов по радиусу равно 100, а максимальное число пространственных узлов по окружности (в полупространстве) 51. Возможно как P_L -представление индикатрисы рассеяния, так и дискретное ее задание. Допускаются произвольные условия облучения и, кроме того, наличие внутренних источников излучения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гермогенова Т.А. и др. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 2. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1966, стр.22.
2. Гермогенова Т.А. и др. Перенос быстрых нейтронов в плоских защитах. М., Атомиздат, 1971.
3. Гермогенова Т.А. и др. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 4. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1969, стр. 7.
4. Hopf E. Mathematical Problems of Radiative Equilibrium. Cambridge Tracts, 1934.
5. Масленников М.В. Проблема Милна с анизотропным рассеянием. Труды МИАН СССР, 97 (1968).
6. Maslennikov M.V. Milne's Problem with Anisotropic Scattering and Related Problems. Atomic Energy Review, 5, No. 2,59 (1967).

7. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. Перев. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1953.
8. Соболев В.В. Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет. М., Гостехиздат, 1956.
9. Соболев В.В. «Докл. АН СССР», 179, 41 (1968).
10. Case K.M., Zweifel P. F. Linear Transport Theory. Addison-Wesley Series in Nuclear Engineering, 1967.
11. Case K.M. Ann. Phys., 9, 1 (1960).
12. Розенберг Г.В. «Докл. АН СССР», 145, 775 (1962).
13. Гермогенова Т.А. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 1, 1001 (1961).
14. Benoist P., Kavenoky A. Nucl. Sci. Engng, 32, 225 (1968).
15. Leonard A., Mullikin T.W.J. Math. Phys., 5, 399 (1964).
16. Минин Ю.Н. «Астроном. журнал», 43, 1244 (1966); 45, 264 (1968).
17. Гермогенова Т.А. «Астрофизика», 2, 251 (1966).
18. Hunt G.E. J. Appl. Math., 16, 1255 (1968).
19. Smith M.G., Hunt G.E. Proc. Cambr. Phil. Soc., 63, 209 (1967).
20. Владимиров В.С. Математические задачи односкоростной теории переноса части. Труды МИАН СССР, 61, (1961).
21. Владимиров В.С. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 9, 842 (1968).
22. Гермогенова Т.А. «Докл. АН СССР», 187, 978 (1969).
23. Суворов А.П. и др. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 1. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1963, стр. 30.
24. Кузнецов Е.С. «Изв. АН СССР, сер. геофиз.», № 4, 71 (1951).
25. Wick G.C. Z. Phys., 121, 702 (1943).
26. Davis J.A., Kaplan S. Trans. ANS, 8, 509 (1965).
27. Гермогенова Т.А. и др. «Расчет одномерных плоскопараллельных защит численным интегрированием уравнения переноса излучения». Доклад на симпозиуме СЭВ «Проблемы защиты от проникающих излучений реакторных установок». Мелекес, 1969.
28. Владимиров В.С. «Вычислительная математика», 3, 3 (1958).
29. Рихтмайер Р.Д. Разностные методы решения краевых задач. Перев. с англ. Гл. 7. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
30. Гольдин В.Я. «Докл. АН СССР», 133, 748 (1960).
31. Гермогенова Т.А., Басс Л.П. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 3. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1969, стр. 69.
32. Басс Л.П. и др. Там же. Вып. 4. 1969, стр. 203.
33. Wang M.C., Guth E. Phys. Rev., 84, 1092 (1951).
34. Гермогенова Т.А. «Докл. АН СССР», 113, 297 (1957).
35. Чуянов В.А. В сб. «Некоторые математические задачи нейтронной физики». Под ред. Е.С. Кузнецова. М., Изд-во МГУ, 1960, стр. 199.
36. Марчук Г.И. Методы расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1961.

37. Белл Д.Ж. и др. Доклад № 261 (США) на III Международной конференции ООН по мирному использованию атомной энергии. Женева. 1964.
38. Carlson B. The Numerical Theory of Neutron Transport. In: «Methods in Computation Physics». V.I. New York – London, 1963, p. 1.
39. Harms A.A., McCormick N.J. Trans. ANS, 12, 18 (1969).
40. Serbone R.J., Lathrop K.D. Nucl. Sci. Engng, 35, 139 (1969).
41. Басс Л.П. и др. См. наст. сб., стр. 145.
42. Басс Л.П. «Атомная энергия», 28, 49 (1970).
43. Гермогенова Т.А. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 9, 605 (1969).
44. Лебедев В.И. В сб. «Численные методы решения задач математической физики». М., «Наука», 1966, стр. 154.
45. Лебедев В.И. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 7, 1250 (1967).
46. Гольдин В.Я. Там же, 4, 1073 (1964).
47. Гермогенова Т.А., Сушкевич Т.А. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 3. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1969, стр. 34.
48. Николайшвили Ш.С. «Атомная энергия», 20, 344 (1966).
49. Гермогенова Т.А. «Докл. АН СССР». 181, 519 (1968).
50. Марчук Г.И., Яненко Н.Н. «Докл. АН СССР», 157, 1291 (1964).
51. Марчук Г.И., Султангазин У.М. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 5, 852 (1965).
52. Марчук Г.И., Яненко Н.В. В сб. «Некоторые вопросы вычислительной и прикладной математики». Под ред. Г.И. Марчука. Новосибирск, «Наука», Сиб. отд., 1966, стр. 5.
53. Марчук Г.И. Там же, стр. 152.
54. Березин И.С., Жидков Н.Н. Методы вычислений. Т. 2. М., Физматгиз, 1959.
55. Aronson R. Nucl. Sci. Engng, 27, 271 (1967).
56. Шахов С.Б., Игнатов А.А. В сб. «Теория и физика реакторов». Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат, 1967, стр. 59.
57. Garrettson G., Leinard A.J. Math. Phys., 11, 725 (1970).
58. Gibbs A.G. J. Math. Phys., 10, 875 (1969).
59. Henryson H., Selengut P.S. Nucl. Sci. Engng, 37, 1 (1969).
60. Beauwens R., Devooght J. Nucl. Sci. Engng, 32, 249 (1968).
61. Лалетин Н.И. В сб. «Вычислительные методы и теории переноса». Под ред. Г.И. Марчука. М., Атомиздат, 1969, стр. 228.
62. Уочспресс и др. Доклад № 263 (США) на Третьей международной конференции ООН по использованию атомной энергии в мирных целях. Женева, 1964.
63. Pormaning G.C. Nucl. Sci. Engng, 29, 220 (1967).
64. Каплан С. Синтетические методы расчета реакторов. В сб. «Импульсный метод в нейтронной физике». Под ред. П. Гриблера, Э. Хенли. Пер. с англ. М., Атомиздат, 1969, стр. 213.

65. Хромов В.В. и др. В сб. «Инженерно-физические вопросы ядерных реакторов». Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат, 1966, стр. 11.
66. Хромов В.В., Слесарев И.С. «Атомная энергия», 19, 540 (1965).
67. Слесарев И.С., Хромов В.В. В сб. «Теория и физика реакторов». Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат, 1967, стр. 23.
68. Хромов В.В. и др. В сб. «Некоторые вопросы физики и техники ядерных реакторов». Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат. 1967, стр. 51.
69. Yasinsky J.V., Kaplan S. Nucl. Sci. Engng, 31, 354 (1968).
70. Lancefield M.J. Nucl. Sci. Engng, 37, 423 (1969).
71. Gelbard E.M., Hageman L.A. Nuck. Sci. Engng, 37, 288 (1969).
72. Капер Н.Г. J. Math. Phys., 10, 286 (1969).
73. Kaplan S. Nucl. Sci. Engng, 34, 76 (1968).
74. Lathrop K.D. Nuck. Sci. Engng, 32, 357 (1968).
75. Басс Л.П. и др. В сб. «Руководство по радиационной защите для инженеров». Под ред. Д.Л. Бродера и др. Пер. с англ. М., Атомиздат, 1972.
76. Гусев Н.Г. и др. Защита от ионизирующих излучений. Том 1. Физические основы защиты от излучений. М., Атомиздат, 1969.
77. Бергельсон Б.Р. и др. Многогрупповые методы расчета защиты от нейтронов. М., Атомиздат, 1970.
78. Абагян А.А. и др. Пространственно-энергетическое распределение гамма-квантов в гетерогенных средах. Доклад на симпозиуме СЭВ «Проблемы защиты от проникающих излучений реакторных установок». Мелекес, 1969.
79. Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. Перев. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
80. Бродер Д.Л. и др. Малогабаритная защита реакторов. М., Атомиздат, 1967.
81. Абагян Л.П. и др. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.
82. Захарова С.М. и др. В сб. «Бюллетень информационного центра по ядерным данным». Вып. 3. Приложение 1. М., Атомиздат, 1967.
83. Марчук Г.И. и др. Критические параметры гомогенных размножающих систем. М., Атомиздат, 1965.
84. Суворов А.П., Уткин В.А. В сб. «Бюллетень информационного центра по ядерным данным». Вып. 3. М., Атомиздат, 1966, стр. 513.
85. Кузьминова Т.И., Суворов А.Н. Там же. Вып. 2, 1965, стр. 328.
86. Болятко В.В. и др. В сб. «Вопросы дозиметрии и защиты от излучений». Вып. 10. Под ред. Л.Р. Кимеля. М., Атомиздат, 1969, стр. 121.
87. Гордеев И.В. и др. Ядерно-физические контакты. М., Атомиздат, 1963.
88. Бергельсон Б.Р., Зориков Г.А. Справочник по защите от излучения протяженных источников. М., Атомиздат, 1965.
89. Николайшвили Ш.С., Ляшенко Е.И. В сб. «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 3. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1969, стр. 54.

90. Гермогенова Т.А. и др. Там же. Вып. 2, 1969, стр. 57.

91. Басс Л.П. и др. Двумерный расчет нейтронных полей в осесимметричных радиационных защитах. Доклад на симпозиуме СЭВ «Проблемы защиты от проникающих излучений реакторных установок». Мелекес, 1969.

92. Гермогенова Т.А. и др. «Изв. АН СССР, сер. Физика атмосферы и океана», 5, 1266 (1969).

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ И УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ В КОНИЧЕСКИХ ЗАЩИТАХ

Совместно с Л.П. Бассом, А.А. Дубининым, А.Н. Хмылевым

Вопросы физики защиты реакторов. Сб. статей. Вып. 6.
Под. ред. Ю.А. Егорова и др. Атомиздат. 1974. Стр.29- 37.

Методика численного решения уравнений переноса

Создание защиты от излучений для современных экспериментальных и технических установок заставляет детально исследовать пространственные, энергетические и угловые распределения излучений в сложных по геометрии и составу системах.

В настоящей работе рассматривается решение задачи поиска пространственных и угловых распределений быстрых нейтронов в защитах, представляющих собой усеченный конус.

Дано описание результатов ряда расчетов, проведенных по программе РЗД («Резеда») [1]. Эта программа осуществляет численное решение односкоростного уравнения переноса в цилиндрической системе координат методом характеристик с интерполяцией. В интеграле столкновений используется приближенное представление индикатрисы рассеяния в виде суммы дельта-функции и константы (транспортное приближение).

Чтобы оценить ошибку одnogруппового приближения, проведены расчеты по программе РОЗ-5 [2] для плоского слоя защиты в одно и многогрупповом приближениях. Погрешность из-за приближенного описания индикатрисы рассеяния в интеграле столкновений исследовали с помощью программы «Радуга» [3, 4], в которой индикатрису задавали в виде суммы дельта-функции и ряда по полиномам Лежандра, максимальный индекс которых не превосходит 5.

В цилиндрической системе координат задача для искомого распределения излучения имеет вид

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial s} + \Sigma(z, r) \Psi(z, r, \gamma, \mu) &= \bar{B}(z, r, \gamma, \mu); \\ \Psi / \Gamma &= F_0 \bullet \varphi(r) \delta(\gamma - 1), \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где $\Psi(z, r, \gamma, \mu)$ - интенсивность излучения;

$$\bar{B}(z, r, \gamma, \mu) = \sum_s(z, r) \int_{-1}^{+1} d\gamma' \int_0^{2\pi} \Psi(z, r, \gamma', \mu') P(z, r, \cos \chi) d\varphi'; \quad (2)$$

где s - луч, проходящий через точку (z, r) в направлении (γ, μ) ; $\gamma = \cos \vartheta$; $\mu = \cos \varphi$; ϑ - угол между лучом s и осью z ; φ - угол между проекцией s на плоскость $z = \text{const}$ и радиусом-вектором; $\Sigma(z, r)$ - полное сечение взаимодействия; $\sum_s(z, r)$ - сечение рассеяния; F_0 - мощность

источника; $\varphi(r)$ - распределение источника по радиусу; Γ – один из торцов области расчета.

Решение задачи (1) ищем в виде

$$\Psi(z, r, \gamma, \mu) = \Phi(z, r, \gamma, \mu) + F_0 \cdot \varphi(r) \delta(\gamma - 1) e^{\int_{-\Sigma(z', r)}^z dz'} \quad (3)$$

Представим индикатрису в интеграле столкновений (2)

$$P(z, r, \cos \chi) = a(z, r) \delta(\gamma - \gamma') \delta(\varphi - \varphi') + \frac{b(z, r)}{4\pi}. \quad (4)$$

Из условия нормировки получаем

$$a + b = \int_{-1}^{+1} d\gamma' \int_0^{2\pi} P(z, r, \cos \chi) d\varphi' = 1. \quad (5)$$

Подставим решение (3) в уравнение (1) и получив уравнение для Φ , используем соотношение (4).

В результате получим задачу с изотропным рассеянием, которая решается конечно-разностным методом:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial s} + \bar{\Sigma} \Phi(z, r, \gamma, \mu) &= B(z, r) + B_1(z, r, \gamma); \\ \Phi / \Gamma_1 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где $\bar{\Sigma} = \Sigma - \Sigma_s a$;

$$\begin{aligned} B(z, r) &= \frac{\Sigma_s \cdot b}{4\pi} \int_{-1}^{+1} d\gamma' \int_0^{2\pi} \Phi(z, r, \gamma', \mu') d\varphi'; \\ B_1(z, r, \gamma) &= F_0 \cdot \varphi(r) \Sigma_s(z, r) e^{\int_{\Sigma(z', r)}^z dz'}, \end{aligned} \quad (7)$$

Γ_1 - граница области расчета.

Из выражения (7) видно, что в источнике $P_1(z, r, \gamma)$ индикатриса учитывается точно. Итерационный процесс решения уравнения (6) и разностная сеть описаны в работе [1]. Координаты узлов разностей сети обозначаются следующим образом: $z_i \in [0, H]$, $r_k \in [0, R]$, $\gamma_i \in [-1, +1]$, $\mu_j \in [-1, +1]$. На рис. 1 изображен пример разностей сети по переменным z и r .

Ячейки около боковых граней усеченного конуса (рис.1) отличаются от остальных ячеек цилиндрического типа внутри области. Для упрощения численного алгоритма приняты следующие основные ограничения.

1. Боковая поверхность имеет только один угол наклона, причем

$$a = \operatorname{tg} \varphi = \frac{R_1 - R}{H}; \quad a \neq \operatorname{tg} \vartheta_1 \quad (8)$$

где R – радиус нижнего основания конуса; R_1 – радиус верхнего основания конуса ($R_1 \leq R$); H – высота конуса.

2. На каждом шаге z число точек по радиусу может измениться не более чем на 1 точку. Это приводит к следующей зависимости между шагами по r и z во внешней зоне по радиусу:

$$\Delta r \geq \Delta z \cdot |a|. \quad (9)$$

3. Граница внутренней зоны по радиусу не выходит на боковую поверхность конуса (см. рис. 1, линия ab).

Заметим, что излучение может падать на верхнее или нижнее основание конуса, угол Ψ при выполнении соотношения (9) может принимать любое значение. Остальные ограничения приведены в работах [1,5].

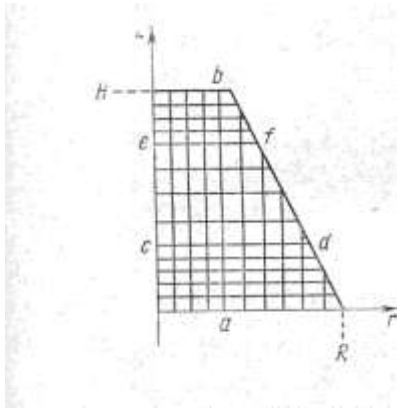


Рис.1. Пример разностной сети по z и r , где ab, cd, ef -границы зон.

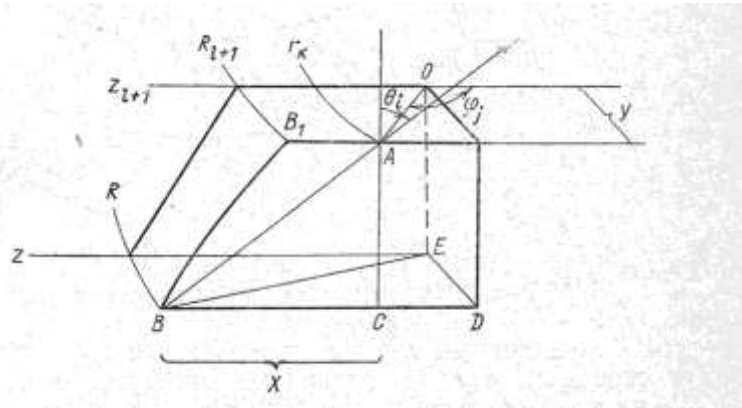


Рис.2. К определению точки пересечения луча с границей конуса.

Некоторую трудность представляет определение расстояния по характеристике AB (рис. 2) от точки разностной сети A до точки B на границе конуса.

Учитывая, что BB_1 – гипербола, легко получить

$$X = \frac{r_k \mu_j - R_{l+1} \cdot k + \sqrt{R_{l+1} - k \cdot r_k \cdot \mu_j^2 - y^2(1 - k^2)}}{1 - k^2}; \quad (10)$$

$$AB = \frac{X}{|\sin \vartheta_i|}, \quad (11)$$

где $y = r_k \cdot \sin \varphi_j$,

$$k = a \cdot \operatorname{ctg} \vartheta_i, \quad k \neq 1 \quad (12)$$

причем $k < 0$ – для счета снизу вверх ($a < 0, \operatorname{tg} \vartheta_i > 0$), $k > 0$ – для счета сверху вниз ($a < 0, \operatorname{tg} \vartheta_i < 0$), геометрический смысл обозначений ясен из рис. 2.

Тщательный анализ выражений (10), (11) показал, что они дают правильный результат во всех случаях, которые возникают при прохождении

луча через граничные ячейки конуса ($|k| \geq 1$, $\mu_i > 0$, $\text{tg } \mathcal{G}_i > 0$), а также при вырождении отрезка луча в точку.

Можно показать, что при

$$\mu = k \quad (13)$$

луч, образующий угол \mathcal{G} с осью z , совпадает с касательной, прямой к конусу, проведенной в плоскости, проходящей на расстоянии $y = R \cos \varphi$ от оси конуса (R – координата точки, в которой луч пересекает боковую поверхность конуса).

Соотношение (13) надо учитывать при рассмотрении функции $\Phi(z_l, r_k, \gamma_i, \mu_j)$ на боковой грани конуса, так как, вообще говоря, значение μ в этом соотношении не совпадает с узлами μ_j .

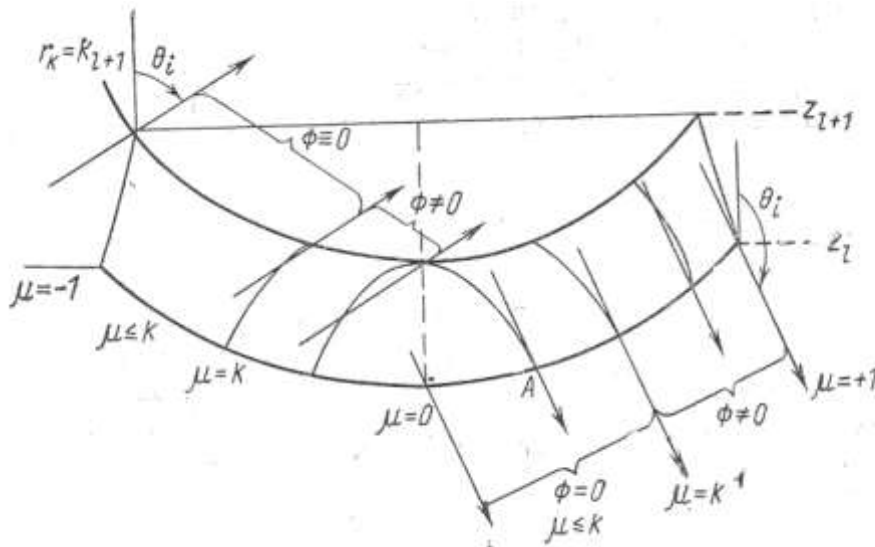


Рис.3. Различные случаи прохождения луча при $r_k = R_l$ и $|k| < 1$.

Различные случаи прохождения луча при $r = R_l$ и $|k| < 1$ изображены на рис. 3. Если предположить, что на боковую грань конуса не падает внешнее излучение, то на рис. 3 показано, что соотношение (13) позволяет отделить область значения μ , при которых $\Phi \equiv 0$, от области, в которой $\Phi \neq 0$.

Влияние величины энергетического интервала и точности задания индикатрисы рассеяния на результаты расчетов полей быстрых нейтронов

Отмеченные выше ограничения, заложенные в двумерную программу РЗД,- моноэнергетичность излучения и упрощенное представление индикатрисы рассеяния – приводят к необходимости исследования влияния этих ограничений на результаты расчетов. Отсутствие экспериментальных данных по коническим защитах заставляет искать пути расчетной проверки точности вычислений по программе РЗД. При расчетах были использованы

одномерная многогрупповая программа РОЗ-5 [2] и двумерная одногрупповая программа «Радуга», позволяющие более точно описывать индикатрису рассеяния [4]. Константы, характеризующие взаимодействие быстрых нейтронов с исследуемыми веществами, получены усреднением микроскопических сечений взаимодействия на интервалах энергетических групп по спектру деления (при $E > 2,5$ МэВ) и спектру $\sim 1/E$ (при $E < 2,5$ МэВ).

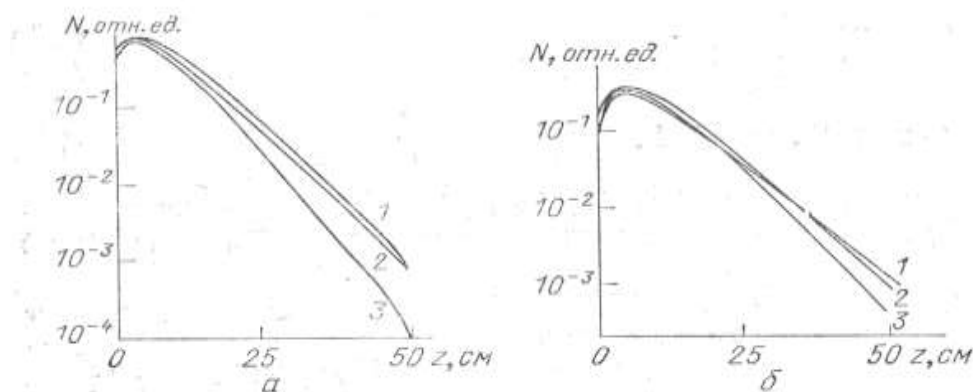


Рис.4. Пространственное распределение плотности потока быстрых нейтронов в пластинах из железа (а) и воды (б):
1-одномерный четырехгрупповой расчет; 2-одномерный одногрупповой расчет;
3 – двумерный одногрупповой расчет.

На рис. 4 показаны полученные по программе РОЗ-5 результаты расчетов пространственного распределения плотности потока быстрых нейтронов (рассеянная компонента) с энергией $E > 1,4$ МэВ в однородных пластинах из железа и воды при плоскопараллельном облучении. Как видно из рисунков, влияние разбиения энергетического интервала на группы (одна группа на интервале 10,5 – 1,4 МэВ и четыре группы с границами, принятыми в работе [6]), невелико – до толщины пластины в 50 см.

На рис. 4 приведены также результаты расчетов плотности потоков нейтронов с $E > 1,4$ МэВ в цилиндрических защитах ($R_{ц} = 15$ см), выполненные по одногрупповой программе РЗД. Эти результаты лежат ниже расчетов по программе РОЗ-5, что соответствует качественному представлению о накоплении рассеянного излучения в различных по геометрии и свойствам системах.

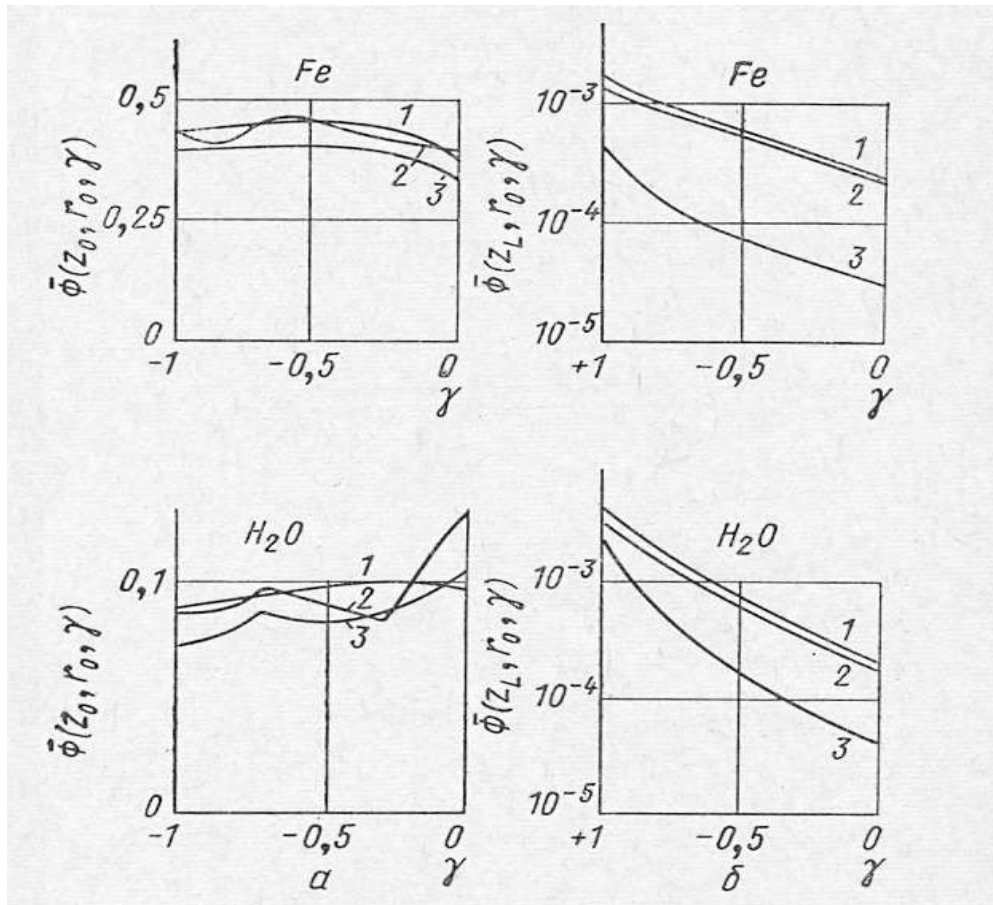


Рис.5. Угловое распределение отраженных (а) и прошедших (б) нейтронов: 1-одномерный четырехгрупповой расчет; 2-одномерный одногрупповой расчет; 3 – двумерный одногрупповой расчет.

На рис. 5 приведены угловые распределения отраженного и прошедшего излучений, свидетельствующие о незначительном влиянии на результаты расчетов разбиения энергетического интервала на группы. Прошедшее излучение в случае цилиндра имеет в направлении вперед более вытянутое угловое распределение, что также соответствует качественным представлениям о поведении быстрых нейтронов в системах с плоской и цилиндрической геометриями.

Расчеты с различным представлением индикатрисы рассеяния, проведенные по программе «Радуга», доказывают, что пространственное поведение плотности потока нейтронов при переходе от индикатрисы, представленной в виде ряда по полиномам Лежандра, к индикатрисе рассеяния, представленной в виде суммы изотропной и δ -образной составляющих, меняется относительно слабо.

Приведенные на рис. 6, а, б угловые распределения плотности потока быстрых нейтронов также показывают качественное соответствие, однако более точное представление индикатрисы рассеяния приводит к сглаживанию кривых зависимости функции от переменной γ , особенно в случае воды. Следует отметить, что при увеличении расстояния от источника угловое распределение нейтронов на боковой поверхности цилиндра становится все более чувствительным к точности задания индикатрисы.

Проведенные исследования показывают, что программа РЗД позволяет получать надежную информацию о пространственном распределении быстрых нейтронов в конических защитах. Полученные по этой программе угловые распределения быстрых нейтронов на поверхностях защиты качественно правильно описывают характер поведения угловых функций.

Результаты расчетов потоков быстрых нейтронов в конусах, облучаемых мононаправленным пучком излучения

Были проведены расчеты потоков быстрых нейтронов ($E \geq 1,4$ МэВ) в однородных усеченных конусах размерами, см; первый вариант – $R_1=15$, $R=20$, $H=50$; второй вариант - $R_1=15$, $R=30$, $H=50$.

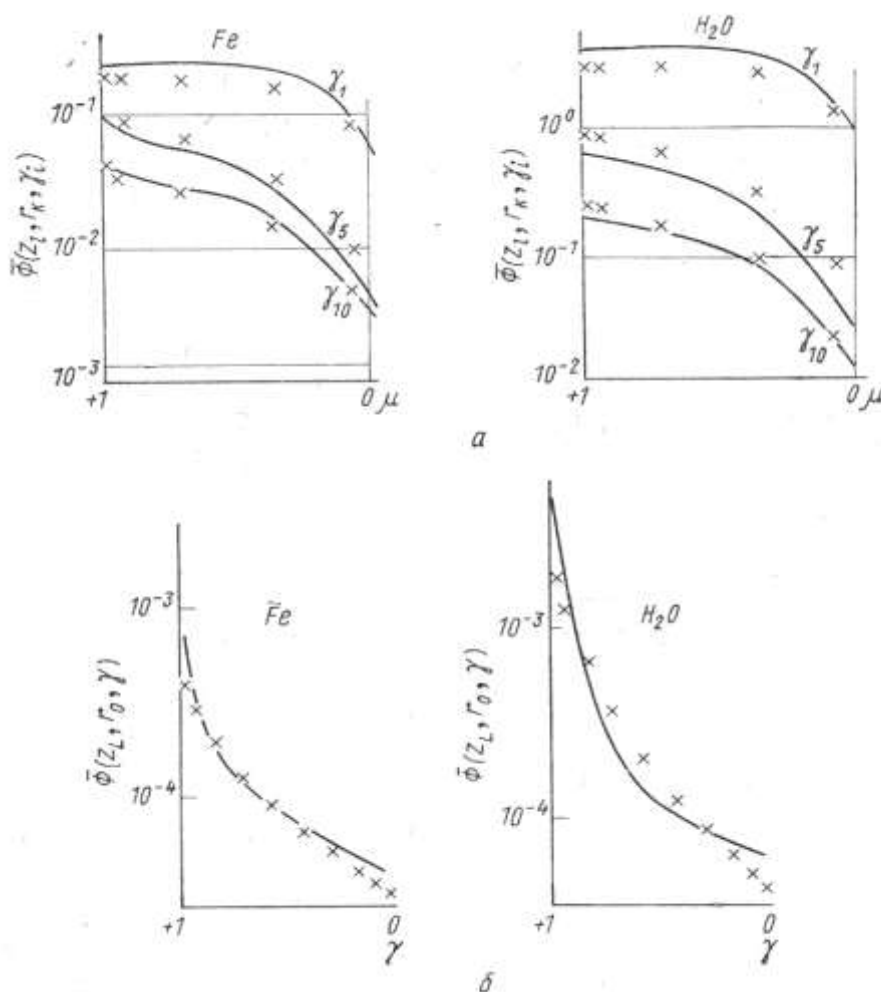


Рис.6. Угловое распределение быстрых нейтронов на боковой поверхности цилиндра в точке $z=15$ см, $r=15$ см (а), а также на оси цилиндра при $z=H=50$ см (б):

----- - расчет с индикатрисой рассеяния в транспортном приближении.

xxx – расчет с индикатрисой рассеяния, заданной в виде ряда по полиномам Лежандра.

В качестве материалов защиты использовали железо и воду. Приведем некоторые результаты расчетов, более подробные данные содержатся в работе [5].

На рис. 7 показаны пространственные распределения плотности потока рассеянных нейтронов как функции радиальной переменной при различных расстояниях z_1 от верхнего торца конуса.

Влияние угла конуса, т.е. угла Ψ между образующей конуса и его высотой, сильнее сказывается при использовании в качестве материала защиты железа. Это связано с меньшей долей сечения увода нейтронов в полном сечении взаимодействия нейтронов с ядрами железа по сравнению с названной долей в случае воды соответственно с большим накоплением рассеянного излучения в системах, состоящих из железа.

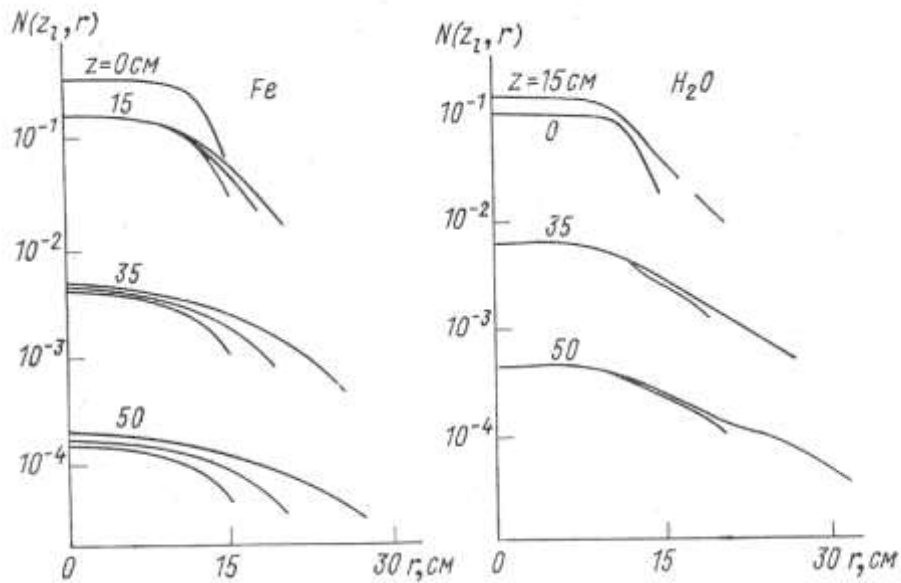


Рис. 7. Пространственное распределение плотности потока рассеянных нейтронов в конических защитах.

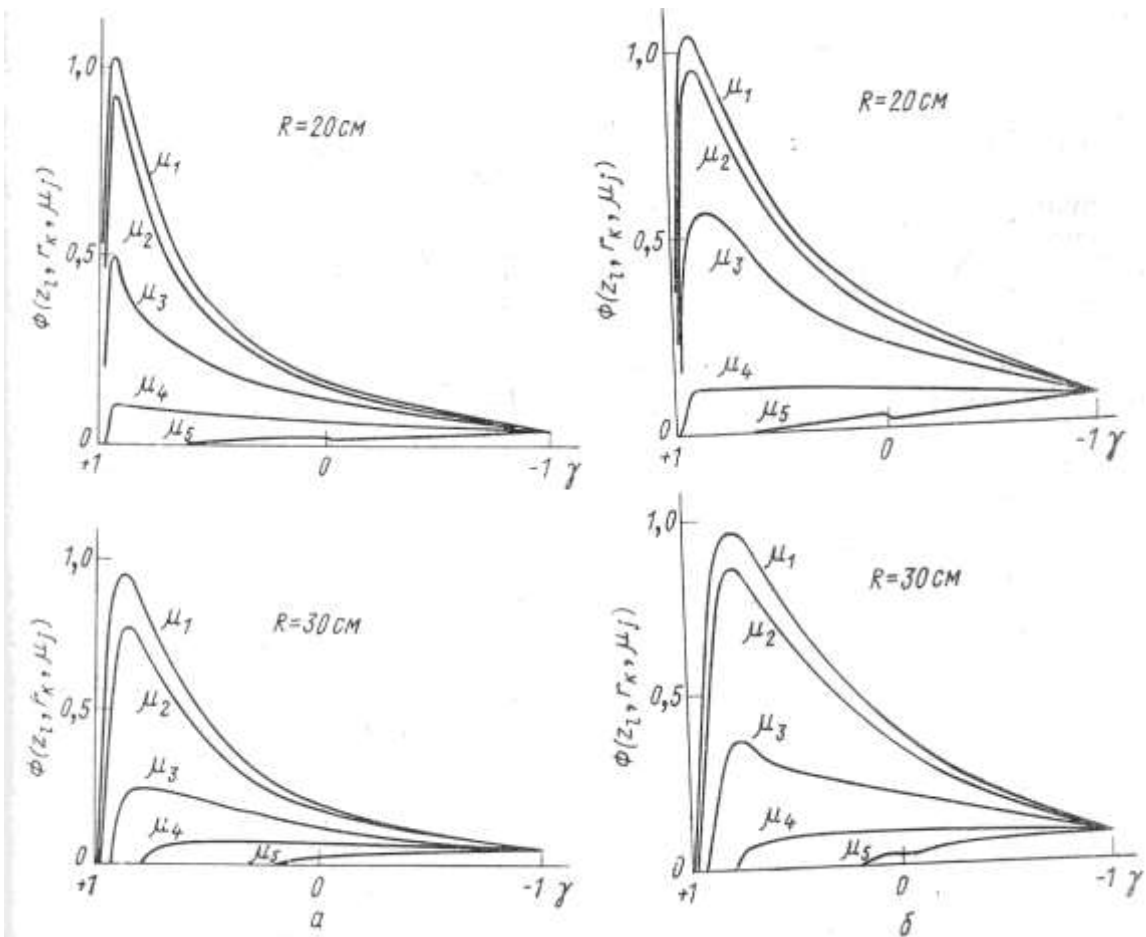


Рис. 8. Угловое распределение интенсивности потока быстрых нейтронов на боковой поверхности конической защиты из железа в точке $z=15$ см (а) и в точке $z=25$ см (б).

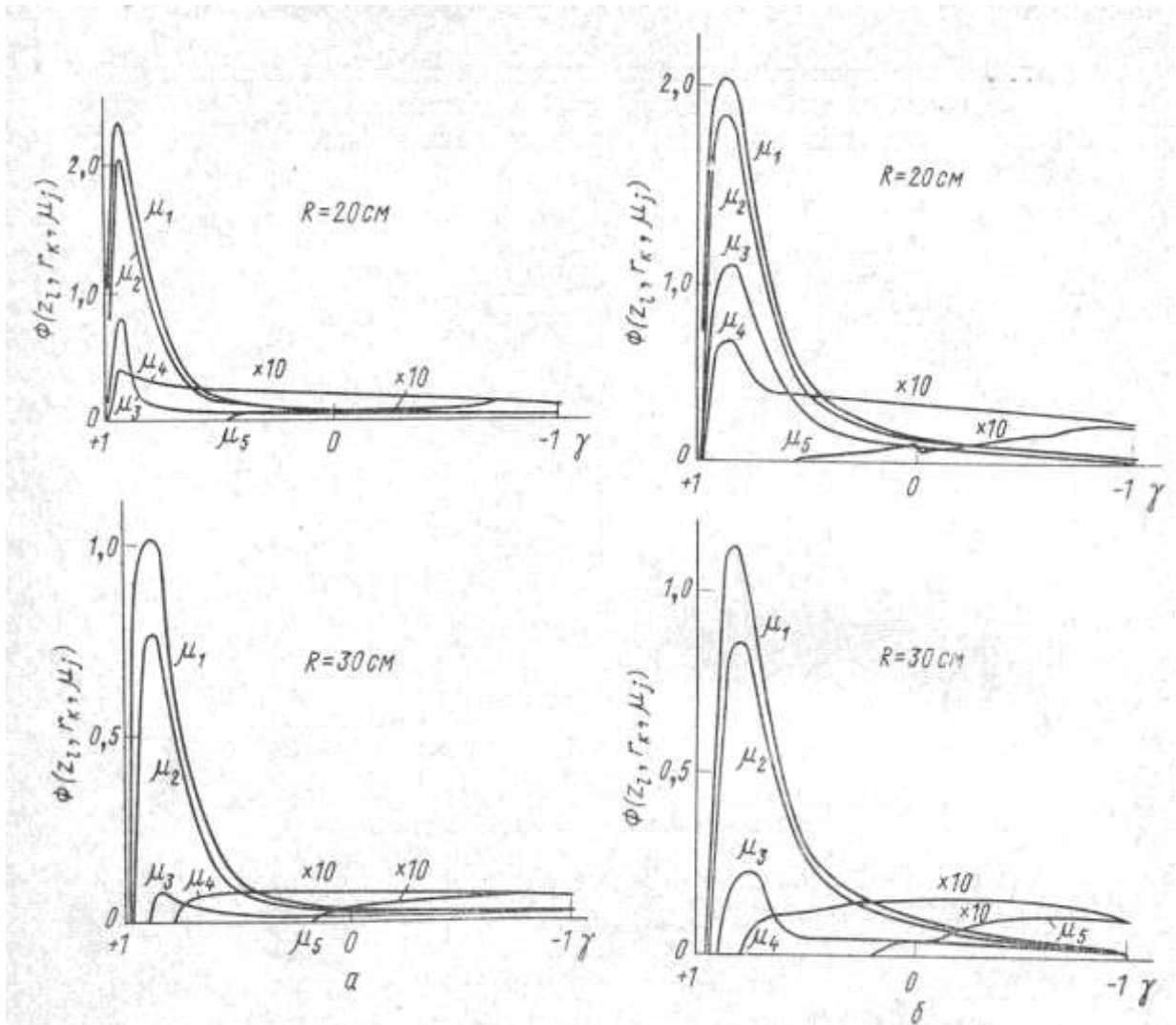


Рис. 9. Угловое распределение интенсивности потока быстрых нейтронов на боковой поверхности конической защиты из воды в точке $z=15$ см (а) и в точке $z=35$ см (б).

На рис. 8-9 приведены угловые распределения интенсивности потока быстрых нейтронов $\Phi(z_l, r_k, \gamma_i, \mu_j)$ на боковых поверхностях конусов, состоящих из железа и воды (R - радиус нижнего основания конуса).

Анализ поведения интенсивностей быстрых нейтронов показывает, что при увеличении угла Ψ угловое распределение нейтронов в защитах из железа становится менее анизотропным, а максимум кривых зависимости потока от переменной γ смещается в сторону меньших γ . Для защит из воды угловое распределение нейтронов с изменением Ψ меняется значительно меньше. Однако наблюдается сдвиг максимума в сторону меньших γ . При больших Ψ кривые зависимости потока от переменной с уменьшением γ плавно растут. Угол γ , при котором интенсивность излучения обращается в нуль, определяется геометрией системы и, естественно, уменьшается с ростом угла Ψ .

Сравнение результатов расчетов угловых распределений быстрых нейтронов в одинаковых по геометрии системах, состоящих из железа и

воды, показывает, что максимум кривых зависимости интенсивности от угла γ практически одинаков для обоих веществ. Для воды почти все излучение сконцентрировано в интервале углов от $\gamma=+1$ до $\gamma=0,85$, для железа функция существенно более плавная.

На рис. 10 приведены угловые распределения потока быстрых нейтронов на торцевой поверхности конусов при $z=H$. Угловая зависимость этих функций для железа выражена слабее, чем для воды. При удалении от оси конуса угловая зависимость становится более сильной. Для защит из воды кривые при различных углах Ψ существенно меньше отличаются одна от другой, чем кривые защит из железа. Это также объясняется неодинаковой степенью накопления рассеянного излучения в железе и воде.

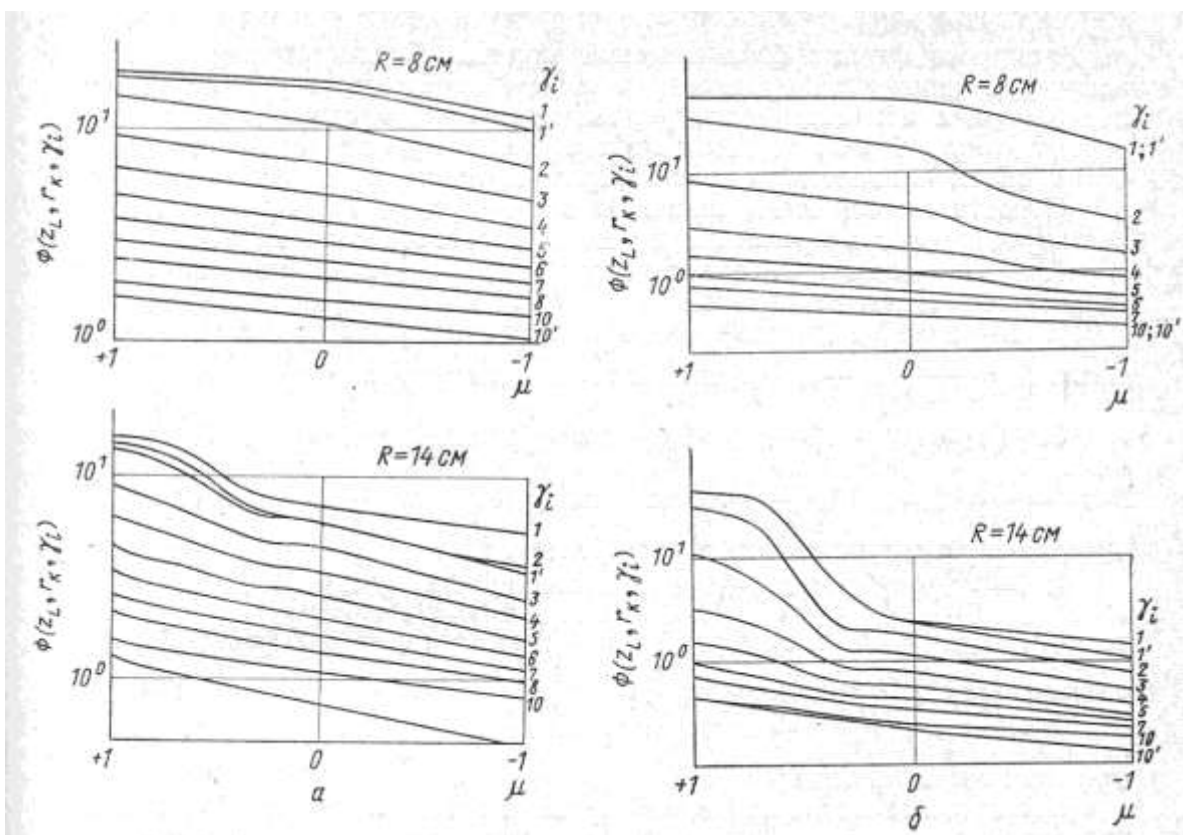


Рис. 10. Угловое распределение интенсивности потока быстрых нейтронов на выходном торце ($z=H=50$ см) конической защиты из железа (а) и воды (б).

Цифрами обозначены номера узлов по переменной γ , являющейся параметром семейства кривых; цифрами со штрихом обозначены те же параметры в расчете для конической защиты с $R=30$ см.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Басс Л.П. и др. В сб.: «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 4. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1969, с. 203.
2. Гермогенова Т.А. и др. В сб.: «Вопросы физики защиты реакторов». Вып. 5. Под ред. Д.Л. Бродера и др. М., Атомиздат, 1973, с. 22.

3. Басс Л.П. и др. Двумерный расчет нейтронных полей в осесимметричных радиационных защитах. Доклад на симпозиуме СЭВ «Проблемы защиты от проникающих излучений реакторных установок». Мелекесс, 1969.

4. Басс Л.П. и др. Односкоростной вариант программы «Радуга». Возможности программы и информации для счета. Препринт ИПМ АН СССР, 1972.

5. Басс Л.П. и др. Распространение излучения через конические преграды. Препринт ИПМ АН СССР, 1972.

6. Абагян Л.П. и др. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.

ОКС - ПАКЕТ ПРОГРАММ КОНСТАНТНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Т.А.Гермогенова, Д.А.Корягин, Э.С.Луховицкая

М.Н.Николаев, Н.Б.Фейгельсон

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика
и техника ядерных реакторов, 1983, вып. 4(33), с. 72-75.

Объединенная константная система (ОКС) создается для обеспечения удобной и надежной эксплуатации различных константных систем в расчетах переноса излучения, функций ценности и различных функционалов. Функциональное наполнение ОКС составляют известные константные системы: DENSTY, АРАМАКО-2F, АРАМАКО-G, базирующиеся на микроданных 21-групповой библиотеки нейтронных констант и библиотек БНАБ-70, БНАБ-78. Входной язык позволяет составить задание в экономичной и удобной для пользователя форме.

AN APPLIED PROGRAMS PACKAGE FOR RETRIEVING GROUP GROSS SECTIONS. T.A.GERMOGENOVA, D.A.KORIAGIN, E.S.LUKHOVITSKAYA, M.N.NIKOLAEV, N.V.FEIGELSON. A united group cross sections retrieval system provides a convenient and reliable means for obtaining macroscopic cross sections for solution of the transport equation. The application part of the system includes well known programs for calculation of macroscopic cross sections: DENSTY, ARAMACO-2F, ARAMACO-G, based on 21 group library of microscopic neutron data, ABBN-70 and ABBN-78 microscopic data libraries. User language allows to settle a problem in convenient terms. System part consists of programs, which analyse user job specification and provide its execution.

Введение

В настоящее время данные о взаимодействии излучения с веществом (сечения взаимодействия), необходимые для расчета полей нейтронов и гамма-квантов в реакторах и радиационной защите, используются в основном в виде групповых макроскопических констант. Эти макроконстанты определяются специальными программами константного обеспечения для вещества каждой зоны реактора или защиты (с учетом состава, температуры и агрегатного состояния) по данным заранее составленной библиотеки микроконстант взаимодействия излучения на каждом энергетическом интервале (группе) с каждым из изотопов.

Под системой константного обеспечения, или константной системой (КС), мы будем понимать всю совокупность материалов, позволяющих провести расчет групповых макроконстант для вещества указанного состава и состояния.

Сейчас используется несколько систем нейтронных и гамма-констант разного происхождения, ориентированных на нужды расчета реакторов различных спектральных классов и радиационной защиты.

К настоящему времени создано и используется большое число программ расчета нейтронных и гамма-полей, либо привязанных к одной из существующих КС, либо вовсе лишенных константного обеспечения. Поэтому весьма важной является разработка аппарата, организующего взаимодействие программы расчета полей излучения с различными КС.

Задачу можно сформулировать более точно: для нескольких независимых систем константного обеспечения (типа АРАМАКО-2F [1], DENSTY [2]), имеющих подробную эксплуатационную документацию, необходимо создать специализированное программное обеспечение, которое представляло бы следующие возможности:

1) использование расширяемого проблемно-ориентированного языка общения с различными КС, допускающего употребление установившейся физической терминологии;

2) выдачу рассчитанных макроконстант, блокированных микроконстант и иных констант взаимодействия излучения с веществом в удобной для пользователя форме;

3) комбинирование расчета констант для части зон и энергетических групп по одной КС с расчетами остающихся констант по другим КС;

4) получение «сопряженных» групповых констант (т.е. представление макроконстант в порядке, удобном для решения сопряженного уравнения);

5) подключение новых константных систем с дополнительными возможностями.

Одной из возможных реализаций такого специализированного программного обеспечения является рассматриваемая здесь объединенная константная система (ОКС) [3]. Описывается версия системы ОКС, реализованная и работающая в ИПМ АН СССР. Функциональное наполнение ее составляют константные системы АРАМАКО-2F [1], АРАМАКО-G [6] (эти системы работают с библиотеками БНАБ-70 и БНАБ-78), DENSTY [2], а также программы ARVES [4] и JAST.

В последующих разделах описывается структура входного языка, набор операторов, работающих в настоящее время в ОКС, обращение к ОКС, структура системного наполнения. В заключении перечисляются планируемые работы по модернизации системы.

1. Структура входного языка системы

Одно из основных требований, предъявляемых к входному языку системы, состоит в том, что язык должен быть расширяемым, т.е. должен допускать включение новых операторов. Решение этой проблемы может быть найдено путем представления синтаксиса языка в виде двух частей: внешнего и внутреннего синтаксиса [5]. Внешний синтаксис сосредоточен на общей организации вычисления, внутренний – на выполнении конкретных операторов. Закрепляя внешний синтаксис и оставляя внутренний

неопределенным, мы получим язык, обладающий требуемым свойством (заметим, что внутренний синтаксис определяется для каждого вводимого оператора).

В данном разделе описывается общая структура входного языка ОКС - его внешний синтаксис.

1.1. Задание. Задание для ОКС представляет собой последовательность операторов. Операторы задают некоторые действия (например, обращение к той или иной константной программе) или описывают наборы данных. Задание может начинаться с любого оператора. Заканчивается задание оператором END.

1.2. Типы операторов. По своему функциональному назначению операторы ОКС делятся на *исполняемые* и *неисполняемые*. Исполняемый оператор задает некоторое действие, например, вызов константной программы или преобразование форматов. Неисполняемый оператор – это описание объектов, используемых при работе исполняемого оператора. Порядок выполнения операторов определяется порядком их описания. Область действия исполняемого оператора распространяется на неисполняемые операторы, написанные непосредственно после него до следующего исполняемого оператора.

1.3. Структура оператора. Оператор имеет вид:

<операция>:<операнды>;

В поле операции задается служебное слово, являющееся названием операции. Служебное слово – последовательность букв произвольной длины; различаются служебные слова по первым шести символам.

В поле операндов задается список параметров операции (мы называем их также параметрами оператора). Параметры в списке разделяются запятыми. В качестве параметра может употребляться идентификатор или константа (см. п. 1.4). Допускается умолчание параметра. В этом случае соответствующая позиция в списке остается пустой. Запятая или несколько подряд идущих запятых, возникающих в результате умолчания и стоящих перед символом точка с запятой(;) могут быть опущены.

1.4. Константы, идентификаторы. Константы, употребляемые в языке, записываются в форме, принятой в ФОРТРАНе.

Идентификатор в ОКС отличается от идентификатора ФОРТРАНа тем, что в его записи может использоваться знак минус (-). Начинается идентификатор с буквы; длина его не должна превышать шесть символов.

2. Операторы языка ОКС

В этом разделе описываются операторы языка ОКС, реализованные в настоящее время. Набор операторов будет пополняться по мере эксплуатации системы.

2.1. Оператор ZONE. Это неисполняемый оператор, описывает одну физическую зону (вещество), характеризующуюся однородным с физической точки зрения составом. Для того чтобы учесть такие случаи, когда изотопы в

зоне пространственно разделены и имеют разные температуры, оставлена возможность задать температуру T1 для каждого изотопа отдельно.

Оператор ZONE имеет вид:

ZONE: <номер зоны>,
<T>,<имя изотопа>,
<ядерная концентрация>,<T1>;

где T – общая температура зоны, К; T1 – температура данного изотопа, К. Если T1 не задана, то она по умолчанию считается равной T.

Температура и ядерные концентрации – вещественные числа. Имя изотопа – идентификатор.

Пример 1.

ZONE: 2,300., H,.067,O,.0335;

2.2. Оператор CONST. Вычисляет константы по одной из константных программ, входящих в ОКС. Полученному в результате массиву констант присваивается имя, которое задается параметром оператора.

Оператор CONST имеет вид:

CONST: <имя массива>,
<имя программы>,<режим>;

Имя массива – идентификатор. Под этим именем будет упоминаться полученный массив констант.

Имя программы – идентификатор. Он однозначно определяет КС, ее версию, а также программу этой КС, которую следует применить для расчета нужного типа констант.

Режим определяет выбор варианта работы программы и задается списком подпараметров, длина которого, а также смысл каждого из элементов зависит от конкретной программы.

Допустимые значения параметров оператора CONST здесь не приводятся. Они будут подробно описаны в инструкции, готовящейся к публикации.

Пример 2.

CONST:V,GAMMA,0;

ZONE:1,300.,FE,.0847;

ZONE:2,300.,H,.067,O,.0335

В этом примере оператор CONST применяется к двум физическим зонам. Он задает обращение к программе GAMMA (вариант программы АРАМАКО-G – [6]) для расчета гамма-констант. Массив результатов получит имя V. Третий параметр, значение которого равно нулю, означает, что константы должны быть получены в формате, пригодном для использования в РОЗ-6 [4].

2.3. Оператор DATA. Это неисполняемый оператор, применяется в тех случаях, когда параметр исполняемого оператора представляет собой массив чисел.

Оператор DATA имеет вид:

DATA <имя массива>,<список>;

Имя массива – идентификатор. Список – константа или последовательность констант, разделенных запятыми.

Пример 3.

CONST:G,GAMMA,1,NGCOM;

ZONE:1,300.,FE,.0847;

ZONE:2,300.,H,.067,O,.0335;

DATA:NGCOM,0,0,0,0,0,0,1,1,2,2,2,3,3,0,0;

Требуется рассчитать гамма-константы с помощью программы GAMMA. Третий параметр, равный 1, означает, что в массиве гамма-констант угловая зависимость переходов из одной группы энергий в другую будет задана в поточечном представлении. Четвертый параметр NGCOM - имя массива, описывающего свертку констант по группам энергий гамма-квантов. Массив состоит из 15 целых чисел и задается оператором DATA.

2.4. Оператор FORM. Предназначен для перевода массива констант из одного формата в другой.

Под форматом мы понимаем определенную структуру массива констант, т.е. порядок следования входящих в него физических величин. Перевод массива из одного формата в другой означает изменение порядка следования величин и, быть может, арифметические действия над конкретными из них.

Оператор FORM имеет вид:

FORM: <имя массива>,<формат>,

<имя массива>;

Все три параметра – идентификаторы:

первый параметр – имя массива, который вырабатывается оператором FORM;

второй параметр (формат) – имя формата;

третий параметр – имя исходного массива.

Преобразование форматов выполняется специальными программами – преобразователями.

В настоящее время в систему ОКС включено два преобразователя: ARVES [4] и JAST. Программа ARVES переводит массив констант из формата FMAC5A в формат ROZ-6, пригодный для использования в программе РОЗ-6 [4]. JAST переводит массив констант из формата FMAC5A в формат FMAC5B - формат «сопряженных» констант.

Пример 4.

CONST:B,GAMMA,0;

ZONE:1,300.,FE,.0847;

ZONE:2,300.,H,.067,O,.0335;

FORM:A,ROZ-6,B;

Массив B, полученный программой GAMMA, будет переведен из формата FMAC5A в формат ROZ-6 и получит имя A.

2.5. Оператор TAPE. Это неисполняемый оператор, предназначен для задания места во внешней памяти, куда должен быть помещен массив с данным именем. Этот массив вырабатывается одним из исполняемых

операторов (CONST, FORM) . Запись массива производится во время исполнения этих операторов.

Информация о месте во внешней памяти может быть задана или как номер канала, или как математический номер устройства и номер зоны. Это определяется тем исполняемым оператором, который вырабатывает массив.

Оператор TAPE имеет вид:

TAPE <имя массива>,<номер ВУ>,
<начало>,<длина>;

Номер ВУ – это или номер канала (тогда третий и четвертый параметры не имеют смысла и могут быть опущены), или математический номер внешнего устройства в десятичной системе.

Начало – начальный номер зоны в десятичной системе.

Длина – количество зон в десятичной системе.

Пример 5.

```
CONST:B,GAMMA,0;
ZONE:1,300.,0847;
ZONE:2,300.,H,.067,O,.0335;
FORM:A,ROZ-6,B;
TAPE:A,5;
```

Массив А в формате ROZ-6 будет записан в канал № 5, что соответствует магнитной ленте с математическим номером 45.

2.6. Оператор END. Это оператор конца задания.

Он имеет вид:

END::;

Двоеточие и точку с запятой можно опускать

Пример 6.

Окончательный вид задания для системы ОКС :

```
CONST:B,GAMMA,0;
ZONE:1,300.,FE,.0847;
ZONE:2,300.,H,.067,O,.0335;
FORM:A,ROZ-6,B;
TAPE:A,5;
END
```

3. Обращение к ОКС

Задание для ОКС пробивается на перфокартах на стандартном алфавитно-цифровом устройстве. Перфокарты подкладываются в пакет для запуска на машине после слова *EXECUTE наряду с другими начальными данными задачи.

Система ОКС организована как подпрограмма. Обращение к ней из программы пользователя выполняется с помощью оператора CALL (или CALL LOADGO).

Предусмотрена возможность обращения к ОКС из больших программ, занимающих всю память. В этом случае перед началом работы ОКС оперативная память, регистры, таблица загрузки, относящаяся к основной

программе, запомнятся на ресурсе ОКС, а после окончания работы ОКС восстановятся.

4. Структура системного наполнения ОКС

Системную часть ОКС составляют несколько программ.

1. *Анализатор* – эта программа переводит текст задания на внутренний язык; здесь же выполняется синтаксический контроль правильности текста.

2. *Интерпретатор* – его функция состоит в последовательном вызове процедур для исполняемых операторов.

3. *Процедуры для исполняемых операторов* – выполняют действия, предписанные соответствующими операторами; процедура PRCONS, например, осуществляет подготовку данных и вызов программы, указанной в операторе CONST.

4. *Сервисные программы* – одна из них, TRO, доступна пользователю; обращение к ней выполняется после обращения к ОКС. Программа выдает список имен изотопов, участвовавших в задании, массив ядерных концентраций этих изотопов, массив зонных температур и другую информацию.

Заключение

В настоящее время ведутся работы по включению в систему ОКС программы расчета термализационных констант, разработанной в ИАЭ им. И.В.Курчатова. В связи с этим будет введен новый оператор COMBINE, проект которого дан в [3].

В дальнейшем предполагается создать преобразователь, реализующий свертку констант, а также пополнить функциональное наполнение системы программами расчета констант для нейтронных реакций, запаздывающих нейтронов, констант для расчета энерговыделения и т.д.

Список литературы

1. Базазянц Н.О. и др. АРАМАКО-2F - система обеспечения нейтронными константами расчетов переноса излучения в реакторах и защите: Препринт ИПМ АН СССР, № 34, 1976.
2. Марин С.В., Марковский Д.В., Шаталов Г.Е. Программа расчета пространственно-энергетического распределения нейтронов в одномерной геометрии (BLANK): Препринт ИАЭ-2832. М., 1977.
3. Гермогенова Т.А и др. Объединенная система константного обеспечения (ОКС). Общее описание: Препринт ИПМ АН СССР, №140, 1979.
4. Волощенко А.М. и др. РОЗ-6 – система программ для решения уравнения переноса в одномерных геометриях. Версия 2: Инструкция. М.: ИПМ АН СССР, 1980.
5. Wilkes M.V. The outer and inner syntax of a programming language. – Computer J., 1963, № 3.

6. Абагян А.А. и др. АРАМАКО-G - система обеспечения многогрупповыми константами расчетов полей гамма-излучения в реакторах и защите: Препринт ИПМ АН СССР, №122, 1978.

Статья поступила в редакцию 27 июля 1981 г.

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика
и техника ядерных реакторов, 1983, вып. 4(33), с. 72-75.

Доклады Академии наук СССР
1985. Том 285, №5, стр.1091-1096

УДК 535.361.551.521

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Т.А.Гермогенова

ОБ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ АТМОСФЕРНОЙ ОПТИКИ

(Представлено академиком А.Н. Тихоновым 11 XI 1984)

Определению характеристик атмосферы и подстилающей поверхности по информации со спутников об отраженном солнечном излучении посвящено большое число работ (см., например, [1-4] и библиографию к ним). Обычно задача о коэффициенте отражения (альбедо) подстилающей поверхности и задача об оптических параметрах атмосферы рассматриваются изолированно и делается ряд упрощающих предположений. Операторная символика, развитая в теории разрешимости краевых задач для уравнения переноса, позволяет выразить наблюдаемые величины непосредственно через преобразования искомым характеристик. Это облегчает рассмотрение общей задачи и анализ различных приближений, открывает некоторые пути развития этих приближений.

Рассмотрим плоскопараллельную атмосферу $(0, z^*)$ с горизонтально неоднородной отражающей поверхностью $z = z^*$ и воспользуемся общепринятыми обозначениями $\Psi(\mathbf{r}, \Omega)$ - интенсивность излучения в направлении $\Omega = \{\mu, \varphi\}$ в точке

$$\mathbf{r} = \{z, \mathbf{r}_\perp\}, \quad \tau(z) = \int_0^z \sigma(z) dz \quad - \quad \text{оптическая глубина,}$$

$0 \leq \tau(z) \leq \tau^* = \tau(z^*)$, $\sigma(z)$ - полный коэффициент ослабления, \hat{L} , \hat{S} и \hat{R} - (линейные) операторы переноса, рассеяния и отражения, F и f - распределения источников излучения, внутренних и внешних Ψ_- и Ψ_+ - распределения интенсивности излучения, входящего в атмосферу ($\Omega \mathbf{n} < 0$, \mathbf{n} - внешняя нормаль) и выходящего из нее ($\Omega \mathbf{n} > 0$). Общая краевая задача для уравнения переноса излучения в атмосфере записывается в виде

$$\hat{L}\Psi = \hat{S}\Psi + F, \quad \Psi_- = \hat{R}\Psi_+ + f. \quad (1)$$

В соответствии с физикой процессов взаимодействия излучения с веществом будем предполагать выполненными условия

$$\hat{S} > 0, \quad \hat{S}[1] = \bar{S} \leq 1, \quad \hat{R} \geq 0, \quad \hat{R}[1] \leq \bar{R} \leq 1. \quad (2)$$

В тех случаях, когда $\bar{S} \bar{R} < 1$, задача (1) однозначно разрешима [5] в классическом смысле. Найдем выражения для разрешающих операторов в следующих частных задачах.

1) Решение задачи

$$\hat{L}\Psi = F, \quad \Psi_- = 0$$

находится интегрированием вдоль характеристик:

$$\Psi(r, \Omega) = \hat{L}_0^{-1} F(r, \Omega) = |\mu|^{-1} \times \begin{cases} \int_0^z \exp\left(-\frac{\tau(z) - \tau(z')}{\mu}\right) F\left(r - \frac{z - z'}{\mu} \Omega, \Omega\right) dz', & \mu > 0, \\ \int_0^{z^*} \exp\left(-\frac{\tau(z') - \tau(z)}{|\mu|}\right) F\left(r - \frac{z' - z}{|\mu|} \Omega, \Omega\right) dz', & \mu < 0. \end{cases}$$

2) Решение задачи без рассеяния и внешних источников

$$\hat{L}\Psi = F, \quad \Psi_- = \hat{R}\Psi_+$$

также легко определяется:

$$\Psi = \hat{L}_R^{-1} F = \begin{cases} \hat{L}_0^{-1} F, & \mu > 0, \\ \hat{L}_0^{-1} F + \exp\left(-\frac{\tau^* - \tau(z)}{|\mu|}\right) \hat{R}[\hat{L}_0^{-1} F|_{\mu > 0}], & \mu < 0. \end{cases}$$

3) Решение задачи с внутренним источником

$$\hat{L}\Psi = \hat{S}\Psi + F, \quad \Psi_- = \hat{R}\Psi_+$$

может быть представлено рядом Неймана

$$\Psi = \hat{G}_R F = \sum_{k=0}^{\infty} (\hat{L}_R^{-1} \hat{S})^k \hat{L}_R^{-1} F = (\hat{E} - \hat{L}_R^{-1} \hat{S})^{-1} \hat{L}_R^{-1} F,$$

сходящимся при $\bar{S} \bar{R} < 1$.

4) Решения задач с граничными источниками

$$\hat{L}\Psi = \hat{S}\Psi, \quad \Psi_- = \hat{R}\Psi_+ + f^0,$$

$$\hat{L}\Psi = \hat{S}\Psi, \quad \Psi_- = \hat{R}\Psi_+ + f^*,$$

где f^0 отлично от 0 лишь при $z = 0$, $\mu > 0$, а f^* - при $z = z^*$, $\mu < 0$, также описываются рядами Неймана. При $f = f^*$ решение определяется формулой

$$\Psi = \hat{G}_R^* f^* = \hat{G}_R \hat{S} g^* + g^*, \quad (3)$$

где

$$g^*(\mathbf{r}, \Omega) = f^* \left(\mathbf{r} - \frac{z^* - z}{|\mu|} \Omega, \Omega \right) \exp \left(- \frac{\tau^* - \tau(z)}{|\mu|} \right),$$

а если $f = f^0$, то

$$\Psi = \hat{G}_R^0 f^0 = \hat{G}_R \hat{S} g^0 + \hat{G}_R^* \hat{S} g^0 + g^0,$$

где

$$g^0(\mathbf{r}, \Omega) = f^0 \left(\mathbf{r} - \frac{z}{\mu} \Omega, \Omega \right) \exp \left(- \frac{\tau(z)}{\mu} \right).$$

С помощью разрешающих операторов $\hat{G}_R, \hat{G}_R^0, \hat{G}_R^*$ решение общей краевой задачи может быть представлено в виде

$$\Psi = \hat{G}_R F + \hat{G}_R^0 f^0 + \hat{G}_R^* f^*. \quad (4)$$

Заметим, что из принципа максимума для уравнения переноса следуют [5] оценки: $\hat{L}_R^{-1}[1] \leq 1, \hat{G}_R^0[1] \leq 1$ при $\bar{S} \bar{R} < 1$. Операторы пропускания и отражения, используемые в теории переноса, являются частными значениями операторов \hat{G}_R^0 и \hat{G}_R^* (обычно при $\hat{R} \equiv 0$). Так, функции $\hat{G}_0^0 f^0 \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu < 0}}, \hat{G}_0^* f^* \Big|_{\substack{z=z^* \\ \mu > 0}}$ описывают излучение, отраженное слоем $(0, z^*)$, а $\hat{G}_0^0 f^0 \Big|_{\substack{z=z^* \\ \mu > 0}}, \hat{G}_0^* f^* \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu > 0}}$ - пропущенное (при $f = f^0$ и $f = f^*$ соответственно).

2. Обратные задачи атмосферной оптики обычно сводятся к определению отклонений (вариаций) оптических параметров и альбедо от некоторых стандартных значений, отвечающих операторам \hat{S}_0 и \hat{R}_0 соответственно, по вариациям наблюдаемых величин, например, значений отраженного излучения $\Psi \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu < 0}}$.

Рассмотрим сначала задачу об определении вариации оператора отражения. Пусть $\hat{R} = \hat{R}_0 + \hat{R}_1, F = 0, f^* = 0$, а функция f^0 отвечает солнечному излучению:

$$f^0 = \pi Q_0 \delta(\Omega - \Omega_0).$$

Тогда задача (1) принимает вид

$$\hat{L} \Psi_R = \hat{S} \Psi_R, \quad \Psi_{R-} \Big|_{z=0} = f_0, \quad \Psi_{R-} \Big|_{z=z^*} = \hat{R}_0 \Psi_{R+} + \hat{R}_1 \Psi_{R+},$$

Полагая $f^* = \hat{R}_1 \Psi_{R+}$, найдем в соответствии с (4)

$$\Psi_R = \hat{G}_{R_0}^0 f^0 + \hat{G}_{R_0}^* \hat{R}_1 \Psi_{R^+}.$$

Следовательно,

$$\hat{R}_1 \Psi_{R^+} = (\hat{E} - \hat{R}_1 \hat{G}_{R_0}^*)^{-1} \hat{R}_1 \hat{G}_{R_0}^0 f^0,$$

и поэтому

$$\Psi_{R_0+R_1} - \Psi_{R_0} = \hat{G}_{R_0}^* (\hat{E} - \hat{R}_1 \hat{G}_{R_0}^*)^{-1} \hat{R}_1 \hat{G}_{R_0}^0 f^0. \quad (5)$$

Это - общая формула, связывающая изменение решения задачи о рассеянии солнечного излучения в атмосфере с подстилающей поверхностью с изменением отражающих свойств этой поверхности (оператором \hat{R}_1). Полагая $\hat{R}_0 \equiv 0$ в (5), найдем формулу, выражающую решение задачи с отражением ($\hat{R} = \hat{R}_1$) через решения задач без отражения. Учитывая равенство

$$(\hat{E} - \hat{R} \hat{G}_0^*)^{-1} \hat{R} = \hat{R} (\hat{E} - \hat{G}_0^* \hat{R})^{-1}$$

и рассматривая (5) для $z = 0$, $\mu < 0$, получим «уравнение космической фотографии», предложенное в [2].

Аналогичным образом можно найти выражение для изменения решения $\Psi_{S_0+S_1} - \Psi_{S_0}$ при изменении оператора рассеяния на величину \hat{S}_1 и, наконец, более сложное выражение в общей задаче:

$$\Psi = \Psi_{L_0, S_0, R_0} = F_{L_0, S_0, R_0} [\hat{L} - \hat{L}_0, \hat{S} - \hat{S}_0, \hat{R} - \hat{R}_0]. \quad (6)$$

Если известны в некоторых точках значения левых частей (5), (6), то эти соотношения могут рассматриваться как уравнения для параметров (или функций), определяющих операторы $\hat{L} - \hat{L}_0$, $\hat{S} - \hat{S}_0$, $\hat{R} - \hat{R}_0$.

Решение практических задач осуществляется в настоящее время в определенных упрощающих предположениях.

3. Первый тип упрощений опирается на предположение о малости величин $\hat{L} - \hat{L}_0$, $\hat{S} - \hat{S}_0$, $\hat{R} - \hat{R}_0$. Для их определения Г.И.Марчуком [6] предложено использовать теорию возмущений. В линейном приближении задача об определении оптических параметров атмосферы и задача об альbedo поверхности решаются независимо. Пусть \hat{L}_0 , \hat{S}_0 , \hat{R}_0 , а следовательно, и решение «невозмущенной задачи» $\Psi_0(z, \Omega)$ не зависят от горизонтальных координат \mathbf{r}_\perp , \mathbf{J}_k - наблюдаемые функционалы отраженного излучения

$$\mathbf{J}_k = \int_{\mu < 0} P_k(\Omega) \Psi(z, \mathbf{r}_\perp, \Omega) d\Omega \Big|_{z=0}, \quad k = 1, 2, \dots, K,$$

а ρ_m , $m = 1, 2, \dots, M$, - искомые параметры атмосферы. Этими параметрами могут быть плотности различных компонент или оптические характеристики

– коэффициент ослабления, коэффициент рассеяния и т.п. Согласно [6] вариации δJ_k и $\delta \rho_m$ связаны соотношением

$$\delta J_k = \sum_{m=1}^N W_{km} \delta \rho_m, \quad (7)$$

где W_{km} – функция чувствительности функционала J_k к оптическому параметру ρ_m . Пусть Ψ_k^* – решение сопряженной задачи

$$\hat{L}^* \Psi_k^* = \hat{S}^* \Psi_k^*, \quad \Psi_{k+}^* = \begin{cases} p_k & \text{при } z=0, \quad \mu < 0, \\ \hat{R}^* \Psi_{k-}^* & \text{при } z=z^*, \quad \mu > 0, \end{cases} \quad (8)$$

Ψ_k^* – функция ценности метеорологической информации, а $\psi|_{\mu < 0} = \Psi_k^*$, $\psi|_{\mu > 0} = \Psi_k - g^0$ – интенсивность рассеянного излучения. Функция ψ удовлетворяет краевой задаче

$$(\hat{L} - \hat{S})\psi = \hat{S}g^0, \quad \psi_- = \hat{R}\psi_+ + \hat{R}g^0. \quad (9)$$

Решения задач (8) и (9) связывает интегральное соотношение [5]

$$J_k = \iiint \Psi_k^* (\hat{L} - \hat{S})\psi dz d\Omega + \int \hat{R}g^0 \Psi_{k-}^*(z^*, \Omega) d\Omega,$$

которое дает для коэффициентов чувствительности W_{km} формулу

$$W_{km} = \iiint \Psi_k^* \hat{A}_m \psi dz d\Omega + \int \Psi_{k-}^* \hat{B}_m g^0 d\Omega,$$

где $\hat{A}_m = \partial(\hat{L} - \hat{S})/\partial \rho_m$, $\hat{B}_m = \partial \hat{R}/\partial \rho_m$.

Аппарат функций чувствительности сейчас широко используется при оценке погрешностей расчета различных функционалов решения в зависимости от точности задания входных данных в задачах о переносе нейтронов и гамма-квантов [7]. Этот же аппарат может быть использован для выбора наиболее информативных функционалов J_k , обеспечивающих хорошую обусловленность системы (7).

4. В задаче об определении альbedo существенные упрощения возникают, если предположить, что операторы \hat{L} , \hat{S} , \hat{R}_0 не зависят от r_\perp , а вариации отражения определяются законом Ламберта. В этом случае оператор \hat{R}_1 факторизуется:

$$\hat{R}_1 \Psi_+(r_\perp, \Omega) = q(r_\perp) \hat{W} \Psi_+(r_\perp), \\ \hat{W} \Psi_+(r_\perp) = \int_{\mu > 0} w(\Omega) \Psi(z^*, r_\perp, \Omega) d\Omega,$$

и формула (5) принимает вид

$$\Psi_R(r, \Omega) - \Psi_{R_0}(z, \Omega) = \hat{G}_{R_0}^* \Phi(r, \Omega),$$

где

$$\Phi(\mathbf{r}_\perp) = q(\mathbf{r}_\perp) (\hat{E} - \hat{W}\hat{G}_{R_0}^* q(\mathbf{r}_\perp))^{-1} \hat{W}\hat{G}_{R_0}^0 f^0.$$

Для плоскопараллельной атмосферы $\hat{W}\hat{G}_{R_0}^0 f^0$ - число w_0 , а выражение $\hat{W}\hat{G}_{R_0}^* q(\mathbf{r}_\perp)$ может быть представлено интегралом $\int d\mathbf{r}'_\perp k_0(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) q(\mathbf{r}'_\perp)$, где ядро $k_0(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|)$ отвечает усредненному с весом $w(\Omega)$ по Ω (для $\Omega \mathbf{n} > 0$) распределению излучения в точке $\mathbf{r} = \{z^*, \mathbf{r}_\perp\}$ от точечного изотропного источника, локализованного в точке $\{z^*, \mathbf{r}'_\perp\}$. Поэтому

$$\Phi(\mathbf{r}_\perp) = w_0 q(\mathbf{r}_\perp) [1 - \int k_0(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|) q(\mathbf{r}'_\perp) d\mathbf{r}'_\perp]^{-1}. \quad (10)$$

С другой стороны, в соответствии с определением (3) при $\Omega = \{\mu, \Omega_\perp\}$ выполняется равенство

$$\begin{aligned} [\Psi_R(\mathbf{r}, \Omega) - \Psi_{R_0}(z, \Omega)]_{\mu < 0} = \\ = \Phi\left(\mathbf{r}_\perp - \frac{z}{\mu} \Omega_\perp\right) \exp\left(-\frac{\tau^* - \tau(z)}{|\mu|}\right) + \int K_0(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|, z, \Omega) \Phi(\mathbf{r}'_\perp) d\mathbf{r}'_\perp. \end{aligned} \quad (11)$$

Ядро $K_0(|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|, z, \Omega)$ отвечает угловому распределению рассеянного атмосферой излучения от изотропного точечного источника, расположенного в точке $\{z^*, \mathbf{r}'_\perp\}$. При $q(\mathbf{r}_\perp) = \text{const}$ из формул (10)-(11) вытекает известное соотношение [8] для определения альбедо атмосферы при наличии однородной подстилающей поверхности.

Чтобы определить альбедо $q(\mathbf{r}_\perp)$ по данным об отраженном излучении, нужно решить 2 уравнения Фредгольма 2-го рода (вообще говоря, вне круга сходимости ряда Неймана): (11) и (10). Для малых q ограничиваются линейным приближением, считая $\Phi = W_0 q$. Зависимость ядер уравнений (10)-(11) от $|\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|$ позволяет воспользоваться аппаратом преобразований Фурье для их решения [2-4]. Альтернативный подход заключается в прямом решении этих уравнений с привлечением методов решения некорректных обратных задач.

Автор пользуется возможностью высказать благодарность Г.И.Марчуку – инициатору этой работы и участникам семинара, где она обсуждалась.

Литература

1. *Малкевич М.С., Бадаев В.В.* – Исслед. Земли из космоса, 1984, № 4, с.45-53.
2. *Золотухин В.Г., Усиков Д.А., Грушин В.А.* – Там же, 1980, №3, с. 58-68.
3. *Мишин И.В., Сушкевич Т.А.* – Препринт ИПМ АН СССР, 1982, № 87, 26 с.
4. *Малкевич М.С., Мишин И.В.*- Исслед. Земли из космоса, 1983, № 3, с.104-112.
5. *Гермогенова Т.А.* Препринт ИПМ АН СССР, 1982, № 139, 28 с.
6. *Марчук Г.И.* – Космические исслед., 1964, т.2, вып. 3, с.462-477.
7. *Болятко В.В., Вырский М.Ю., Илюшкин А.И. и др.* Погрешности расчетов защиты от излучений. М.: Энергоиздат, 1983, 176 с.
8. *Соболев В.В.* Рассеяние света в атмосферах планет. М.: Наука, 1972, 335 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЗАДАЧ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

Т.А. Гермогенова

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1985, вып. 4, с. 15-21.

Обсуждены типичные вычислительные задачи, возникающие при проектировании и эксплуатации ядерно-технических установок. Методы их решения опираются на многогрупповую аппроксимацию и принцип пространственного разделения. Дана общая характеристика методов дискретных ординат, которые наиболее часто используются в задачах радиационной защиты. Приведен обзор используемых программ.

THE MATHEMATICAL SERVICE OF THE RADIATION SHIELDING PROBLEMS. T.A.GERMOGENOVA. Typical numerical problems appearing at design and exploitation of nuclear technical devices are considered. The methods of solution are based on multigroup approximation and on the principle of the space division. The general characteristic of the discrete ordinate methods is given. They are used often in radiation shielding problems. The review of the known codes is done.

В последние 15-20 лет внимание к задачам радиационной защиты существенно повысилось. Развитие ядерной энергетики порождает широкий круг проблем, в которых нужна оценка уровней радиационных полей (производство ядерного топлива, проектирование и эксплуатация энергетических установок, защита окружающей среды и т.п.). Диапазон требований к точности и полноте информации оказывается весьма большим. Уровень квалификации специалистов различных направлений, сталкивающихся с этими проблемами, должен быть очень высоким. Поэтому развитие математического и константного обеспечения задач радиационной защиты шло преимущественно по линии создания универсальных систем с достаточно хорошим доступом. В связи с необходимостью анализа и распространения таких систем в США в 1962 г. был создан информационный центр по радиационной защите RSIC. К 1982 г. в RSIC собрана большая коллекция программ и библиотек ядерных данных [1], которая активно распространяется. Наиболее важные программы, с которыми можно проводить расчеты для двух и трехмерных моделей, близких к реальным, ориентированы на самые мощные современные ЭВМ (Cray 1, CDC 7600, IBM-3033). В Советском Союзе ряд важных работ в этом направлении ведется в рамках координационных планов.

ОБЩИЕ ЗАДАЧИ РАСЧЕТА

Основной целью вычислительных работ в задачах о радиационной защите ядерных энергетических установок является обеспечение

необходимой информацией всех разделов технического проекта. Характерные этапы этих работ указаны на рис. 1 [2].

Наиболее важные и сложные работы выполняются на первом этапе при расчете потоков нейтронов и гамма-квантов в активной зоне и защите. Эта информация является исходной для всех остальных расчетов. Радиационная защита современных энергетических установок представляет весьма сложную конструкцию больших размеров (рис. 2,3) . Упрощенная схема радиационной защиты для корпусного реактора изображена на рис 4 [5], где указаны примерные кратности ослабления потоков на различных удалениях от активной зоны и характерные требования к точности их определения.

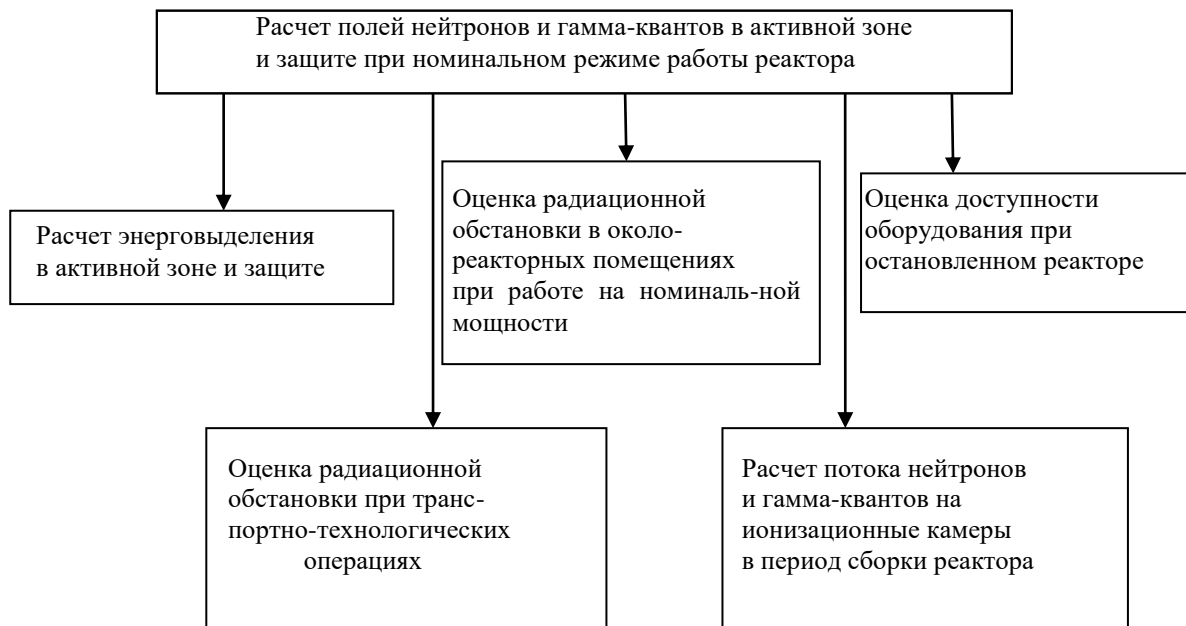


Рис.1. Характерные этапы вычислительных работ при проектировании радиационной защиты.

Необходимость рассмотрения задач о глубоком проникновении излучения в условиях сложной конструкции с неоднородностями и пустотами вынуждает в качестве основного математического аппарата использовать кинетическое уравнение со сложной пространственной, угловой и энергетической зависимостью коэффициентов. Для достижения нужной расчетной точности в основу численного решения кинетического уравнения положены два принципа разбиения полной задачи на более простые:

- 1) многогрупповая аппроксимация по энергетической переменной;
- 2) пространственное разделение.

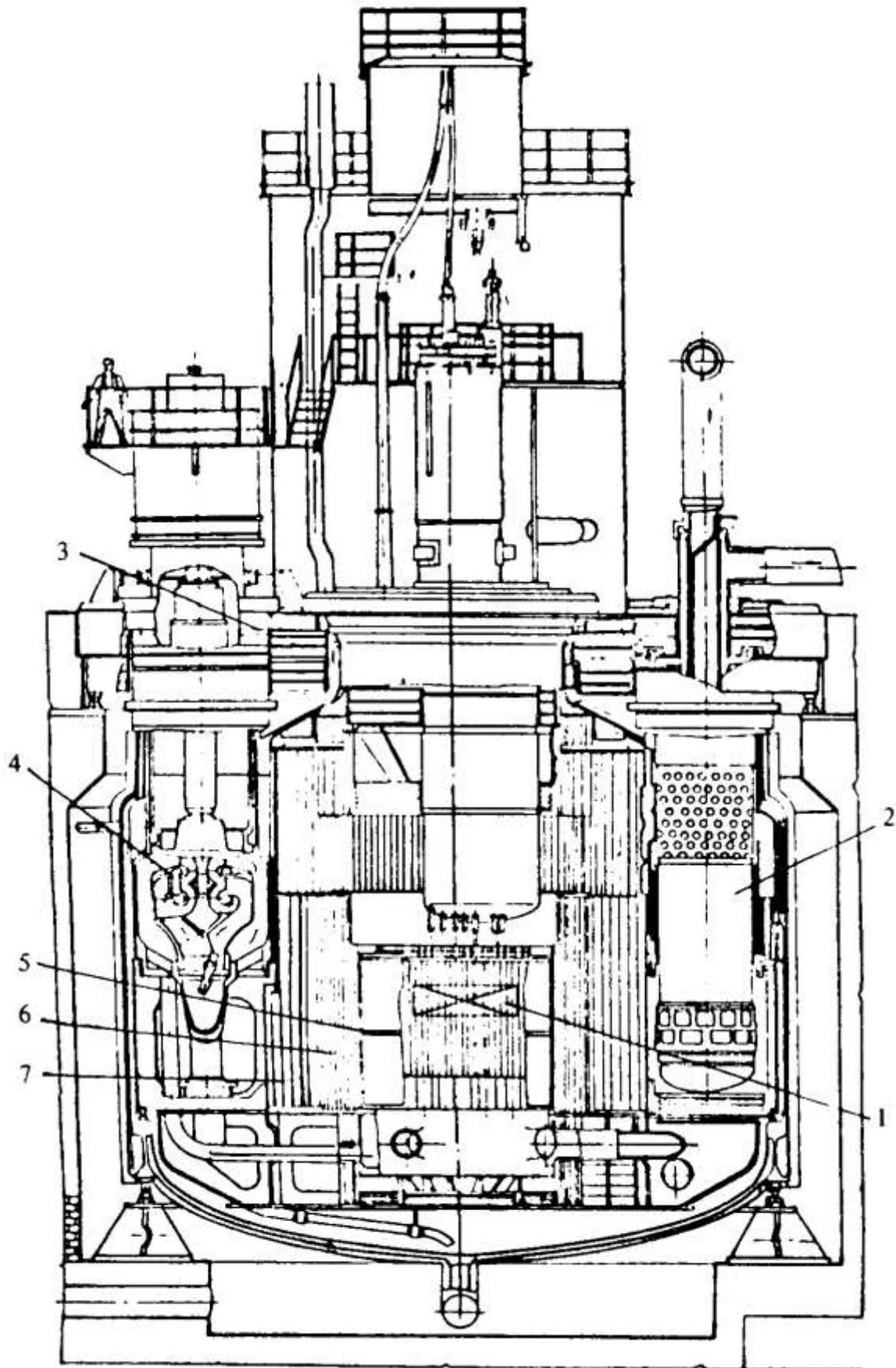


Рис. 2. Реактор на быстрых нейтронах БН-600 [3]: 1-активная зона; 2- теплообменник; 3- вращающаяся защитная пробка; 4- насос; 5- неподвижная защита; 6- защита из труб, заполненных графитом; 7- защита из труб, заполненных борированным графитом.

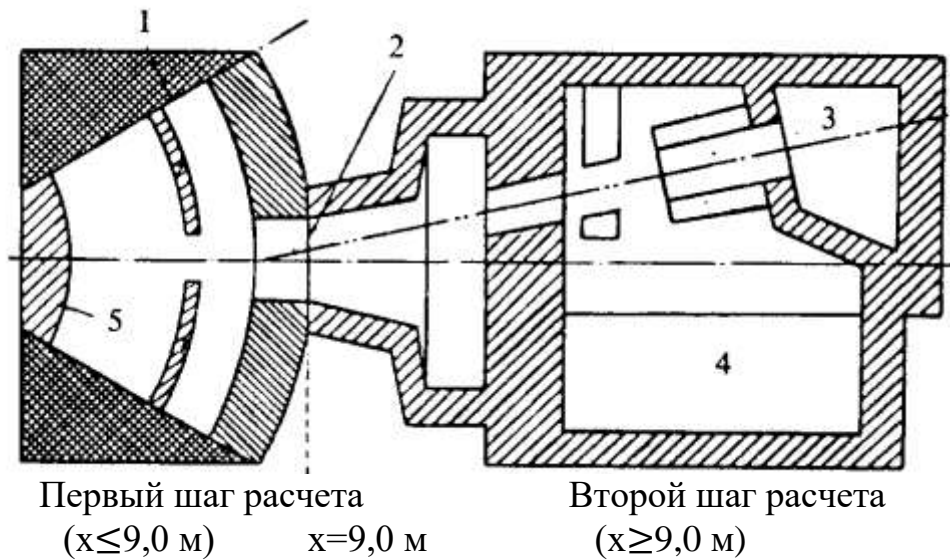


Рис. 3. Расчетная модель установки INTOR-J [4]:
 1-отражающая поверхность; 2- источник для второго шага расчета;
 3- зал ионного источника; 4- зал криогенных насосов; 5- плазма

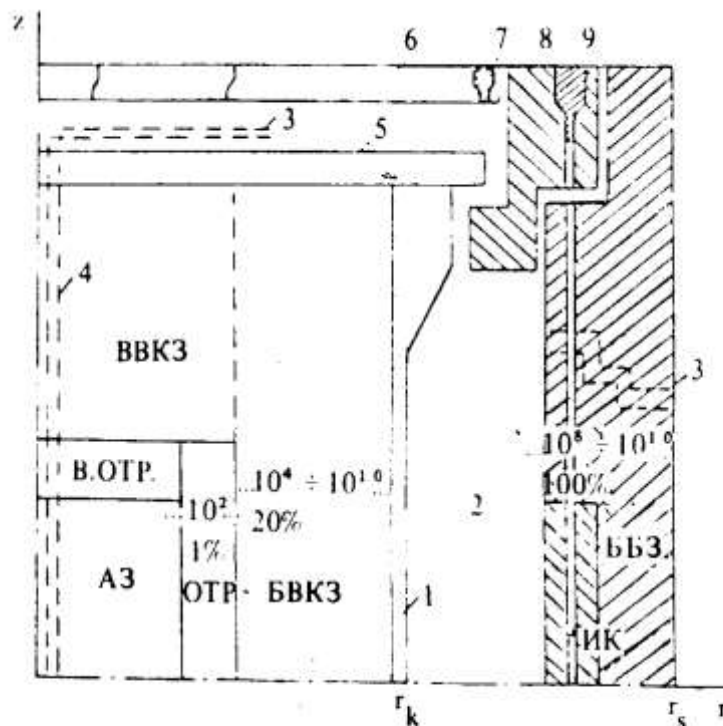


Рис.4. Упрощенная обобщенная схема расположения функциональных зон защиты энергетического реактора (верхняя половина):
 ВВКЗ верхняя внутрикорпусная защита; В.ОТР.- верхний отражатель (или ЗВ); АЗ- активная зона; ОТР- боковой отражатель (или ЗВ); БВКЗ-боковая внутрикорпусная защита; ББЗ- боковая биологическая защита; ИК-ионизационные камеры; 1-корпус (кожух) реактора; 2- реакторная полость; 3-проходки под коммуникации в защите; 4- металлоконструкции (технологические каналы, приводы СУЗ и т.д.); 5- крышка реактора (верхняя плита); 6- верхнее защитное перекрытие; 7- отверстия для доступа; 8- локальная защита; 9- защитная пробка каналов ИК.
 ЗВ - зона воспроизводства.

Первый из них выделяет как особую задачу построение константного обеспечения расчетов радиационной защиты. Наиболее полно у нас эта задача решается сейчас системой АРАМАКО [6]. База данных этой системы, используемая при расчетах радиационной защиты, организована в виде бинарных библиотек. Сервисное обслуживание осуществляет пакет константных программ ОКС (объединенная константная система) [7]. Этот пакет включает помимо константных программ цикла АРАМАКО еще и программы расчета термализационных констант [8], программы, обеспечивающие организацию форматов, необходимых для дальнейшего расчета уравнения переноса, основного и сопряженного, программы расчета реакторных констант и т.п. В целях расширения константной базы формируются библиотеки для специальных задач, осваиваются зарубежные библиотеки, строится мультигрупповая библиотека в рамках системы АРАМАКО.

Принцип пространственного разделения означает, что радиационные поля определяются последовательно: сначала в активной зоне, затем в слоях защиты (рис.5). Задачи для областей защиты решаются одна за другой, будучи связанными лишь источниками излучения и соответствующими граничными условиями. Эти условия определяются алгоритмами сшивки и перекрывания областей.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Методы численного решения уравнения переноса должны удовлетворять прежде всего требованиям достоверности результатов, т. е. обеспечивать достаточно высокую точность количественной информации и сохранения физически очевидных свойств, присущих решению, таких как положительность, монотонность, выполнение балансных соотношений. С другой стороны, используемые алгоритмы должны быть удобны в эксплуатации. При сравнительной простоте они должны охватывать достаточно широкий класс задач. Подробный обзор методов, используемых за рубежом в задачах радиационной защиты, содержится в [9].

В наибольшей степени современным требованиям удовлетворяют методы дискретных ординат (МДО). Эти методы базируются на сеточной аппроксимации краевой задачи для одногруппового уравнения переноса и, как правило, на итерационных процессах с использованием различных приемов ускорения сходимости. Они состоят из двух основных групп [10]: методов характеристик, опирающихся на прямое интегрирование уравнения переноса в ячейках разностной сетки; DS_N - методов, основой которых является соотношение баланса для уравнения переноса. DS_N -схемы оказываются более точными при преобладающей роли рассеяния, в расчете интегральных величин. Характеристические схемы обладают преимуществом в задачах с сильным поглощением, сложной гетерогенностью, пустотами. Существенными недостатками традиционных форм МДО являются лучевые

эффекты, немонотонность DS_N –схем и неконсервативность характеристических.

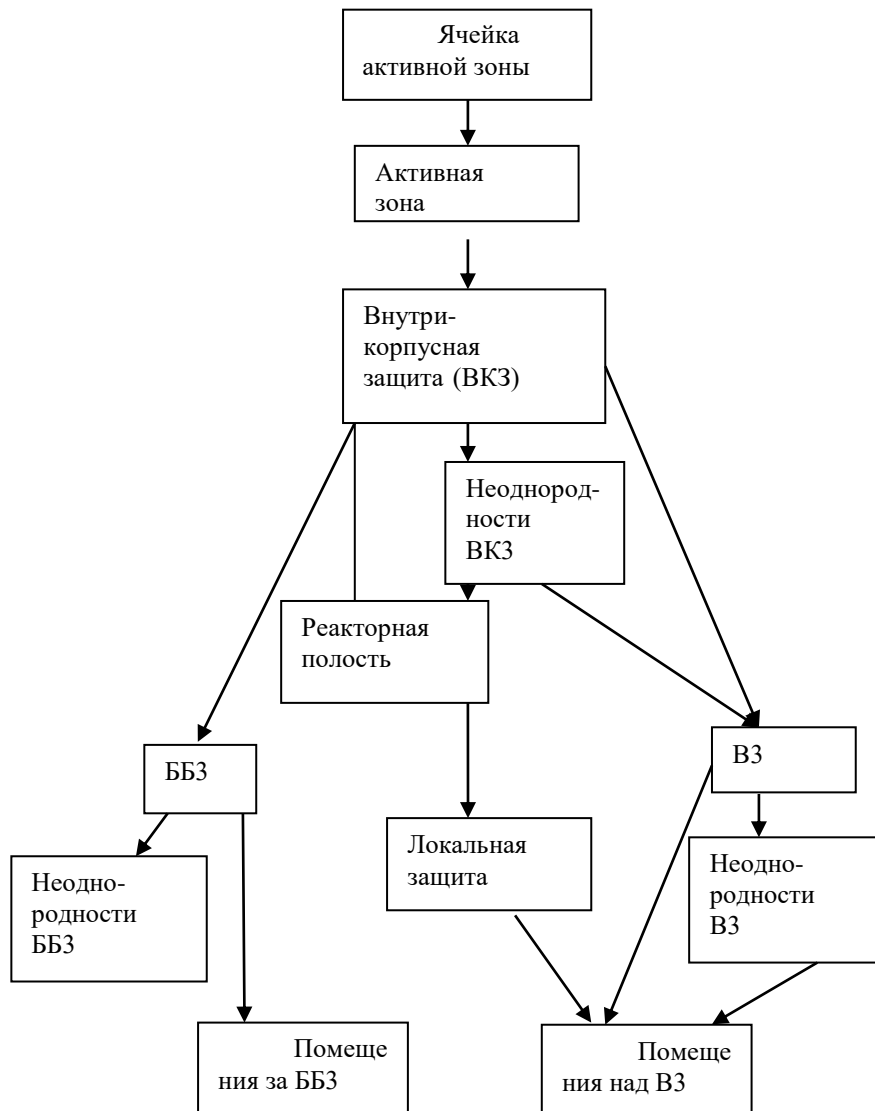


Рис. 5. Основные этапы расчета радиационных полей в областях защиты и последовательность передачи информации (ВЗ – верхняя защита).

К настоящему времени построены успешно работающие варианты DS_N –схем с монотонизацией для одномерных задач [11].

На рис. 6 приведены результаты расчета известного теста Рида для одномерной плоской геометрии. Колебания в решении, возникающие в традиционных схемах снимаются приемами монотонизации. Причины немонотонности приближенных решений лежат в сложной локальной структуре точного решения. Для характерных задач эта структура хорошо изучена. Однако эффективных вычислительных алгоритмов пока нет.

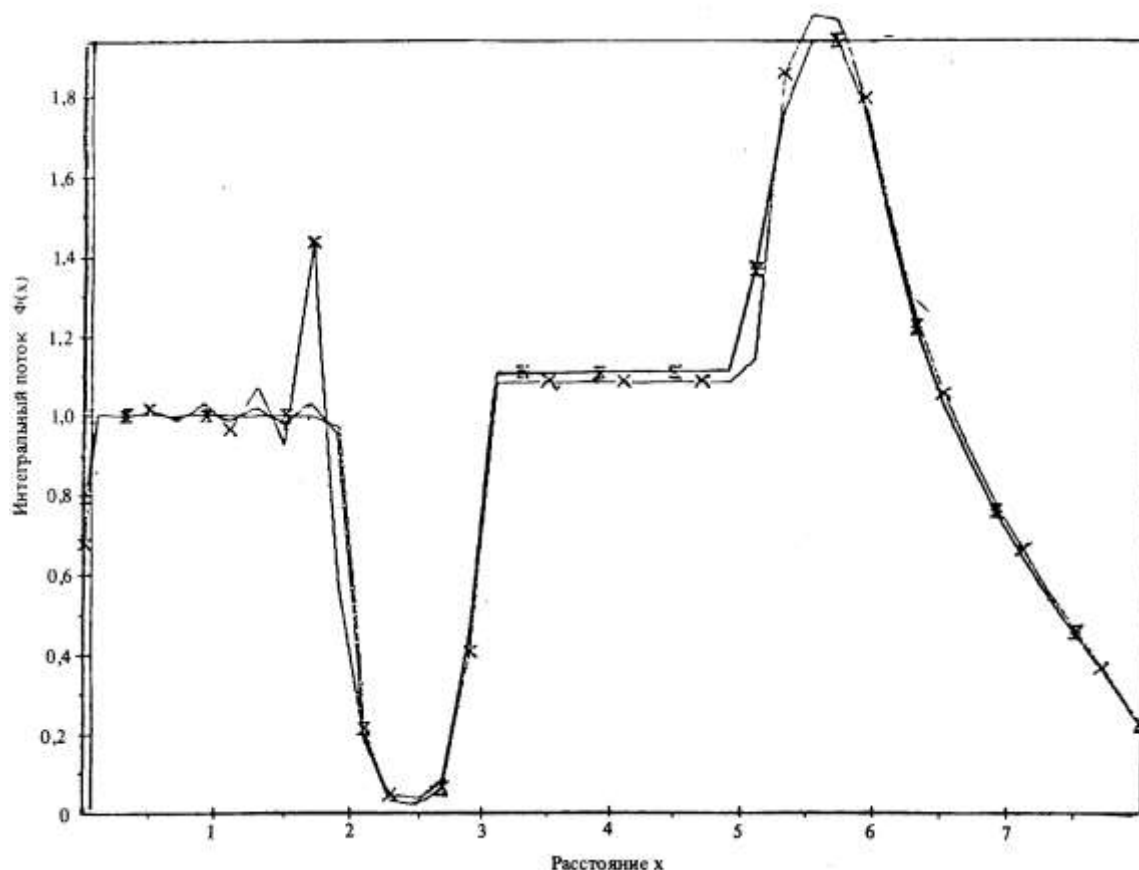


Рис.6. Результаты расчета теста Рида для одномерной плоской геометрии: — DS_N - метод; x — экспоненциальный метод; X — MDS_N - метод.

На рис 7 [12] изображено угловое распределение выходящего излучения в известном тесте Латропа. Для точной передачи такой разрывной функции нужны весьма подробные сетки. Разложение по сферическим гармоникам не может хорошо ее описать, DS_N - схемы, давая неплохой средний результат, приводят к большой погрешности в локальных значениях.

К настоящему времени создан ряд комбинированных схем, опирающихся как на соотношение баланса, так и на интегральную форму уравнения переноса в ячейке для задач с прямоугольной геометрией [13, 14]. Построены первые схемы высокого порядка в задаче со сферической геометрией [11]. Следующим шагом должно быть распространение подобной техники на такие важные задачи, как задачи в r -, z - и r -, θ - геометрии.

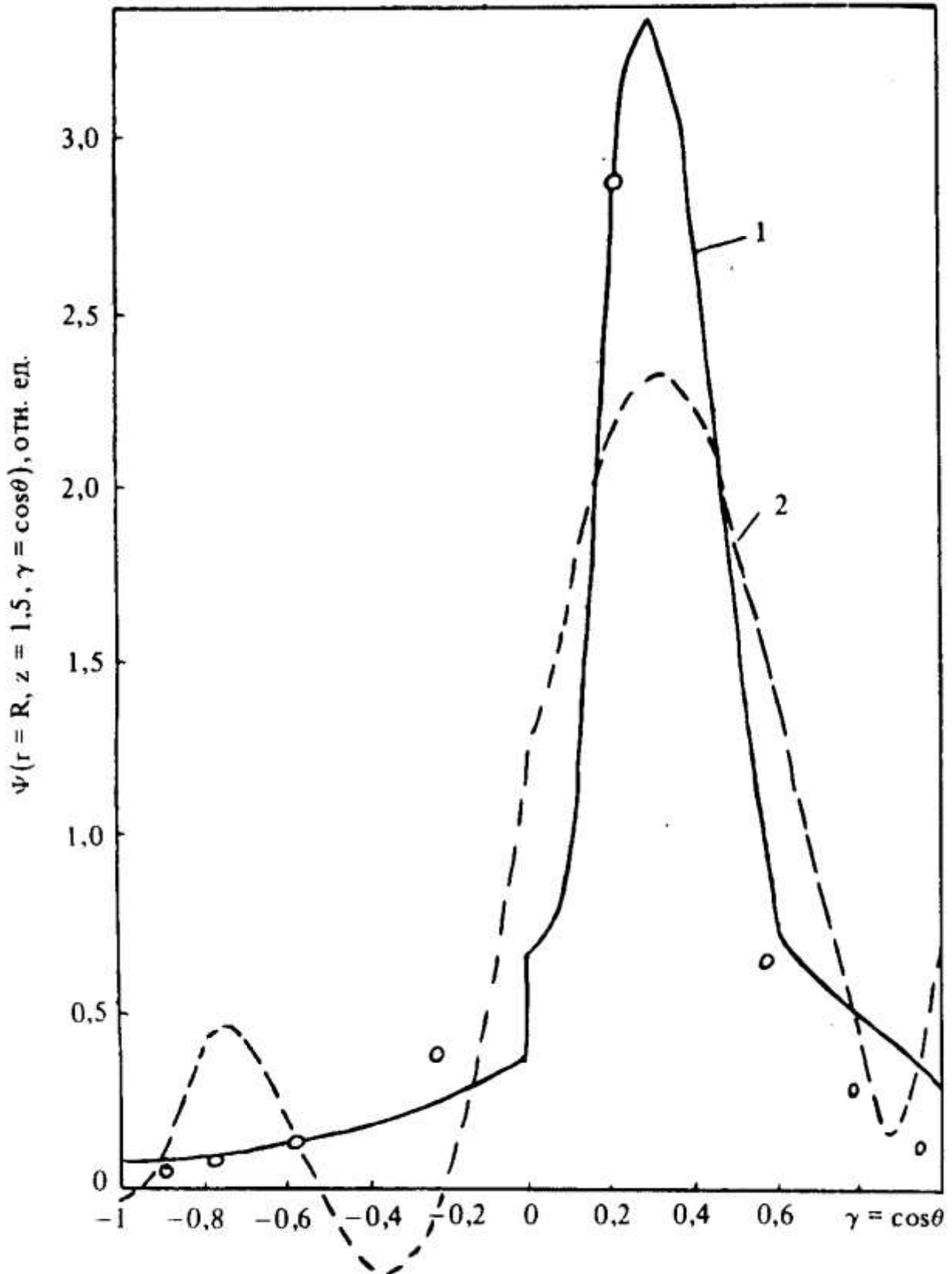


Рис. 7. Угловое распределение выходящего излучения в тесте Латропа:
 1- расчет по программе Радуга (1600 угловых точек на полусфере);
 2 - аппроксимация кривой 1 шестью членами ряда по полиномам Лежандра;
 ⊙ расчет по ДОТ-3 в DS_8 - приближении.

Важным элементом МДО являются алгоритмы ускорения итераций по столкновениям. Как правило, они сводятся к нахождению поправок (в виде слагаемых или множителей) к каждой итерации. Для успеха таких приемов важна согласованность расчета поправок с основной разностной схемой [11, 15].

Относительная простота алгоритма МДО, легкость обобщения на неоднородные геометрии и возможность достижения высокой точности привели к созданию ряда универсальных программ, базирующихся на этих методах (табл. 1). За рубежом в задачах радиационной защиты используется большой набор программ (табл. 2). У нас нашли применение программы SABINE [16], ANISN [17], DOT-3 [18], FASTER [19].

Сравнительно простые алгоритмы, опирающиеся на одномерные геометрические модели, на метод выведения- диффузии, используются на предварительных стадиях проектирования, при оптимизации отдельных узлов. Заключительный этап проектирования требует комбинированного расчета по нескольким, часто очень сложным, программам. Примеры таких расчетных цепочек приведены на рис. 8.

Следует отметить обращение к программам, реализующим специальные модификации метода Монте-Карло для расчета полей в сложных ответственных узлах защиты. Учет трехмерных эффектов иногда успешно осуществляется с помощью сопряженной задачи [20].

Важную роль играет оценка чувствительности результатов расчета радиационных полей к погрешностям физических констант и упрощениям геометрической структуры. И за рубежом и у нас созданы программы, дающие такую оценку по формулам теории возмущений [21].

В заключение необходимо еще раз подчеркнуть, что в последние годы в области радиационной защиты:

1) существенно расширился круг специалистов различного профиля, заинтересованных в численном решении конкретных задач, а вместе с тем возросли требования к точности и полноте расчетной информации;

2) увеличился поток работ по развитию методов и программ, по расчетам сложных систем;

3) проходит объединение программ в крупные универсальные комплексы, ориентированные на наиболее мощные ЭВМ, с широким развитием сервисного обеспечения.

Таблица 1. Основные отечественные программы для расчета нейтронных и гамма-полей

Название программы	Тип задачи и*	Поля нейтронов и/или / гамма квантов	Геометрическая модель	Сопряженная задача	Прближение и метод**	Характерное время счета, мин	Язык и объем програмы***	Объем вх/вых информации	Требуемые ресурсы ЭВМ
КРАБ-1	R	n	$(z), (r), (\rho)$	+	D, сеточный	1-60	ФОРТРАН, 6.10оп.	$10^3/10^5$	120 тр МБ
РОЗ-5 (версия 2)	Q	n, γ $n + \gamma$	z	+	K, сеточный	0,5-5	ФОРТРАН, Автокод БЕМШ 1.5 10^4 м.сл.	$10^4/10^2 \div 10^4$	1 МЛ. 64-140 тр МБ
РОЗ-6 (версия 2)	R, Q	n, γ $n + \gamma$	$(z), (r), (\rho)$	+	K, сеточный	5-60	ФОРТРАН, 10^4 оп	$10^4/10^2 \div 10^4$	То же
РОЗ-11	Q	n, γ $n + \gamma$	$(z), (r)$	+	K, вариационно-разностный	1-5	ФОРТРАН, 1,6. 10^4 м.сл.	$10^4/10^2 \div 10^4$	1 МЛ. 100 тр
СИНВАР-2	R	n	$(r, z), (x, y)$	-	D вариационный	2-60	ФОРТРАН, 1,2. 10^4 оп	$10^3/10^5$	150 тр
ТВК-2D	R, Q	n	$(r, z), (x, y)$	+	D, сеточный	10-200	АЛГОЛ, 4. 10^4 оп	$10^3/10^5$	64-200 тр
АТИКА	Q	n	$(r, \varphi, z),$ (x, y, z)	-	B-D, сеточный	30-120	АЛГОЛ, 10^4 оп	$10^3/10^4$	То же
РАДУГА-2	Q	n, γ $n + \gamma$	(r, z)	-	K, сеточный	100-10000	Автокод, БЕМШ, 2. 10^4 м.сл.	$10^3/10^4$	До 8 МЛ, до 300 зон МД, до 150 тр
РНЗ	Q	n, γ	(x, y, z)	-	K, Монте-Карло	10-120	ФОРТРАН, 8. 10^3 м.сл.	$10^4/10^3$	1 МЛ
ММКФК	R, Q	n	$(z), (r), (\rho)$ $(r, z), (z, y)$	-	K_T , Монте-Карло	30-300	ФОРТРАН, 3. 10^4 оп.	$10^4/10$	120 тр

* Q – задачи с источником, R – задачи о собственных параметрах (однородные задачи).

** D – диффузионное приближение, K – кинетическое приближение, $B-D$ – приближение «выведение – диффузия».

***оп – операторов языка, м.сл. – машинных слов; тр – трактов МБ.

Таблица 2. Большие программные системы и библиотеки ядерных данных в RSIC [1]

Страна изготовитель	Большие программные системы	Библиотеки ядерных данных
США	332	139
Япония	21	14
Франция	19	5
Англия	15	13
Другие страны	44	19
Всего	431	190

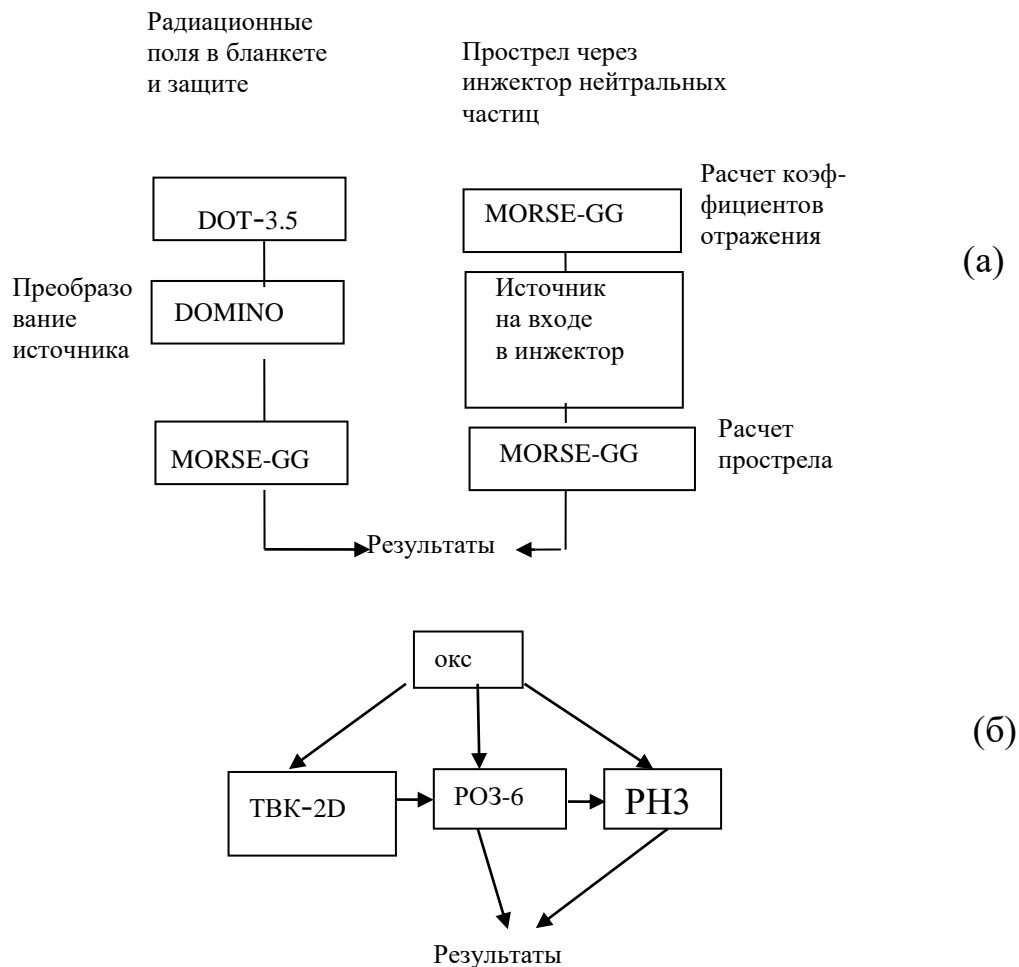


Рис. 8. Цепочки программ для расчета полей в установке INTOR-J (а) и в боковой защите с неоднородностями – пакет ЗАЩИТА [2] (б).

Список литературы

1. Maskewitz B.F., Roussin R.W., Trubey D.K. RSIC After 20 Years – a Look Back and a Look Ahead. – In: 6th Intern. Conf. Rad. Shielding (Tokyo, may 16-20, 1983)
2. Басс Л.П. и др. Программное обеспечение задач радиационной защиты ядерных реакторов: Препринт ИПМ АН СССР № 86, 1981.
3. Гусев Н.Г. и др. Защита от излучений ядерно-технических установок, т. 2. – М.: Энергоиздат, 1983.
4. Seki Y. et al. Radiation Streaming Calculations for INTOR-J, Trans. Am. Nucl. Soc., 1981, vol. 38, p.555.
5. Гермогенова Т.А., Николаев М.Н., Суворов А.П. Типичные задачи расчета полей нейтронов и гамма-квантов в радиационной защите реакторов: Препринт ИПМ АН СССР № 84, 1981.
6. Абагян Л.П. и др. Групповые константы для расчета реакторов и защиты. – М., Энергоиздат, 1981.
7. Волощенко А.М. и др. Объединенная система константного обеспечения – ОКС. Версия 3.0.: Препринт ИПМ АН СССР № 20, 1984.
8. Гомин Е.А., Майоров Л.В. Программа TERMAC. – ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1982, вып. 5.
9. Sanchez R., Mc Cormick N.J. A Review of Neutron Transport Approximations. – Nucl. Sci. Eng., 1982, vol. 80, № 4 p. 481.
10. Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1981.
11. Волощенко А.М. Дважды консервативная схема четвертого порядка точности для уравнения переноса в криволинейных геометриях: Препринт ИПМ АН СССР. 1984. № 49.
12. Бродкин Э.Б., Гермогенова Т.А., Хмылев А.Н. Сравнение численных методов решения уравнения переноса на тестовой задаче в $r - , z$ – геометрии. В кн.: Тез. докл. III Всесоюз. научн. конф. по защите от ионизирующих излучений ядерно-технических установок, сост. 27-29 декабря 1981 г. Тбилиси, 1981.
13. Alcouffe R.E. et al. Computational Efficiency of Numerical Methods for the Multigroup Discrete Ordinates Neutron Transport Equations in Slab Geometry Case. – Nucl. Sci. Eng., 1979, vol. 71, p. 111.
14. Walters W.F., Recent Developments in Nodal and Characteristic Methods in Transport Theory. – Trans. Am. Nucl. Soc., 1982, vol. 43, p. 611.
15. Larsen E.W. Unconditionally Stable Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Slab Geometry Equation. Part 1. Theory. – Nucl. Sci. Eng., 1982, vol. 82, p. 47.
16. CCC-121/SABINE. Spinney (Removal-Diffusion) Shielding Code in One-Dimensional Geometry. EUR – 3635. e – Ispra: EURATOM, 1973.

17. CCC- 82/ANISN – CEA. Multigroup One – Dimensional Discrete Ordinates Transport Code With Anisotropic Scattering. – ORNL-Tr 2419, CEA-N- 1358, 1973.
18. Rhoades W.A., Mynatt F.R. CCC – 209/DOT- III – Two – Dimensional Discrete Ordinates Radiation Transport Code. – ORNL – TM – 4280, 1973.
19. Jordan T.M. CCC-98/FASTER – Monte Carlo Transport Code in Complex Geometry. – WANL-PR – (LL) – 010, 1967.
20. Williams M.L., Engle W.W. Jr. The Concept of Spatial Channel Theory Applied to Reactor Shielding Analysis. – Nucl. Sci. Eng., 1977, vol. 62, № 1 , p. 92.
21. Болятко В.В. и др. Погрешности расчетов защиты от излучений / Под ред. В.П.Машковича. – М.: Энергоиздат, 1983.

МЕТОДЫ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ В ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ С (R,Z) - ГЕОМЕТРИЕЙ

Л.П.Басс, Т.А.Гермогенова, А.Н.Гончаров,
Н.А.Кондурушкин, А.Н.Хмылев.

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1986, вып. 4, с. 9-12.

Эффективность различных схем метода дискретных ординат решения уравнения переноса в (r, z) - геометрии исследуется на двух тестовых задачах с распределенным и точечным источниками. Рассматриваются схема метода характеристик с интерполяцией и варианты схем DS_N - метода: шаговая, алмазная, экспоненциальная, смешанная схемы, θ -схема, MDS_N - схема. Даются рекомендации по выбору параметров этих схем.

DISCRETE ORDINATES METHODS IN TWO-DIMENSIONAL (R,Z) - PROBLEMS. L.P.Bass, T.A. Germogenova, A.N. Goncharov, N.A. Kondurushkin, A.N. Khmylev. The efficiency of different schemes for solving the transport equation in the (r, z) - geometry by discrete ordinates methods is investigated in two test cases with distributed and point sources. The schemes under consideration are linear characteristic with interpolation and the DS_N - type schemes: step, diamond, exponential, mixed, θ - type, MDS_N - type. Some recommendations for choosing parameters of these schemes are given.

В наибольшей степени современным требованиям к точности и полноте расчетной информации в задачах о переносе излучения удовлетворяют методы дискретных ординат (МДО). Две основные группы этих методов в двумерных задачах составляют методы характеристик, отвечающие прямому интегрированию уравнения переноса в ячейках разностной сети, и DS_N - методы, основой которых являются соотношения баланса в ячейках.

В программу РАДУГА-3, позволяющую решать многогрупповую систему уравнений переноса в (r, z) - геометрии, включены метод характеристик с линейной интерполяцией (LIC) [1, 2] и схемы DS_N - метода [3]: шаговая (SC), алмазная (DD), взвешенные (WDD), в частности θ - схема и MDS_N - схема, экспоненциальная (EM) и смешанная (EDD). LIC – схема положительна и монотонна, но неконсервативна и имеет первый порядок локальной аппроксимации решения [2].

Схемы DS_N - метода различаются между собой видом дополнительных уравнений и выбором веса в этих уравнениях. DD-, EM – и EDD - схемы имеют второй порядок точности на гладких решениях, остальные – первый. Эти схемы консервативны. Дадим краткое их описание

в двумерной цилиндрической геометрии. В осесимметричной области G введем цилиндрическую систему координат $\{r, z\}$, где направление $\vec{\Omega} = \{\gamma, \mu\}$ определяется полярным углом $\theta = \arccos \gamma$ с осью z и азимутальным углом $\varphi = \arccos \mu$, отсчитываемым от проекции радиуса \vec{r} на плоскость $z = 0$. Расчетная угловая сеть задается значениями узлов $\gamma_j \neq \pm 1$ и $\varphi_j \neq 0, \pi/2, \pi$. Пространственная разностная сеть по переменным r и z строится таким образом, чтобы границы зон совпадали с какими-либо значениями узлов $r_{k+1/2}, z_{\ell+1/2}$, а точки с целыми индексами r_k, z_ℓ - с центрами интервалов $(r_{k-1/2}, r_{k+1/2}), (z_{\ell-1/2}, z_{\ell+1/2})$. Расчетной ячейкой $\{k, \ell, j\}$ при заданном γ_i будем называть ячейку, определяемую точками $r_{k\pm 1/2}, z_{\ell\pm 1/2}, \varphi_{j\pm 1/2}$.

В DS_N - схемах основными искомыми величинами являются средние значения $\Phi_{k\ell j}$ в ячейках $\{k, \ell, j\}$ при $\gamma = \gamma_i$.

В качестве исходных формул принимаются соотношения баланса [3] в ячейках, связывающие эти значения со средними значениями на гранях ячеек $\Phi_{k\pm 1/2\ell j}, \Phi_{k\ell\pm 1/2 j}, \Phi_{k\ell j\pm 1/2 i}^*$. Для того чтобы число уравнений соответствовало числу неизвестных, к основному уравнению, отвечающему соотношению баланса в ячейках, добавляют три уравнения, связывающих значения функции на границах ячейки с ее значением в центре. Обычно используется формула

$$\Phi = (1 + p_n) \Phi - p_n \Phi^{(n)}, \quad n = 1, 2, 3, \quad (1)$$

с весами p_n , принимающими значения от 0 до 1. Здесь

$$\Phi^\pm = \Phi_{k\pm 1/2}, \quad \Phi^\pm = \Phi_{\ell\pm 1/2}, \quad \Phi^\pm = \Phi_{j\pm 1/2}. \quad \text{Как правило, полагают}$$

$p_1 = p_2 = p_3 = p$. Значение $p = 0$ соответствует SC - схеме, $p = 1$ - DD - схеме, $0 < p_n < 1$ ($n = 1, 2, 3$) WDD - схеме.

Предположение об экспоненциальном поведении решения в ячейке приводит к дополнительному соотношению

$$\Phi = \sqrt{\Phi_{k+1/2} \cdot \Phi_{k-1/2}} \quad (2)$$

по переменной r и таким же соотношениям по z и μ . Они соответствуют экспоненциальной схеме ЕМ. В смешанной EDD - схеме по угловой переменной ($n = 3$) используется соотношение (1), а по пространственным - (2).

* Целые индексы k, ℓ, j, i в дальнейшем опускаем

В практических задачах особенности решения, а также большие его градиенты в зонах со значительным поглощением могут приводить к искажениям качественных характеристик решения – положительности, монотонности и т.п. Чтобы исправить положение, вводятся параметры, для выбора значений которых предлагаются различные критерии.

Условия монотонности схемы [4, 5] налагают довольно жесткие ограничения на параметры p_n . Гарантируя положительность и монотонность схемы при любых положительных правых частях, они слишком далеко уводят WDD - схему от схемы второго порядка точности (DD). Поэтому, как правило, используются нелинейные DS_N - схемы, в которых величины p_n ($n=1,2,3$) выбираются так, чтобы обеспечить лишь положительность экстраполяции решения.

В θ - схеме [6], например, веса зависят от решения на предыдущем шаге расчета. При этом в формулы для определения p_n входят параметры θ_B и θ_Φ , значения которых заключены между нулем и единицей. θ_B – коэффициент при правой части B уравнения переноса, θ_Φ - при функции Φ на гранях ячейки. При $\theta_B, \theta_\Phi \approx 0$ θ - схема приближается к SC - схеме, а при $\theta_B, \theta_\Phi \approx 1$, - к DD - схеме. В случае $\theta_B = \theta_\Phi = 0$ гарантируется не только положительность, но и монотонность схемы. Другой прием использован в MDS_N - схемах [5], где расчет по монотонной схеме производится лишь в ячейках, содержащих точки, где решение имеет особенности. В остальных ячейках используется DD - схема.

Эффективность различных схем МДО анализировалась на известной тестовой задаче [7] с распределенным источником и предложенной авторами тестовой задаче с точечным источником.

Геометрия первой тестовой задачи представлена на рис. 1.

В зоне G_1 равномерно распределен источник единичной интегральной мощности. Зона G_2 заполнена рассеивателем с сечением рассеяния $\Sigma_s = 0.9$ и полным сечением $\Sigma_t = 1$. В остальной части, включая G_1 существенную роль играет поглощение ($\Sigma_s = 0.25, \Sigma_t = 0.75$). Рассеяние считается изотропным, краевые условия – нулевыми. За точное решение приняты результаты расчета по алмазной схеме с коррекцией отрицательных значений по шаговой схеме (DD/SC) с очень густой разностной сетью (841 точка по пространственным координатам и 2500 по угловым). На рис. 1 представлена плотность потока частиц $\Phi(r, z)$ (точное решение) вблизи боковой поверхности цилиндра. Эти данные хорошо согласуются с результатами, полученными методом Монте-Карло по программам АНКОН-Ц и FASTER [8].

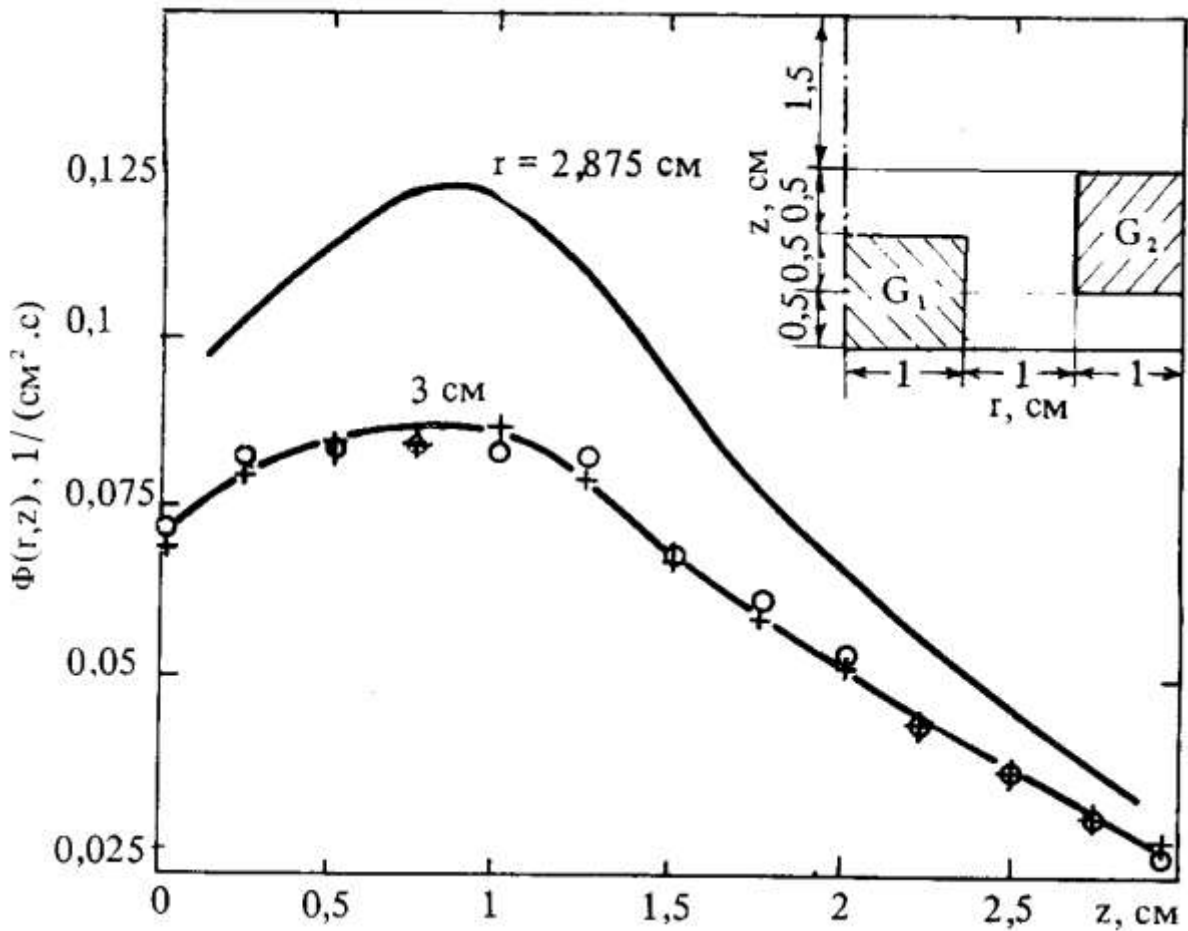


Рис. 1. Геометрия (на вставке) и решения первой задачи: - DS_N - методом (РАДУГА-3); + и \odot - методом Монте-Карло (FASTER и АНКОН-Ц соответственно).

В качестве второй тестовой задачи рассматривалась задача для изображенной на рис. 2 неоднородной цилиндрической области больших размеров. Область разбивается на кольцевые зоны, размеры которых (в метрах) также указаны на рисунке. Зона G'_1 заполнена веществом с $\Sigma_t = 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $\Sigma_s = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$. Часть зон (подобласть G'_2), составляющая «неоднородность», заполнена веществом с высокой плотностью ($\Sigma_t = 0.1 \text{ см}^{-1}$, $\Sigma_s = 0.05 \text{ см}^{-1}$). Как в основной среде, так и в «неоднородности» существенную роль играет поглощение: $\Sigma_s / \Sigma_t = 0.5$. Рассеяние предполагается изотропным. Точечный источник $Q = F \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ мощности $F = 10^{10} \text{ с}^{-1}$ располагается на оси z в точке $\vec{r}_0 = \{0, H_0\}$. Граничные условия задаются нулевыми. Результаты принятые за точное решение, получены на пространственной сети с характерным шагом $h = 2.5 \text{ м}$ (0.025 длины свободного пробега частицы) в области затенения

прямого изучения источника ($200 < r < 500$ м, $0.5 < z < 50$ м). По угловым переменным использовались гауссовы сети: 30 узлов на полуинтервале $(-1, 0)$ и пять на $(0, 1)$ по γ , 10 и 15 – по μ на соответствующих полуинтервалах. Расчеты с этой разностной сетью проводились по DD/SC и MDS_N - схемам.

Для контроля точности в отдельных точках были проведены расчеты методом Монте-Карло. На рис. 2 представлено пространственное распределение плотности потока $\Phi(r, z)$ рассеянных частиц в области тени для $z = 1$ м (точное решение) и результаты расчета методом Монте-Карло. Показана также статистическая ошибка метода Монте-Карло с вероятностью, соответствующей доверительному интервалу 2σ .

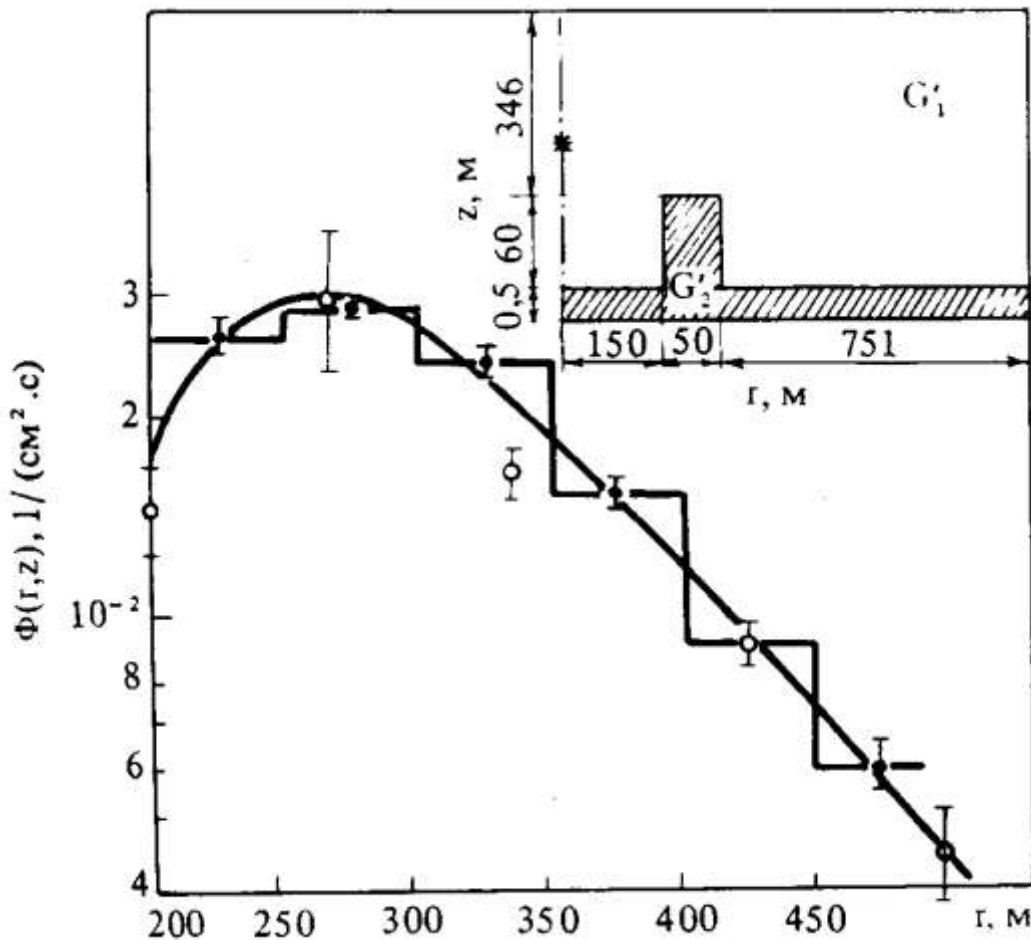


Рис. 2. Геометрия (на вставке; * - источник, $H_0 = 100,5$ м) и решения второй задачи; — - MDS_N - методом (точное решение) и методом Монте-Карло (⊖ - оценка по пересечениям, ⊕ - локальная оценка)

Первая и вторая тестовые задачи рассчитывались по всем схемам МДО, включенным в программу РАДУГА-3. Использовалось несколько разностных сетей возрастающей густоты и опробовались разные значения параметров.

Анализ расчетных результатов позволил сделать следующие выводы.

1. Все рассматриваемые схемы дают результаты, приближающиеся к точному решению при сгущении разностной сети. В зоне затенения (вторая задача) для значений $z = 1$ м, $r = 200 \div 500$ м возникают осцилляции в плотности потока, характерные для немонотонных схем, и сходимость к точному решению здесь медленнее.

2. Значительные погрешности для всех рассматриваемых разностных сетей имеют *SC* и *LIC* - схемы, завышающие результаты. Особенно сильно завышаются результаты (до двух-трех раз) для второй задачи. Однако относительные характеристики, в частности профили углового распределения, *LIC* - схемой определяются достаточно хорошо.

3. *EM* – и *EDD* - схемы наиболее точные результаты дают в задачах о распределении излучения от точечного источника в однородной среде с сильным поглощением.

4. В областях со сложным поведением решения предпочтительнее оказываются *MDS_N*–, *DD / SC* – или *DD / MDS_N* - схемы и θ - схема. Следует отметить, что *MDS_N* - схема на грубой пространственной сетке может дать значительную локальную погрешность (~50%). Наилучшие результаты в θ - схеме получены с параметрами $\theta_{\phi} = 0$, $\theta_B = 1$ (первая задача).

5. Если исключить *SC* и *LIC* - схемы, величины шага в целом сильнее влияют на точность расчета, чем выбор схемы.

6. При одинаковых разностных сетях наибольшего времени решения задачи на ЭВМ требует *LIC* - схема, а наименьшего - *SC* - схема. Решение задач с изотропным рассеянием (P_0 - приближение индикатрисы) по *LIC* - схеме в три раза медленнее, чем по *DD*. *EM*–, *EDD*– и θ схемы требуют приблизительно одинакового времени, как правило, в 1,5-2 раза большего, чем *DD* - или *MDS_N* -схема.

Список литературы.

1. Гольдин В.Я. Характеристическая разностная схема для нестационарного кинетического уравнения. ДАН СССР, 1960, т.133, с. 748.
2. Гермогенова Т.А., Басс Л.П. О решении уравнения переноса методом характеристик. – В кн.: Вопросы физики защиты реакторов. М.: Атомиздат, 1969, вып. 3, с. 69.
3. Карлсон Б., Латрон К. Теория переноса. Метод дискретных ординат. – В кн.: Вычислительные методы в физике реакторов/ Под ред. Х.Гринспена. - М.: Атомиздат, 1972, с. 102.
4. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. Введение в теорию. – М.: Наука, 1977.

5. Волощенко А.М. О решении уравнения переноса DS_N методом в гетерогенных средах. Ч. II. Одномерные сферическая и цилиндрическая геометрии. – В кн. Численное решение уравнения переноса в одномерных задачах / Под ред. Т.А.Гермогеновой. М.: ИПМ АН СССР, 1981, с. 64.
6. Rhoades W.A., Engle W.W., Jr. A New Weighted Difference Formulation for Discrete Ordinates Calculations. – In: Trans. Am. Nucl. Soc., 1977, vol. 27, p.776.
7. Miller W.F. Jr., Reed W.H. Ray-effect Mitigation Methods for Two-Dimensional Neutron Transport Theory. – Nucl Sci. Eng., 1977, vol. 62, p.391.
8. Бродкин Э.Б., Кожевников А.Н., Хрусталева А.В. Возможности и опыт применения программ для расчетов на ЭВМ задач о прохождении излучения через вещество. В кн.: Радиационная безопасность АЭС/ Под ред. В.Н.Миронова и др.: Тр. ВТИ.-М.: ВТИ, 1979, вып. 26, с. 30.

СОПРЯЖЕННОЕ УРАВНЕНИЕ ПЕРЕНОСА В ЗАДАЧАХ О ТОЧЕЧНОМ ИСТОЧНИКЕ У ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА

Л.П. Басс, Т.А. Гермогенова, А.Н. Гончаров, Н.А. Кондурушкин

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика
и техника ядерных реакторов, 1986, вып. 4, с.12-14.

При определении функционалов радиационных полей используются выражения этих функционалов через решение сопряженного уравнения переноса. Этот подход оказывается особенно эффективным в задачах с двумерной (r, z) – геометрией, область расчета которых состоит из однородных по радиусу слоев: один расчет сопряженной задачи (при фиксированной высоте детектора) позволяет найти значение искомого функционала для различных значений r при варьировании высоты источника, его спектра и углового распределения.

При определении таких интегральных характеристик радиационных полей, как доза, флюенс быстрых нейтронов, обычно используется решение краевой задачи для уравнения переноса или приближенного к нему уравнения.

Запишем эту задачу в операторной форме (с нулевыми граничными условиями) [1]:

$$T\vec{\Psi} = \vec{f}, \dots \vec{\Psi} \Big|_{\Gamma, (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0} = 0, \quad (1)$$

где $\vec{\Psi} = \{\Psi^{(1)}, \dots, \Psi^{(q)}, \dots, \Psi^{(Q)}\}$ – решение многогрупповой системы уравнений переноса; $T\vec{\Psi} = L\vec{\Psi} - S\vec{\Psi}$, L – дифференциальный оператор левой части многогрупповой системы уравнений переноса, оператор S отвечает интегралу столкновений; $\vec{f} = \{f^{(1)}, \dots, f^{(q)}, \dots, f^{(Q)}\}$ – вектор-функция источника; Γ – внешняя граница рассматриваемого объема; \vec{n} – внешняя нормаль к ней; $\vec{\Omega}$ – направление полета частицы; $q=1, \dots, Q$ – индекс энергетической группы.

Наряду с указанным выше подходом может быть использован также подход, основанный на решении краевой задачи для сопряженного уравнения переноса:

$$T^* \vec{\Psi}^* = \vec{g}, \quad \vec{\Psi}^* \Big|_{\Gamma, (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0} = 0, \quad (2)$$

где T^* – оператор левой части многогрупповой системы сопряженных уравнений переноса; $\vec{\Psi}^* = \{\Psi^{*(1)}, \dots, \Psi^{*(q)}, \dots, \Psi^{*(Q)}\}$ – сопряженное решение; $\vec{g} = \{g^{(1)}, \dots, g^{(q)}, \dots, g^{(Q)}\}$ – вектор-функция источника.

Решения прямой (1) и сопряженной (2) задач связаны соотношением [2], которое в цилиндрической системе координат (r, z) имеет вид

$$J_g = \sum_{q=1}^Q \iint \Psi^q(\vec{r}, \vec{\Omega}) g^q(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{r} d\vec{\Omega} = \sum_{q=1}^Q \iint \Psi^{*(q)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) f^{(q)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{r} d\vec{\Omega} = J_f^* \quad (3)$$

где $d\vec{r} = dz r dr$; $d\vec{\Omega} = d\gamma d\varphi$, r и z – пространственные координаты по радиусу и высоте цилиндра соответственно, $\gamma = \cos\theta$ – косинус полярного угла, φ – азимутальный угол, а интегрирование проводится по всей области изменения переменных r, z, γ, φ .

Соотношение (3) позволяет снизить объем вычислительных работ в задачах, в которых интерес представляют функционалы решения типа J_g , например доза D излучения в точке \vec{r}_* :

$$D(\vec{r}_*) = \sum_{q=1}^Q d^{(q)} \int_{-1}^1 d\gamma \int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^{(q)}(\vec{r}_* \cdot \vec{z}_*, \gamma, \varphi), \quad (4)$$

где $d^{(q)}$ – коэффициенты перевода плотности потока в дозу. Так, расчет серии прямых задач с функциями $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_M$ заменяется расчетом одной сопряженной задачи с источником

$$g^{(q)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = d^{(q)} \delta(\vec{r} - \vec{r}_*), \quad q=1, \dots, Q, \quad (5)$$

и последующим вычислением интегралов $J_{f_m}^*$, $m=1, 2, \dots, M$ (см. (3)).

Обычно функции $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ и $\Psi^*(\vec{r}, \vec{\Omega})$ находят по одной и той же программе. В этом случае решается задача

$$\tilde{T} \tilde{\Psi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \tilde{g}(\vec{r}, -\vec{\Omega}), \quad \tilde{\Psi} \Big|_{\Gamma, (\vec{\Omega} \vec{n}) < 0} = 0, \quad (6)$$

где оператор \tilde{T} отличается от T только тем, что матрица констант заменяется на сопряженную. Далее надо положить

$$\Psi^{*(q)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \tilde{\Psi}^{(q)}(\vec{r}, -\vec{\Omega}), \quad (7)$$

или в цилиндрической системе координат

$$\Psi^{*(q)}(r, z, \gamma, \varphi) = \tilde{\Psi}^{(q)}(r, z, -\gamma, \pi - \varphi). \quad (8)$$

В задачах о точечном источнике (в точке \vec{r}_0) и детекторе (в точке \vec{r}_*) угол φ есть угол между проекцией вектора $\vec{\Omega}$ на горизонтальную плоскость и проекцией вектора $\vec{r}_* - \vec{r}_0$ в прямой задаче или вектора $\vec{r}_0 - \vec{r}_*$ в сопряженной. Поэтому $\pi - \varphi$ в прямой задаче отвечает φ в сопряженной и, следовательно,

$$J_{f_m}^* = \sum_{q=1}^Q \int_G d\vec{r} \int_{-1}^1 d\gamma \int_0^{2\pi} d\varphi \tilde{\Psi}^{(q)}(\vec{r}, -\gamma, \varphi) f^{(q)}(\vec{r}, \gamma, \varphi). \quad (9)$$

В задачах о точечном источнике с горизонтально-однородной (по радиусу) областью выигрыш становится особенно заметным. Один расчет

сопряженной задачи позволяет найти значение функционала (4) при всех тех r_* (и фиксированном значении z_*), при которых можно пренебречь влиянием границы области расчета, для любых высот z_0 , спектров и углового распределения источника.

В то же время соотношение (3) позволяет снизить геометрическую размерность задачи. Определение функционала J_g (3) в тех случаях, когда источник \vec{f} не обладает осевой симметрией, требует решения трехмерной по пространственным переменным задачи для $\Psi^{(q)}$. Этот расчет может быть заменен решением двумерной сопряженной задачи для $\Psi^{*(q)}$ с источником (5), обладающим осевой симметрией.

Для оценки радиационной опасности при работе с ядерно-техническими установками часто требуется знание пространственного распределения интегральных характеристик ионизирующих излучений в воздухе на границе с подстилающей поверхностью. Геометрия данной задачи описывается двумерным цилиндром, в котором выделяются две зоны по оси z с существенно различными физическими свойствами, однородными по горизонтали, а на оси цилиндра располагается точечный источник.

По программе РАДУГА-3 для такой задачи было проведено решение сопряженного уравнения переноса MDS_N -методом с целью определения по формуле (3) флюенса быстрых нейтронов ($E \geq 0,1$ МэВ) в воздухе на высоте 1 м над поверхностью земли. В расчетах использовались подготовленные авторами нейтронные групповые сопряженные константы. Для получения констант воздуха использовались оцененные данные по изотопам ${}^1_7\text{N}$ и ${}^1_8\text{O}$ из [3]. Плотности воздуха и земли принимались равными $1,293 \cdot 10^{-3}$ и $1,7$ г/см³ соответственно.

Значения флюенса быстрых нейтронов, полученные на основе решения сопряженного уравнения переноса по формуле (3), и решения прямой задачи методом Монте-Карло и методом дискретных ординат (по данным [4]) приведены на рисунке. Источник располагался на высоте 15 м над поверхностью земли, детекторы – на высоте 1 м. Сравнение показывает хорошее согласие данных независимых расчетов.

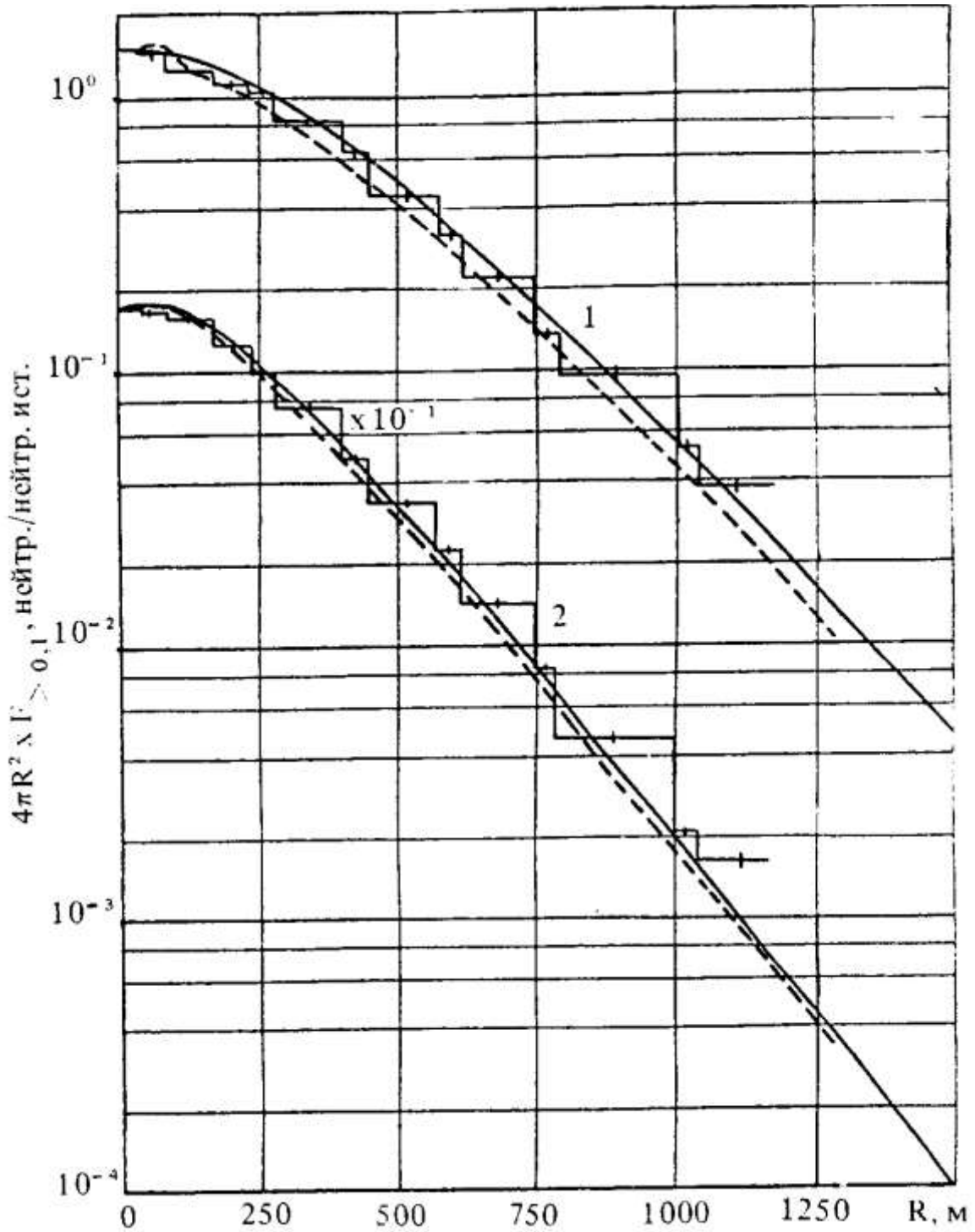


Рис.1. Флюенс быстрых нейтронов, полученный с помощью решения прямой задачи (\square – методом Монте-Карло, $-\cdot-\cdot-$ - методом дискретных ординат [4]) и сопряженного уравнения переноса (—); 1 – спектр $\Delta E_n \approx 12 \div 15$ МэВ; 2 – спектр деления.

Опыт численного решения сопряженного уравнения переноса показал, что для получения требуемой точности разностную сеть следует задавать более густой, чем при решении прямой задачи. Это связано с тем, что расчет многогрупповой системы сопряженных уравнений начинается с последней

энергетической группы, в которой длина свободного пробега нейтрона в несколько раз меньше, чем в первой группе.

В таблице представлено решение сопряженного уравнения переноса, используя которое можно определить пространственное распределение флюенса быстрых нейтронов в воздухе на высоте 1 м над поверхностью земли по формуле

$$F_{>0,1}(R) = \sum_{q=1}^{13} \Psi^{*(q)}(R) f^{(q)} \left[\text{нейтр./см}^2 \right]$$

от любого спектра $f^{(q)}$ нейтронов источника, расположенного на высоте 1 м.

Полученное по программе РАДУГА-3 полное решение сопряженной задачи позволяет получать флюенс быстрых нейтронов в воздухе на высоте 1 м над землей при любом пространственном, энергетическом и угловом распределении источника до расстояний $R=4000$ м.

Решение $\Psi^{*(q)}(R)$ сопряженного уравнения переноса

q	ΔE , МэВ	R, м				
		52,5	145	305	600	2000
1	0,1 – 0,2	2,37 – 9 *)	1,15 – 10	3,03 – 12	1,19 – 14	1,71 – 24
2	0,2 – 0,4	3,71 – 9	2,74 – 10	1,23 – 11	9,84 – 14	2,18 – 22
3	0,4 – 0,8	4,27 – 9	4,42 – 10	3,40 – 11	6,55 – 13	5,26 – 20
4	0,8 – 1,4	4,59 – 9	5,81 – 10	6,54 – 11	2,55 – 12	4,82 – 18
5	1,4 – 2,5	4,32 – 9	6,00 – 10	8,62 – 11	5,43 – 12	6,87 – 17
6	2,5 – 4,0	4,13 – 9	5,43 – 10	7,93 – 11	5,72 – 12	1,32 – 16
7	4,0 – 6,5	3,75 – 9	4,85 – 10	7,40 – 11	6,08 – 12	3,02 – 16
8	6,5 – 10,5	3,58 – 9	4,65 – 10	7,34 – 11	6,55 – 12	5,58 – 16
9	10,5 – 11,3	3,52 – 9	4,59 – 10	7,37 – 11	6,69 – 12	6,28 – 16
10	11,3 – 12,1	3,48 – 9	4,48 – 10	7,10 – 11	6,33 – 12	5,42 – 16
11	12,1 – 13,0	3,51 – 9	4,55 – 10	7,26 – 11	6,54 – 12	5,60 – 16
12	13,0 – 14,0	3,50 – 9	4,55 – 10	7,30 – 11	6,60 – 12	5,78 – 16
13	14,0 – 14,8	3,52 – 9	4,60 – 10	7,47 – 11	6,89 – 12	6,32 – 16

*) Здесь и далее читать следует $2,37 \cdot 10^{-9}$.

Список литературы

1. Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. – М.: Энергоиздат, 1981.
2. Марчук Г.И., Орлов В.В. К теории сопряженных функций. – В кн.: Нейтронная физика. – М.: Госатомиздат, 1961, с. 30.
3. Кондурушкин Н.А., Овденко И.П., Солодухин И.А. Нейтронные сечения и сечения выхода вторичных гамма-квантов для изотопов ${}^1_6\text{O}$ и ${}^1_7\text{N}$: Деп. ЦИВТИ Д2640Н, 1976.
4. Straker E.A. Time-Dependent Neutron and Secondary gamma-ray transport in an air-over-ground geometry: ORNL-4289, 1968, vol. 2.

К развитию численных методов в задачах о распространении излучения *

Гермогенова Т.А.

Атомная энергия, том 69, 1990 г., стр.41-45.

Развитие новых технологий в ядерной энергетике и осознание опасности, которую может нести это развитие, неизбежно повышает требования к точности и детальности математического моделирования процессов переноса излучения. В последние годы в традиционных для физики радиационной защиты стационарных задачах о распространении нейтронов и γ квантов значительные усилия были направлены на создание эффективных вариантов метода дискретных ординат – основного численного метода в этом круге задач, который опирается на многогрупповую аппроксимацию кинетических уравнений по энергии, сеточные аппроксимации по пространственным и угловым переменным и итерационные процессы с использованием приемов ускорения сходимости [1].

Особенно труден расчет полей глубоко проникающего излучения. Вычислительные алгоритмы, реализованные во многих известных программных комплексах, позволяют уверенно вести расчеты для защиты с ослаблением потока нейтронов в $10^{-6} - 10^{-8}$ раз. Характерным примером является численное моделирование с помощью программы РАДУГА-3 нейтронного поля в экспериментальной сборке на исследовательском реакторе ВВР-С [2]. Наличие воздушной полости, значительность ослабления вдоль оси z (до $\sim 10^{-8}$ по быстрым нейтронам) и неравномерность по радиусу этого ослабления сделали задачу расчета сложной (рис. 1).

Расчет ослабления в полномасштабной защите реактора (до $\sim 10^{-12} - 10^{-14}$) представляет сейчас значительную проблему [3, 4]. Развитие надежной и экономичной вычислительной технологии в этой области – одно из главных направлений математического обеспечения задач радиационной защиты.

Другое крупное направление возникло в связи с необходимостью изучения процессов более сложной природы – распространения заряженного излучения и каскадных процессов, порождаемых первичным излучением высокой энергии. Представляющие интерес переходные процессы указаны на рис. 2.

*) Журнальный вариант доклада на 5-й Всесоюзной научной конференции по защите от ионизирующих излучений ядерно-технических установок (Протвино, ИФВЭ, сентябрь 1989 г.).

Исходная математическая формулировка задачи при этом усложняется, поскольку

должна рассматриваться краевая задача для системы связанных источниками кинетических уравнений, отвечающих различным видам излучения;

вследствие сильной анизотропии рассеяния частиц с высокой энергией и заряженных частиц в дифференциальном операторе уравнения переноса появляются дополнительные производные, например, в одномерных плоских задачах

$$\hat{L}\Psi(z, \mu, E) = -\frac{\partial}{\partial E}[S(z, E)\Psi] + \mu \frac{\partial \Psi}{\partial z} - T(z, E) \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \Psi}{\partial \mu} \right] + \Sigma_t(z, E)\Psi(z, \mu, E); \quad (1)$$

в нестационарных проблемах увеличивается размерность задачи, в уравнении возникает временная производная $\partial \Psi / \partial t$ и задаются начальные условия.

В расчетных алгоритмах метода дискретных ординат должны быть соответствующим образом модифицированы разностные схемы и итерационные процессы. Кроме того, необходимо развитие константно-программного аппарата, обеспечивающего эти расчеты физическими характеристиками рассматриваемых процессов. В данной работе обсуждаются ключевые моменты в развитии метода дискретных ординат в указанных двух основных направлениях.

Широкие возможности хорошо известных программ РОЗ, РАДУГА, ANISN, DOT [1] обусловлены главным образом тем, что в основу их положены опирающиеся на соотношение баланса в каждой расчетной ячейке схемы WDD – взвешенные ромбические схемы со свободными параметрами p_i (весами по каждой из переменных x_i). Наиболее точной из них является DD - схема ($p_i \equiv 1$) 2-го порядка точности. Однако она неположительна и немонотонна. Фурье – анализ показывает, что в обычно используемой области значений весовых параметров $0 \leq p_i \leq 1$ WDD - схемы устойчивы. Подбором параметров добиваются 2-го порядка аппроксимации в областях гладкости решения, сохранения свойств положительности и отчасти монотонности точного решения. Предложено несколько вариантов такого подбора в каждой ячейке в зависимости от степени изменения потока (алгоритмов коррекции). Сравнительная эффективность их изучена на ряде модельных задач. На рис. 3 приведены результаты расчета потока $\Psi(x, y, \Omega_m)$ в простейшей односкоростной задаче о переносе излучения, падающего на участок $3 < x < 6$ поверхности $y=0$ однородной нерассеивающей области $y \geq 0$:

$$\xi_m \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \sigma \Psi(x, y, \Omega_m) = 0,$$

(2)

$$\Psi(x, y, \Omega_m) \Big|_{\substack{y=0 \\ 3 < x < 6}} = 1.$$

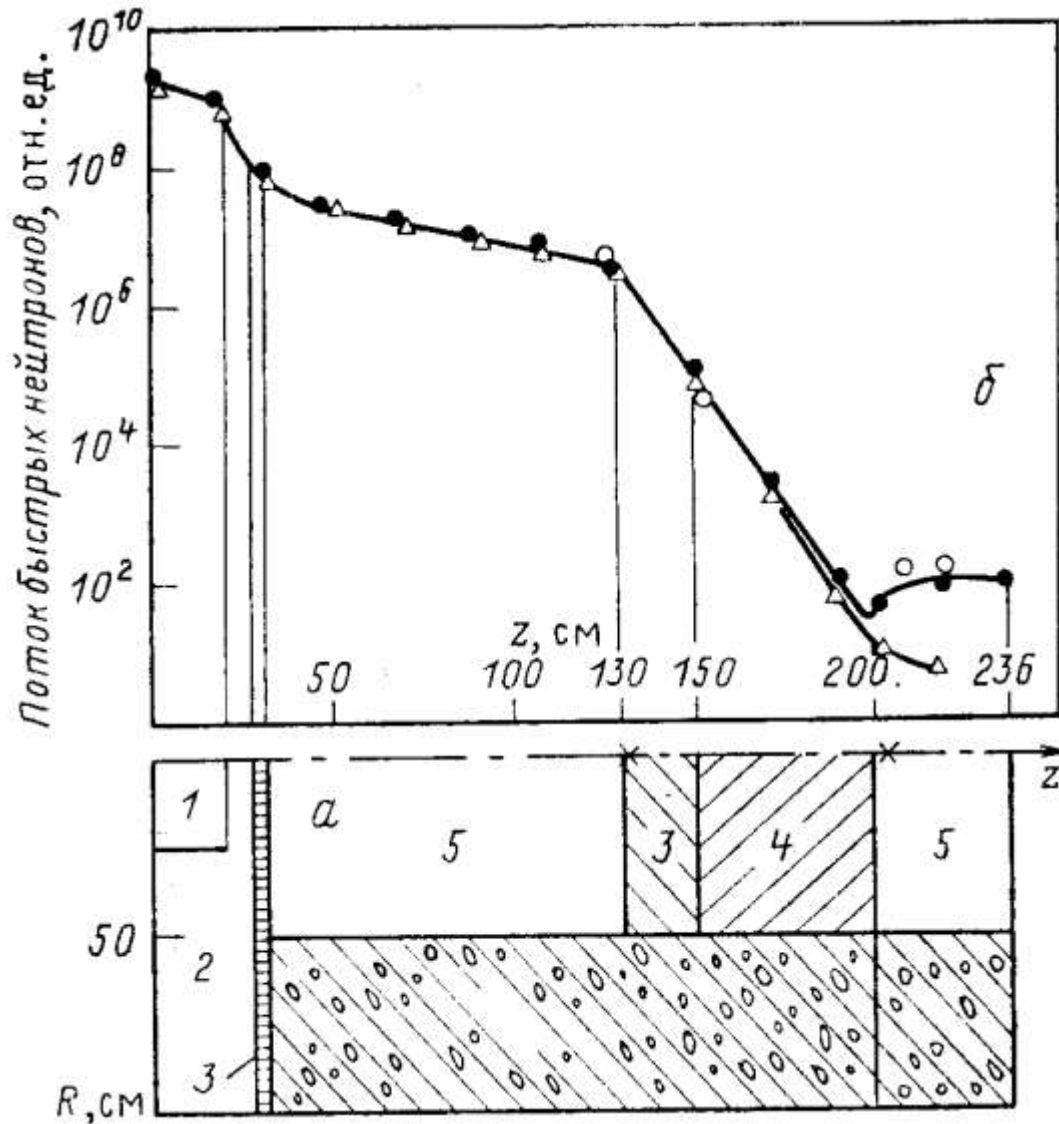


Рис.1. Экспериментальная установка (а) и распределение потока быстрых нейтронов (6,5- 10,5 МэВ) вдоль оси z (б): 1-активная зона; 2 - вода; 3 - железные фильтры; 4- защитная конструкция; 5- воздушные полости; внешняя защита— бетон; ○ -эксперимент; Δ, • -расчет №1 и №2 по программе РАДУГА.

<i>i</i>					<i>i</i> → <i>i</i>
<i>p</i>			<i>n</i> → <i>p</i>	<i>p</i> → <i>p</i>	
<i>n</i>		<i>γ</i> → <i>n</i>	<i>n</i> → <i>n</i>	<i>p</i> → <i>n</i>	<i>d</i> → <i>n</i>
<i>γ</i>	<i>e</i> → <i>γ</i>	<i>γ</i> → <i>γ</i>	<i>n</i> → <i>γ</i>	<i>p</i> → <i>γ</i>	<i>i</i> → <i>γ</i>
<i>e</i>	<i>e</i> → <i>e</i>	<i>γ</i> → <i>e</i>		<i>p</i> → <i>e</i>	<i>i</i> → <i>e</i>
	<i>e</i>	<i>γ</i>	<i>n</i>	<i>p</i>	<i>i</i>

Рис.2. Схема переходов в каскадных процессах.

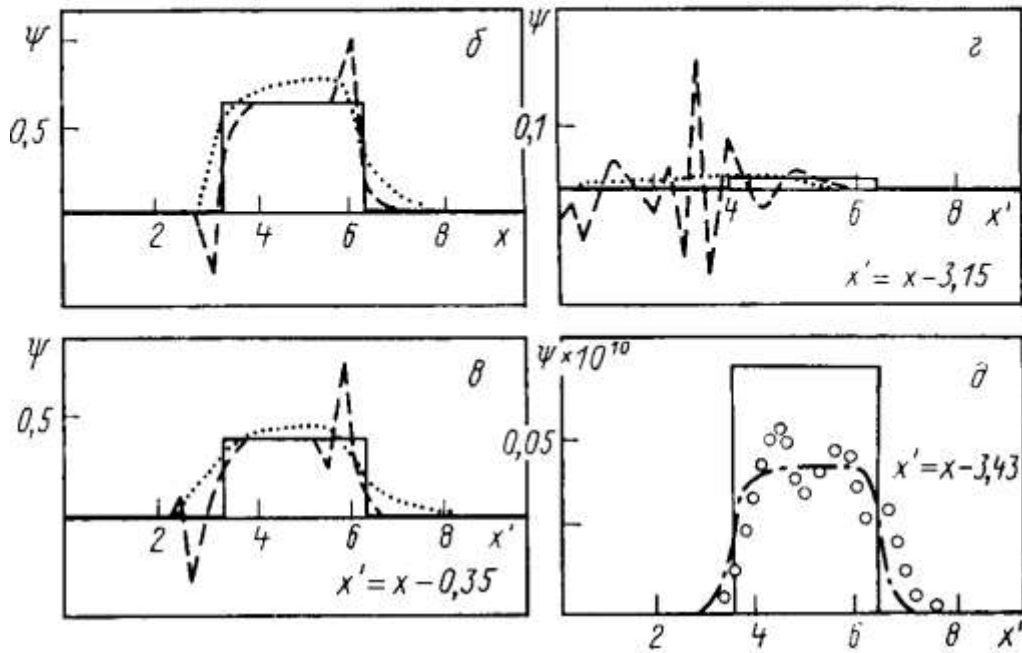
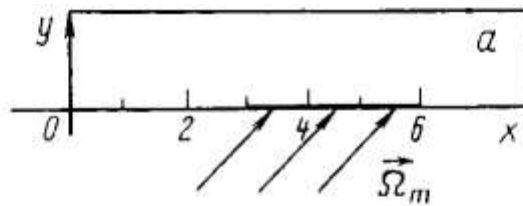


Рис. 3. Результаты расчета потока $\Psi(x, y, \Omega_m)$ по разным схемам метода дискретных ординат в задаче (2): Ψ_{ex} (—), Ψ_{st} (•••), Ψ_{DD} (— —); $\Psi_{DD/FCT}$ (— • —), Ψ_{AWDD} (⊙).

Точное решение этой задачи следующее:

$$\Psi(x, y, \Omega_m) = e^{-\sigma y / \eta_m}, \text{ если } 3 < x - y \frac{\xi_m}{\eta_m} < 6,$$

$$\Psi(x, y, \Omega_m) = 0 \quad \text{в противном случае.}$$

Расчет проводился с равномерной сеткой по x и y при значениях $\xi_m = \eta_m = 0.7$ по традиционным схемам: алмазной DD ($p_x = p_y = 1$) и шаговой St ($p_x = p_y = 0$) и схемам с коррекцией: AWDD, DD/FCT и др. Графики на рис. 3 б, е, г отвечают расчетам с $\Delta x = \Delta y / 2 = 0.175$, $\sigma = 1$, рис. 3, г - $\Delta x = 0.35$, $\Delta y = 0.07$, $\sigma = 5$. Сильные осцилляционные эффекты в DD - схеме и излишнее выглаживание в положительной St - схеме проявляются уже на первых шагах по y . Схемами с коррекцией даже при ослаблениях до $\sim 10^{-10}$ порядок решения передается верно. Наиболее эффективной мы считаем предложенную Б. Карлсоном AWDD (адаптивную взвешенную) схему, удачно распространенную А.М.Волощенко на неплоские и неоднородные геометрии [1], нестационарные задачи и задачи для «заряженного» излучения [5-7].

Расчетная практика показала, что схемы с коррекцией обладают асимптотической устойчивостью: не только абсолютная, но и относительная погрешности решения не возрастают с ростом числа шагов. Коррекция осуществляет регуляризацию основной разностной DD - схемы 2-го порядка, некорректной в задачах о глубоко проникающем излучении [7]. К примеру, в простейшей плоской задаче

$$\mu \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \Psi(z, \mu) = 0, \quad \Psi(0, \mu)|_{\mu > 0} = \Psi_0,$$

$$\Psi(H, \mu)|_{\mu < 0} = 0$$

схемы коррекцией эквивалентны минимизации функционала

$$M_\alpha[\Psi] = \int_0^H \left(\mu \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \Psi \right)^2 dz + \alpha \int_0^H \left(\mu \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)^2 dz$$

с параметром регуляризации $\alpha = \alpha(p)$ при аппроксимации 2-го порядка на каждом шаге (z_e, z_{e+1}) в то время как DD - схеме отвечает минимизация функционала $M_{\alpha=0}[\Psi]$, не гарантирующая гладкости решения при больших значениях $h = \Delta z / \mu$. Несмотря на то, что 2-го порядка аппроксимации в реальных задачах не удастся добиться во всей расчетной области из-за сингулярностей решения, асимптотически устойчивые схемы дают решения, почти всюду сходящиеся к точному, в интегральных величинах, как правило, со 2-м порядком точности.

Современный подход в построении консервативных положительных схем высокого порядка точности опирается на привлечение интегральных форм уравнения переноса (наряду с соотношениями баланса) в каждой ячейке расчетной сети. Это позволило уже для схем со 2-м порядком аппроксимации получить хорошую точность в традиционных геометриях (SR - метод * [8]), а также развить варианты таких схем для задач с нерегулярной геометрией, как на рис. 4 (MCCG- метод ** [9]). В более эффективной форме этот подход использован в работах [9-14] и др. [1], положивших начало развитию нового класса метода дискретных ординат – нодальных схем, где используется расширенный шаблон неизвестных величин: наряду со средними значениями (нулевыми моментами) искомых потоков по каждой ячейке сетки и ее граням (как в WDD - схемах) в расчет вовлекаются еще первые моменты (в схемах LN, LL, BL - до 4-го порядка включительно), а в работе [13] - и вторые моменты (CQ-,LQ-,QQ - схемы). В задачах с (x, y) - геометрией это увеличивает число неизвестных в каждой ячейке до 7-8 для схем 4-го порядка. Вычислительные алгоритмы при этом заметно усложняются.

Однако, как показано многочисленными исследованиями для (x, y) - геометрии, переход к схемам повышенного порядка точности позволяет работать на значительно более грубых сетках, что в конечном счете снижает как требования к оперативной памяти, так и расчетное время [13-14].

Существенным шагом является разработка класса адаптивных схем AWLD-AWLM, предложенных А.М.Волощенко [15, 16]. В (x, y) - геометрии они являются обобщением LN- и LL- схем при дробно-рациональном представлении экспоненциальных коэффициентов. В них вводятся два весовых параметра по каждой переменной, и коррекция на положительность осуществляется так же, как в AWDD - схеме, по результатам предварительной оценки степени изменения нулевого и первого моментов потока в расчетной ячейке. Такой подход дает возможность распространить эти схемы на задачи с криволинейной геометрией [16], нестационарные задачи и задачи с производной по энергетической переменной.

* SR- метод ---Streaming Rays method.

** MCCG – метод ---Method Characteristics in Complex Geometry.

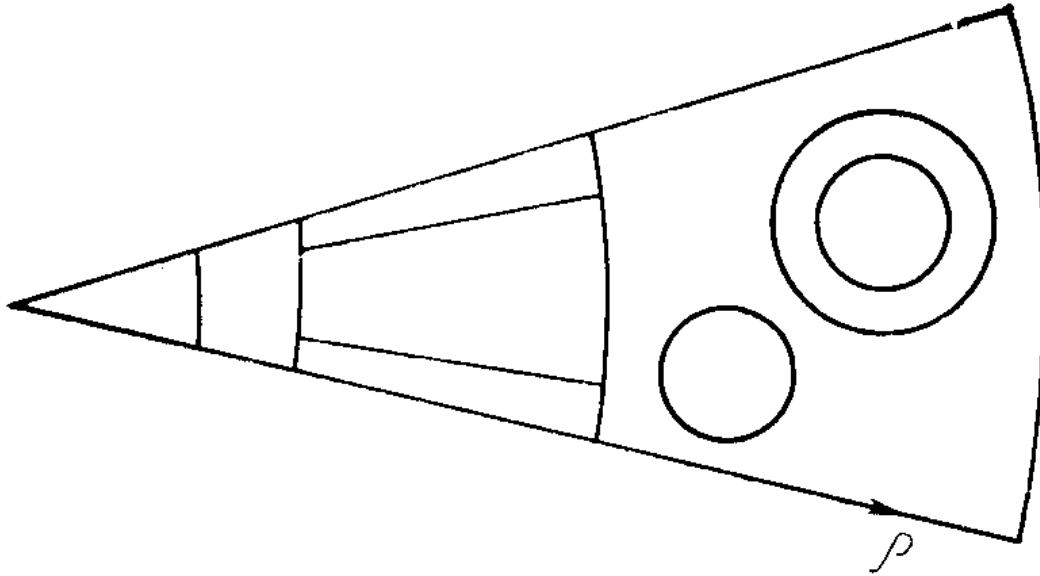


Рис. 4. Пример нерегулярной геометрии.

Большое число методических расчетов [1, 16] позволяет утверждать, что эти схемы хорошо работают как в (x, y) - , так и (r, z) - геометриях;

в интегральных (по углам и зонам) величинах дают 4-й порядок точности;

практически необходимую точность дают на значительно более грубых сетках, чем AWDD - схемы, сокращая расчетное время и существенно снижая требования к оперативной памяти;

не дают отрицательных значений потоков и не ухудшают по сравнению с AWDD сходимость итераций по столкновениям.

Сейчас развиваются и исследуются варианты нодальных схем для расчетных сетей, в которых каждая ячейка однородна. Следующим шагом должно быть рассмотрение задач и с неоднородными ячейками. В реакторных задачах расчет технологической ячейки в высокоточном приближении позволяет существенно упростить расчет установки в целом, на этом пути возможно эффективное решение некоторых проблем гетерогенности в задачах радиационной защиты.

Необходимым элементом итерационных процессов в задачах радиационной защиты являются процедуры ускорения сходимости (обычно очень медленной) итераций по столкновениям. В основе этих процедур лежит уточнение каждой итерации мультипликативными или чаще (особенно в задачах с неоднородной геометрией) аддитивными поправками, которые находятся в низком (диффузионном) приближении. Существенное условие эффективности этих процессов – полная согласованность их с сеточной аппроксимацией исходной задачи [1, 17-19]. К настоящему времени такие процедуры отработаны многочисленными расчетными исследованиями, посредством фурье-анализа получены теоретические оценки скорости сходимости соответствующих ускоренных итерационных процессов в простейших задачах для однородного плоского слоя [17, 18]. Такие оценки и

расчетный опыт позволяют утверждать, что, как правило, достаточно 4-7 итераций с ускорением для достижения практически необходимой точности (например, нескольких процентов при ослаблениях до 4-6 порядков) как при работе со схемами 1-го и 2-го порядков [1], так и со схемами 3-го и 4-го порядков [19] точности.

Существенное продвижение в разработке устойчивых разностных схем метода дискретных ординат и итерационных алгоритмов с быстрой сходимостью позволило повысить эффективность расчетных программ в широком круге задач радиационной защиты. Однако проблемы глубокого проникновения излучения требуют дальнейшего развития вычислительных методов и программного аппарата. Уникальные решения здесь достигнуты ценой громадных затрат на основе большого практического опыта и интуиции исследователей виртуозным сочетанием метода дискретных ординат с методом Монте-Карло и физическим экспериментом [3, 4].

В задачах с большими однородными зонами существенным резервом является использование свойств гладкости решения в этих зонах, что позволяет ограничиться расчетом в низком приближении. На рис. 5 по результатам расчетов нейтронных полей во внутрикорпусной защите ВВЭР-1000 по программе РАДУГА-3 в (r, z) - геометрии (А.А.Петрулевич, 1987 г.) выделены диффузионные области, где погрешность диффузионного приближения не превышает 20% , и пограничные слои, где требуется расчет в кинетических приближениях. Привлечение теории сингулярных возмущений позволяет теоретически обосновать разделение решения на регулярные и сингулярные слагаемые.

Алгоритмы метода дискретных ординат сейчас успешно распространяются на задачи о «заряженном» излучении с дифференциальным оператором (1). Существенным моментом здесь является высокая степень аппроксимации энергетической производной [20]. Рассмотрение каскадных процессов затрудняет разнородность свойств среды относительно различных видов излучения (коэффициенты уравнений могут отличаться в 10^n раз).

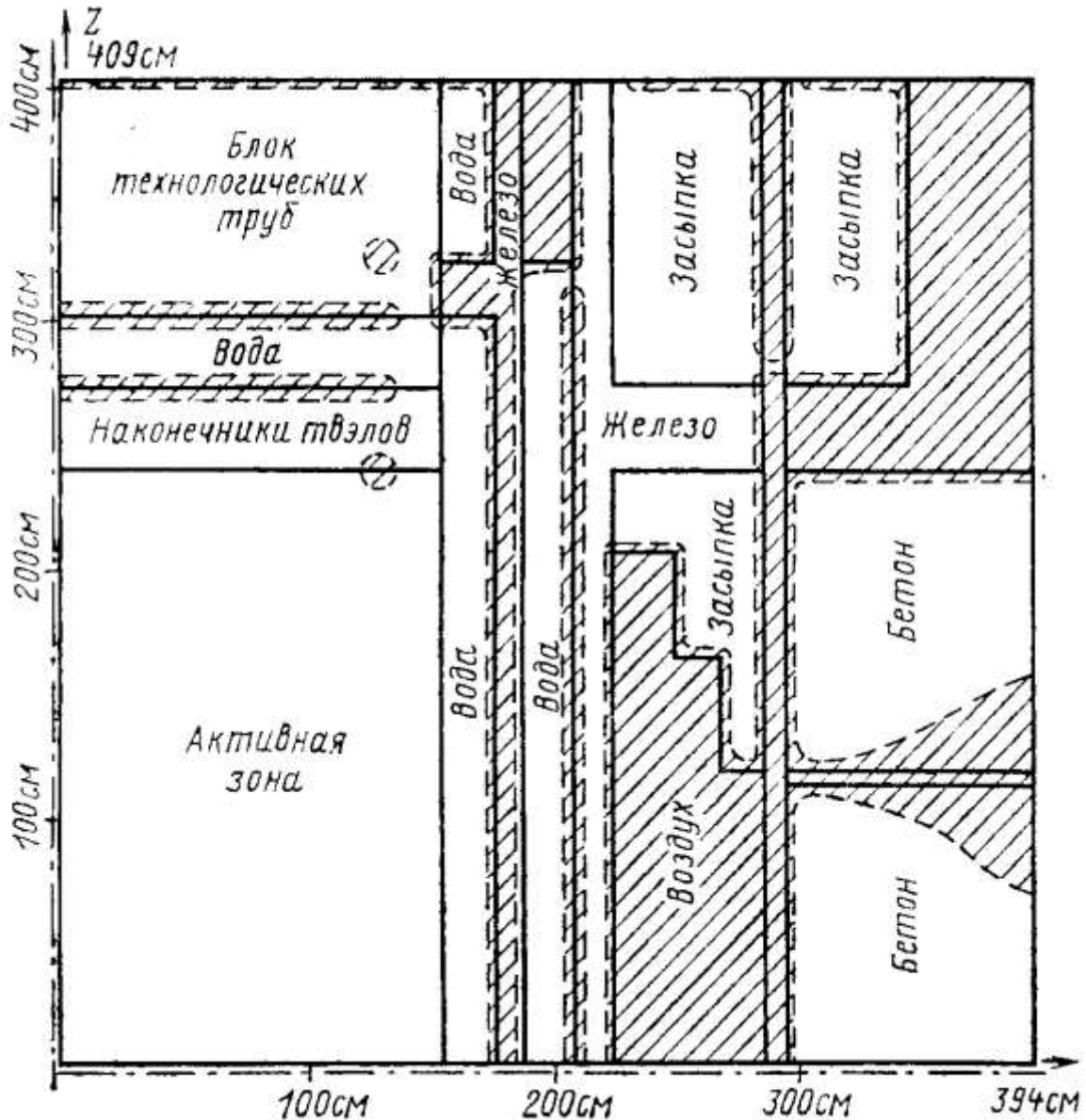


Рис. 5. Диффузионные области и пограничные слои для тепловой группы нейтронов в установке ВВЭР-1000.

Проблемы глубокого проникновения и исследования каскадных процессов требуют расширения системной организации константно-программного обеспечения. Работы в этом направлении развиваются на базе основных комплексов РОЗ-ЕС, РАДУГА-ЕС, GNDL-ЕС.

Список литературы

1. *Басс Л.П., Волощенко А.М., Гермогенова Т.А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: Институт прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1986, 232 с.
2. *Басс Л.П., Гермогенова Т.А. Дубинин А.А. и др.* Расчетное исследование поля нейтронов в цилиндрическом макете из железа. В сб: Тезисы докл. на 5-й Всес. научной конф. по защите от ионизир. излуч. ядерно-техн. установок. Протвино, сентябрь 1989 г. Протвино: ИФВЭ, 1989, с. 91.

3. *Басс Л.П. и др.* Специфика расчета (R-Z) модели сильно вытянутой по z радиационной защиты от внутреннего распределенного источника методом дискретных ординат. – Там же, с. 18.
4. *Barbucci P, Mariotty G.* Neutron spectral analysis of the Caorso boiling water reactor cavity and sacrificial shield penetrations and the comparison with the irradiation experiment result. – Nucl. Sci. Engng, 1988, v. 100, p.467-478.
5. *Волощенко А.М., Гуков С.В.* РОЗ-В.2 – программа для решения нестационарного переноса нейтронов и фотонов методом дискретных ординат в одномерных геометриях с учетом запаздывающих компонент излучения. _ В сб.: Тезисы докл. на 5-й Всес. научной конф. по защите от ионизир. излуч. ядерно-техн. установок. Протвино, сентябрь 1989 г. Протвино: ИФВЭ, 1989, с. 24.
6. *Волощенко А.М.* Численное решение нестационарного уравнения переноса с импульсными источниками. – Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и технология ядерных реакторов, 1986, вып. 4, с. 17-21.
7. *Волощенко А.М., Горбатков Д.В., Крючков В.П.* Численный алгоритм решения стационарного уравнения переноса заряженного излучения. - В сб.: Тезисы докл. на 5-й Всес. научной конф. по защите от ионизир. излуч. ядерно-техн. установок. Протвино, сентябрь 1989 г. Протвино: ИФВЭ, 1989, с. 23.
8. *Filippone W., Wolf S., Lavigne R.* Particle transport calculations with the method of streaming rays. - Nucl. Sci. Engng, 1981, v. 77, N 2, p. 119-136.
9. *Суслов И.Р.* Метод характеристик в областях со сложной геометрией. – Атомная энергия, 1988, т. 65, вып. 1, с. 57-58.
10. *Lawrence R., Dorning J.* A discrete nodal integral transport theory method for multidimensional reactor physics and shielding calculations. – In: Proc. Conf. Advances in Reactor Physics and Shielding, Sun Valley, Sept. 1980. ANS, 1980.
11. *Walters W., O'Dell R.* A comparison of linear nodal, linear discontinuous and diamond schemes for solving the transport equation in (x,y) – geometry. – Trans. Amer. Nucl. Soc., 1982, v. 39, p. 465-467.
12. *Walters W.F.*, Recent developments in nodal and characteristic methods in transport theory. – Ibid., 1982, v. 43, p. 611-612.
13. *Badruzzaman A.* An Efficient Algorithm for Nodal Transport Solution in multidimensional geometry. – Nucl. Sci. Engng, 1985, v. 89, N 3, p. 281-290.
14. *Azmy Y.* Comparison of three approximation to the linear-linear transport method in weighted diamond difference form. - Nucl. Sci. Engng, 1988, v. 100, N 3, p.190-200.
15. *Волощенко А.М.* Дважды консервативная схема 4-го порядка точности для уравнения переноса в криволинейных геометриях: Препринт ИПМ АН СССР. 1984. № 49.
16. *Волощенко А.М., Швецов А.В.* Опыт использования нодальных схем для решения стационарного уравнения переноса нейтронов и фотонов в двумерных защитных композициях. В сб.: Тезисы докл. на 5-й Всес. научной

конф. по защите от ионизир. излуч. ядерно-техн. установок. Протвино, сентябрь 1989 г. Протвино: ИФВЭ, 1989, с. 25.

17. *Adams M., Martin W.* Boundary projection acceleration. A new approach to synthetic acceleration of transport calculation. - Nucl. Sci. Engng, 1988, v. 100, N 3, p.177-189.

18. *Larsen E.* Unconditionally stable diffusion synthetic acceleration method for the slab geometry discrete ordinates equations. - Ibid., 1982, v. 82, N 1, p. 47-63.

19. *Волощенко А.М., Кондратенко Е.П.* КР₁- схема ускорения внутренних итераций, согласованная с семейством WLM-WLD- схем для уравнения переноса в одномерных геометриях; Препринт ИПМ АН СССР № 197, 1987.

20. *Morel J.* An improved Fokker-Planck angular differencing scheme. - Nucl. Sci. Engng, 1985, v. 89, N 2, p.131-136.

CHARACTERISTIC VALUES OF THE TRANSPORT EQUATION
AS FUNCTIONS OF THE PROBLEM PARAMETERS

T.A. Germogenova, A.A. Petrulovich

Keldysh Institute of Applied Mathematics Russian Ac. of Sci.
Moscow 125047, Russia

TRANSPORT THEORY AND STATISTICAL PHYSICS,
22(2&3), 293-329 (1993)

ABSTRACT

The spectrum of the monoenergetic boundary value transport equation problem with general boundary conditions is studied. For the problems with special scattering cross-sections, the variational minima-maxima principles for the characteristic values (c.v.) are obtained. The dependence of the c.v. on the problem parameters (total and scattering cross-sections boundary conditions, size and shape of the region) is studied. In some cases the result is the monotonicity, in some cases the result is the continuity, and in some cases the analyticity of the c.v. dependence on these parameters.

INTRODUCTION

In this work the spectrum of the boundary value problem for the monoenergetic transport equation is studied. The problem is

$$\mathbb{L}\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \lambda S\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \quad (1)$$

where $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ is the differential flux in the point \mathbf{r} of region G in the direction \mathbf{s} ,

$$\mathbb{L}\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \left(\mathbf{s}, \frac{1}{\delta(\mathbf{r})} \nabla \right) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \quad (2)$$

$$S\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \frac{1}{\delta(\mathbf{r})} \int_{\Omega} \delta_s(\mathbf{r}, (\mathbf{s}, \mathbf{s}')) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}') ds'$$

Ω is the unit sphere, $\delta(\mathbf{r})$ is the total cross-section, $\delta_s(\mathbf{r}, \chi)$ is the cross-section of scattering in the point \mathbf{r} at the angle $\cos^{-1}(\chi)$, and λ is the characteristic value (c.v.).

At the boundary surface ∂G the boundary condition is given

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}_-) = \mathcal{R}[\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}_+)] \quad (3)$$

where $\mathbf{r} \in \partial G$, \mathbf{s}_- and \mathbf{s}_+ are the directions of both the incoming and outgoing flux.

The investigations of the spectrum of such boundary value problems has begun with the work by V. S. Vladimirov [1]. In this work the boundary conditions were vacuum with the streaming through the voids. The discreteness of

the spectrum was shown and some general statements about its location were obtained. The minima-maxima variational principle for the c.v. of the problems with the positive operator $UIS(U\varphi(r,s) = \varphi(r,-s))$ was stated (the transport equation considered in the first-order form). The minima-maxima principle for the c.v. of the problems in the even-parity form (problems with even scattering $UIS = S$) was also obtained. Some results on the c.v. dependence on the cross-sections were obtained.

Further development of these results has been done in the works by T.A. Germogenova [2,3] and by S.B. Shikhov [4]. In these works the discreteness of the spectrum was obtained for the problems with the general law of the reflection from the boundary and for the problems with energy.

In the work by S.B. Shikhov and Ju I. Ershov [5] the variations of the c.v. caused by the similar expansion of the region G. were studied for the problems with the vacuum boundary conditions.

This work is devoted to the development of the mentioned results for the monoenergetic problems (1)-(3) with general law of reflection ($R \neq 0$). It is shown that all results obtained for the c.v. of the problems with vacuum boundary conditions are valid for the problems with general reflection. For the problems with special scattering laws ($UIS \geq 0$ and $UIS = S$) the dependence of the c.v. on the problem parameters ($\delta(r), \delta_s(r, \chi), R$, size of G, shape of G) is studied. In some cases the result is the monotonicity, in some cases the result is the continuity, and in some cases the analyticity of the c.v. dependence on these parameters. For example, one of the consequences from these results is that for the problem (1)-(3) with $R \equiv 0$ the c.v. $\{\lambda^k\}$ are located between the c.v. $\{\lambda^{k+}\}$ and $\{\lambda^{k-}\}$ of the auxiliary problems with the special types of the boundary conditions R^+ and R^- (analogous to the Dirichlet and the Neumann problems for the diffusion equation). Since for some of these auxiliary problems the condition $R \geq 0$ (if $\varphi \geq 0$ then $R_\varphi \geq 0$) are not fulfilled so in this work R is permitted to be nonpositive. The obtained results should be considered as a tool for spectral studies of the rather complicated problems (1)-(3) by the studying the spectra of easier model problems.

The work is divided into the sections in the following way. §1 is the formulation of the problem. The known results on the spectrum of the problem with $R \equiv 0$ are presented in §2. In section §3 the spectrum of the problem with $R \neq 0$ is studied; both known results and new ones (compactness of the operator $L^{-1}S$ for the problems with $\|R\| \leq 1$) are presented. In §4 the variational minima-maxima principle for the c.v. $\{\lambda^k\}$ of the problems with $R \neq 0$ are obtained. These principles (transport equation both in the first order form and in the even-parity form) are obtained for the problems (1)-(3) with the special types of scattering operator S. In §5, 6, 7, 8 the dependence of the c.v. $\{\lambda^k\}$ on the problem parameters $\delta(r), \delta_s(r, \chi), R$, G (for the problems of the considered classes) is

considered. Between other results there is the continuity of the c.v. on deformations of the region G. The work is done using techniques developed in the works [2,3].

Such investigations of the spectrum for the problem (1)-(3) has both mathematical and computational interest. From the computational point of view this interest is explained by the facts: a) the comparison of the spectra of the continuous transport boundary value problem and of its discrete approximation is a method to estimate the quality of this approximation; b) the detailed information on the continuous and discrete transport boundary value problems permits investigation the questions on the applicability and efficiency of the convergency acceleration methods.

Questions close to the ones considered in this work were studied in the works of V.I. Agoshkov [7,8], and also in the works of A.A. Lobarev [9], M. Otelbaev [10], D.N. Turmukhambetov [11] and V.Yu. Plyashkevich [12].

§1 STATEMENT OF THE PROBLEM

Following [1,2,3,4] we shall consider the problems (1)-(3) in the region G, consisting of a finite number of subregions (zones) $G_i (G = \bigcup_{i=1}^N G_i, N < \infty, G_i \cap G_j = \emptyset, i \neq j)$. Each of the zones is an open and bounded set in R_3 .

By $r_+ = r_+(r, s)$ and $r_- = r_-(r, s)$ we shall designate the nearest to $r \in G$ points of the boundary surface in which the ray passing through the point r in the direction s comes into G and comes from G:

$$r_{\pm}(r, s) = r + \xi_{\pm} s \quad -d \leq \xi_- < 0 < \xi_+ \leq d \equiv diamG.$$

The set notations

$$\Gamma = \partial G \times \Omega, \quad \Gamma_{\pm} = \{r_{\pm}(r, s), s | r \in G, s \in \Omega\}$$

also shall be used.

The region G is assumed to satisfy the condition of «generalized» convexity. This means that for almost all rays passing through the G the number of points of intersection of the ray with the boundary Γ (i.e. the number of points $r_{\pm}(r, s)$) is finite [1-3].

The coefficients of the problem (1)-(3) satisfy the following conditions. Functions $\sigma(r)$ and $\sigma_s(r, \chi)$ are defined almost everywhere in G and $G \times (-1, 1)$,

$$\underline{\sigma} = \inf_{r \in G} \sigma(r) > 0, \quad \overline{\sigma} = \sup_{r \in G} \sigma(r) < \infty \quad \dots\dots\dots(1.1)$$

$\sigma_s(r, \chi) \geq 0$ almost everywhere in $G \times (-1, 1)$,

$$\sigma_s(r, \chi) = \sum_{i=1}^I p^i(r) g^i(\chi) \neq 0, \quad I < \infty \quad (1.2)$$

$$p^i(\mathbf{r}) \in L_\infty(G), \quad g^i(\chi) \in L_1(-1,1), \quad i=1,\dots,I.$$

where $p^i(\mathbf{r})$ are the densities of the isotopes, $g^i(\chi)$ are the scattering cross-section of the isotopes.

$$\text{Let } \omega_\ell(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{\sigma(\mathbf{r})} \int_{-1}^1 \sigma_s(\mathbf{r}, \chi) P_\ell(\chi) d\chi, \quad \ell=0,1,\dots,L$$

$$\sigma_{s\ell}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r})\omega_\ell(\mathbf{r}),$$

where $P_\ell(\chi)$ are the Legendre polynomials. Then

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \chi) = \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{4\pi} \sigma_{s\ell}(\mathbf{r}) P_\ell(\chi). \quad (1.3)$$

Inequality $\omega_0(\mathbf{r}) > 0$ is fulfilled on a set of positive measure in G .

The $L_p(M)$ with $1 \leq p \leq \infty$ is the set of functions integrable to the p -th power over the set M (for $M = (-1,1)$, $M = G$, $M = G \times \Omega$, $M = \Gamma$, $M = \Gamma_\pm$); $L_\infty(M)$ is the set of bounded almost everywhere in M . The norms in $L_p(G \times \Omega)$ and $L_p(\Gamma_\pm)$ are defined by the relations.

$$\|\varphi\|_p = \|\varphi\|_{L_p(G \times \Omega)} = \left\{ \int_{G \times \Omega} \sigma(\mathbf{r}) |\varphi(\mathbf{r}, s)|^p d\mathbf{r} ds \right\}^{\frac{1}{p}},$$

$$\|\varphi_\pm\|_p = \|\varphi\|_{L_p(\Gamma_\pm)} = \left\{ \int_{\Gamma_\pm} |\varphi(\mathbf{r}, s)|^p d\Gamma \right\}^{\frac{1}{p}},$$

$d\Gamma = |(s, n)| d\mathbf{r} ds$, n is the external normal to the surface $\partial\bar{G}$,

$$\|\varphi\|_{L_p(\Gamma)} = \|\varphi_+\|_p + \|\varphi_-\|_p$$

If $p = \infty$ then the norms $\|\varphi\|_p$, $\|\varphi_\pm\|_p$ are defined as sup vrai over the corresponding set.

It is shown in [2, 3] that if $\varphi \in L_p(G \times \Omega)$ and $(s, \nabla)\varphi \in L_p(G \times \Omega)$ then:

1) in the norm

$$\|\varphi\|_p + \|(s, \nabla)\varphi\|_p, \quad 1 \leq p \leq \infty \quad (1.4)$$

this function is equivalent to the sum

$$\varphi_-(\mathbf{r}_-, s) + \Phi(\mathbf{r}, s)$$

where $\mathbf{r} = \mathbf{r}_- + \xi s$, $0 \leq \xi \leq d$; the functions $\varphi_-(\mathbf{r}_-, s)$, $\Phi(\mathbf{r}_- + \xi s, s)$ are defined almost for all $(\mathbf{r}_-, s) \in \Gamma_-$ and for these (\mathbf{r}_-, s) the function $\Phi(\mathbf{r}_- + \xi s, s)$ is absolutely continuous over ξ in (ξ_-, ξ_+) and $\Phi(\mathbf{r}_-, s) = 0$.

2) if $\varphi_- = \varphi(\mathbf{r}_-, s) \in L_p(\Gamma_-)$ then $\varphi_+ = \varphi(\mathbf{r}_+, s) \in L_p(\Gamma_+)$.

Let us introduce the Banach functional space H_p of such functions φ , $\varphi(\mathbf{r}, s) \in L_p(G \times \Omega)$ for which $(s, \nabla)\varphi \in L_p(G \times \Omega)$, $\varphi_- \in L_p(\Gamma_-)$. The norm in H_p is defined by the relation

$$\|\varphi\|_p = \|\varphi\|_p + \left\| \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) \varphi \right\|_p + \|\varphi_-\|_p \quad (1.5)$$

The results 1) and 2) permit use of H_p as the main functional space for the boundary value problems (1)-(3). In fact, if the coefficients satisfy to (1.1)-(1.3) then the operator L is defined for functions $\varphi (\varphi \in L_p(G \times \Omega))$ and

$$(s, \nabla)\varphi \in L_p(G \times \Gamma) \text{ and}$$

$$L\varphi = \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) \varphi + \varphi \in L_p(G \times \Omega),$$

and operator S is bounded in $L_p(G \times \Gamma)$ [1, 2, 3]. Operator $R [L_p(\Gamma_+) \Rightarrow L_p(\Gamma_-)]$ in (3) is supposed to be bounded.

The solution of the problem (1)-(3) is the solution in the weak sense, that is

$$\int_{G \times \Omega} \sigma \psi (L - \lambda S) \varphi \, d\mathbf{r} ds + \int_{\Gamma_-} \psi_- (\varphi_- - R \varphi_+) \, d\Gamma = 0 \quad (1.6)$$

for every function $\psi \in H_{p'}$, where $p' = (1 - p^{-1})^{-1}$, $\psi_- = \psi(\mathbf{r}_-, s)$ [2, 3].

§2 SPECTRUM OF THE PROBLEM WITH THE ZERO ($R \equiv 0$) BOUNDARY CONDITIONS

In this section problems with the $R \equiv 0$ are considered. Problems with the boundary conditions with streaming through cavities are considered in §§ 3, 4 as the problems with a special type of operator $R \neq 0$.

If $R \equiv 0$ then H_p is defined by the norm (1.4) and the formulation of the problem is the same as in [1]. In fact, the existence of the generalized derivative $(s, \nabla)\varphi$ in $L_p(G \times \Omega)$ implies the absolute continuity of $\varphi(\mathbf{r}, s)$ along the almost all rays $\mathbf{r} = \mathbf{r}_- + \xi s$ in G . The fulfillment of (1.6) means that the equation (1) is satisfied almost everywhere in $G \times \Omega$. At the surface $\partial \bar{G}$ the boundary conditions are not vacuum (that means the streaming through the cavities if the region G is not convex), but they are $\varphi(\mathbf{r}_-, s) = 0$ almost everywhere in Γ_- .

In this case [1, 2, 3] the boundary value problem (1)-(3) is equivalent to the functional equation

$$\varphi = \lambda L_0^{-1} S \varphi, \quad (2.1)$$

where the operator L_0^{-1} is defined by the relation:

$$L_0^{-1} F(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \sigma(\mathbf{r}_- + \xi \mathbf{s}) F(\mathbf{r}_- + \xi \mathbf{s}) e^{-\tau(\mathbf{r}_- + \xi \mathbf{s}, \mathbf{r})} d\xi,$$

$$\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta(\mathbf{r}' + \xi \mathbf{s}) d\xi \dots \dots (\text{here } \mathbf{s} = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}). \quad (2.2)$$

The subscript $_0$ corresponds to $\mathbf{R} \equiv 0$. The operator $L_0^{-1} S$ is compact in $L_p(G \times \Omega)$, ($1 < p < \infty$), and correspondingly the spectrum of the problem is discrete in these spaces.

Let us draw attention to some properties of the c.v. $\{\lambda^k\}$ of the problem (1)-(3) with $\mathbf{R} \equiv 0$ established in [1, 2].

1. The set of c.v. $\{\lambda^k\}$ is numerable, and the following inequalities hold

$$0 < \frac{1}{\bar{\omega}_0} < \frac{1}{[\bar{\omega}_0(1 - e^{-\bar{\sigma}d})]} \leq |\lambda^0| \leq |\lambda^1| \leq |\lambda^2| \leq \dots$$

(each of the c.v. is used as many times as its multiplicity); $\bar{\omega}_0 = \sup_{\mathbf{r} \in G} \bar{\omega}_0(\mathbf{r})$; only ∞ can be a point of accumulation; all the eigenfunctions $\varphi^k(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \in H_\infty(G \times \Omega)$, $k=1, 2, \dots$

2. Let operator U be defined by the relation [1, 2]

$$U\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \varphi(\mathbf{r}, -\mathbf{s}).$$

If $US \geq 0$ (i.e. $\sigma_{s_{2k}}(\mathbf{r}) \geq 0$ and $\sigma_{s_{2k+1}}(\mathbf{r}) \leq 0$, $k=0, 1, \dots$ almost everywhere in G) then all the c.v. $\{\lambda^k\}$ are real. The Courant [13, 14] minima-maxima variational principle is valid

$$\frac{1}{\lambda_+^p} = \min_{\substack{\varphi_i \in H_2 \\ i = 0, 1, \dots, p-1}} \max_{\substack{\varphi \in H_2 \\ [\varphi, US\varphi_1]=0 \\ [\varphi, US\varphi] \neq 0}} F_0(\varphi), p = 0, 1, \dots \quad (2.3)$$

$$\frac{1}{\lambda_-^q} = \max_{\substack{\varphi_i \in H_2 \\ i = 0, 1, \dots, q-1}} \min_{\substack{\varphi \in H_2 \\ [\varphi, US\varphi_1]=0 \\ [\varphi, US\varphi] \neq 0}} F_0(\varphi), q = 0, 1, \dots$$

where

$$F_0(\varphi) = \frac{[\text{US}\varphi, \text{L}_0^{-1} \text{S}\varphi]}{[\text{US}\varphi, \varphi]},$$

λ_+^p, λ_-^q are the p-th by the absolute value positive and q-th by the absolute value negative c.v. of the problem. (At the elements of the space H_2 the inner product $[\cdot, \cdot]$ is defined by the relation

$$[\varphi, \psi] = \int_{(G \times \Omega)} \sigma(r) \varphi(r, s) \psi(r, s) dr ds. \quad (2.4)$$

3. If $\sigma_{S_{2k+1}}(r) \equiv 0$ almost everywhere in G (i.e. $\text{US} = \text{S}^{(2k+1)}$) then the problem (1)-(3) can be reduced to the equivalent even parity form with respect to function

$$u(r, s) = \frac{1}{2} [\varphi(r, s) + \varphi(r, -s)]$$

in the H_2 space.

$$\text{Mu}(r, s) \equiv -\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla\right)^2 u + u = \lambda \text{Su} \quad (2.5)$$

$$u(r_-, s) = \frac{1}{\sigma(r_-)} (s, \nabla) u(r_-, s)$$

$$u(r_+, s) = -\frac{1}{\sigma(r_+)} (s, \nabla) u(r_+, s),$$

and the function φ is expressed through u by the relation

$$\varphi(r, s) = -\left(s, \frac{1}{\sigma(r)} \nabla\right) u(r, s) + u(r, s).$$

Operator M^{-1} exists and the problem (2.5) is reduced to the equivalent form

$$u = \lambda M^{-1} \text{Su}$$

The analysis of this problem [1, 2, 3] is carried out in the Hilbert space $H_2(G \times \Omega) \subset H_2(G \times \Omega)$ with the inner product

$$[u, v] = [\text{Mu}, v] \equiv$$

$$[u, v] + \left[\frac{1}{\sigma} (s, \nabla) u, \frac{1}{\sigma} (s, \nabla) v \right] + \int_{\Gamma} u v d\Gamma.$$

The weak solution of the problem (2.4) is an even function

$$u(r, s) = u(r, -s) \in H_2(G \times \Omega),$$

satisfying to the integral equation

$$[u, v] = \lambda [\text{Su}, v], \quad \forall v \in H_2.$$

All the c.v. $\{\lambda^k\}$ of this problem are real and the Courant minima-maxima principle is valid for them

$$\frac{1}{\lambda_+^p} = \min_{\substack{u_i \in H_2 \\ i = 0, 1, \dots, p-1}} \max_{\substack{u \in H_2 \\ [u, Mu_i] = 0 \\ [u, Mu] \neq 0}} \Phi_0(u), p = 0, 1, \dots \quad (2.6)$$

$$\frac{1}{\lambda_-^q} = \max_{\substack{u_i \in H_2 \\ i = 0, 1, \dots, q-1}} \min_{\substack{u \in H_2 \\ [u, Mu_i] = 0 \\ [u, Mu] \neq 0}} \Phi_0(u), q = 0, 1, \dots$$

where

$$\Phi_0(u) = \frac{[Su, u]}{[Mu, u]},$$

and λ_+^p, λ_-^q are the c.v. situated on the left and on the right from zero

§3 PROPERTIES OF THE OPERATORS AND THE SPECTRUM OF THE PROBLEM WITH REFLECTION FROM THE BOUNDARIES ($R \neq 0$)

In this section the problem (1-3) with $\|R\| \leq 1, 1 \leq p \leq \infty$ is considered. The existence of operators $L_R^{-1}, L_R^*, (L_R^{-1})^*$ is shown. The relations between these operators (similar to the relations between the operators $L_0, L_0^*, L_0^{-1}, (L_0^{-1})^*, S, S^*, U$ obtained in [1]) are established. The compactness of the operator $L_R^{-1}S$ in the spaces with $1 < p < \infty$ is shown. The investigation is carried out by a technique similar to [2, 3] (where the existence of the operator L_R^{-1} for the problems with $R \geq 0, \|R\|_p \leq 1, (1 \leq p \leq \infty)$ is shown and compactness of the operator $L_R^{-1}S$ for problems with $R \geq 0, \|R\|_p < 1, (1 < p < \infty)$ is proved).

3.1 Let us consider the boundary value problem

$$L_R \varphi = F, \varphi_- = R \varphi_+, F \in L_p(G \times \Omega) \quad (3.1)$$

It is not difficult to show that if $\|R\|_p < 1, (1 \leq p \leq \infty)$ then the operator L_R^{-1} exists. It is bounded and can be presented as a converging in $L_p(G \times \Omega)$ series

$$L_R^{-1} = L_0^{-1} + e^{-\tau(r, r_-)} R \left(\sum_0^\infty (T_+ R)^n \right) P_+ L_0^{-1} \quad (3.2.)$$

where $\tau(r, r_-)$ is defined by (2.2), operator P_+ is defined by

$$P_+ [\varphi(r, s)] = \varphi(r + \xi_+ s, s),$$

and operator T_+ is defined by

$$T_+ \varphi(r_+, s) = e^{-\tau(r_+, r)} \varphi(r_+, s).$$

In fact, according to (1.4) and the following it results the function φ can be presented as

$$\varphi(r, s) = L_0^{-1} F + e^{-\tau(r, r)} R \varphi_+. \quad (3.3)$$

Considering this relation with $r=r_+$ as a functional equation on $\varphi(r_+, s)$ one obtains

$$\varphi_+ = P_+ L_0^{-1} F + TR \varphi_+. \quad (3.4)$$

If $\|TR\|_p < 1$ then this equation has a unique solution for every function F . If $\varphi(r_+, s)$ is known then $\varphi(r, s)$ can be reconstructed in all of $G \times \Omega$ according to

(3.3). It is evident that $\|T\|_p \leq 1$ so if $\|R\|_p < 1$ then the operator series $\sum_{n=0}^{\infty} (TR)^n$ converges in L_p and presentation (3.2) is valid. In this case the operator L_R^{-1} can be presented in the form:

$$L_R^{-1} = KL_0^{-1}, \quad (3.5)$$

where K is a bounded operator in $L_p(G \times \Omega)$ and L_0^{-1} is defined by (2.2).

Remark to item 3.1: The obtained results are correct for the problem with $\|R\|_p \geq 1$ if the series $\sum (T_+ R)^n$ converges absolutely. Examples of such problems are:

a) problems with $\|T_+ R\| < 1$. It permits considering the one-dimensional plane

problems with $\|R\| < C_0$, where $C_0 = e^\tau$, $\tau = \int_0^h \sigma(x) dx$ and h is the thickness of the layer;

b) problems with $\|(T_+ R)^n\|_p < 1$ for $n \geq n_0 > 1$.

3.2 In [3] it is shown that if $R \geq 0$, $\|R\|_p \leq 1$, ($1 < p < \infty$) then operator L_R^{-1} exists and has the appearance of (3.2) and $\|L_R^{-1}\|_p \leq 1$. In this item it will be shown that all these results are correct for every R (not necessarily positive), $\|R\|_p \leq 1$.

Let us introduce operator \tilde{R} , defined by the kernel $\tilde{R}(r, s, r', s') = |R(r, s, r', s')|$. It is clear that if $\|R\| \leq 1$ then $\tilde{R} \geq 0$ and $\|\tilde{R}\| \leq 1$. According to [3] $L_{\tilde{R}}^{-1}$ exists and has the appearance (3.1), with R replaced by \tilde{R} .

For every $F \geq 0$ one can compare two functional series: the series (3.1) with $\tilde{\mathbf{R}}$ instead of \mathbf{R} and series (3.2) with operator \mathbf{R} . All the terms of the series

$$\left(\sum_0^\infty (\mathbf{T}_+ \tilde{\mathbf{R}})^n\right) \mathbf{P}_+ \mathbb{L}_0^{-1} F \quad (3.6)$$

are not negative and not less in absolute value than the terms of the series

$$\left(\sum_0^\infty (\mathbf{T}_+ \tilde{\mathbf{R}})^n\right) \mathbb{P}_+ \mathbb{L}_0^{-1} F \quad (3.7)$$

The series (3.6) converges in L_p ($1 < p < \infty$), so for every function $F \geq 0$ the series (3.7) also converges in L_p . Correspondingly the representation (3.2) is correct for every positive function.

Presenting the arbitrary function F in the form $F = F_+ - F_-$ where $F_+, F_- \geq 0$ and using the linearity of the operator \mathbb{L} we have that in (3.1) φ is uniquely determined by the F as

$$\varphi = \mathbb{L}_0^{-1} F + e^{-\tau(r,r)} \mathbf{R} \left(\sum_0^\infty (\mathbf{T}_+ \mathbf{R})^n\right) \mathbb{P}_+ \mathbb{L}_0^{-1} F,$$

and correspondingly the presentation (3.2) is correct.

3.3 Let $\|\mathbf{R}\|_p = 1$. Let us consider the problem (3.1) with the boundary condition $\rho \mathbf{R}$ (ρ is a number). If $\rho \in [-1, 1]$ then in the L_p space ($1 < p < \infty$) the next representation is correct for $\mathbb{L}_{\rho \mathbf{R}}^{-1}$:

$$\mathbb{L}_{\rho \mathbf{R}}^{-1} = \mathbb{L}_0^{-1} + e^{-\tau(r,r)} \rho \mathbf{R} \left(\sum_0^\infty \rho^n (\mathbf{T}_+ \mathbf{R})^n\right) \mathbf{T}_+ \mathbb{L}_0^{-1}.$$

This is power series in the parameter ρ converging in the points $\rho = \pm 1$. Correspondingly, this series converges uniformly in ρ on the interval $\rho \in [-1, 1]$ and consequently in $L_p(G \times \Omega)$ the operator $\mathbb{L}_{\rho \mathbf{R}}^{-1}$ is continuous in the parameter ρ in the interval $\rho \in [-1, 1]$ ($1 < p < \infty$), i.e.

$$\left\| \mathbb{L}_{\rho \mathbf{R}}^{-1} - \mathbb{L}_{\rho_1 \mathbf{R}}^{-1} \right\|_{L_p(G \times \Omega)} \Rightarrow 0, \rho \Rightarrow \rho_1, \rho, \rho_1 \in [-1, 1], 1 < p < \infty.$$

3.4 Let us introduce the adjoint operators and obtain relations between them analogous to the ones obtained in [1].

If $\varphi \in H_p$, $\psi \in H_{p'}$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$ then the inner product $[\varphi, \psi]$ is defined by

the relation (2.4). Operator \mathbf{R}^* is defined in such a way to fulfill the equality [6]

$$\int_{\Gamma_+} \varphi_+ \mathbf{R}^* \psi_- d\Gamma_+ = \int_{\Gamma_-} \mathbf{R} \varphi_+ \psi_- d\Gamma_- \quad (3.8)$$

(i.e. $\mathbf{R}^+(r, s, r', s') = \mathbf{R}^*(r', -s', r, -s)$), or $\mathbf{R}^* = \mathbf{U} \mathbf{R} \mathbf{U}$, or $(\mathbf{U} \mathbf{R})^* = \mathbf{U} \mathbf{R}$).

It is easy to show that $\mathbb{L}^* = \mathbf{U} \mathbb{L} \mathbf{U}$. According to (3.8) one has

$$\begin{aligned}
 [L_R \varphi, \psi] &= \left[(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) \varphi, \psi \right] + [\varphi, \psi] = \left[\varphi, (-s, \frac{1}{\sigma} \nabla) \psi \right] + [\varphi, \psi] + \int_{\Gamma} \varphi \psi \, d\Gamma = \\
 &= [\varphi, \mathbb{U} L_R \mathbb{U} \psi] + \int_{\Gamma_+} \varphi \psi \, d\Gamma_+ - \int_{\Gamma_-} \varphi \psi \, d\Gamma_- = \\
 &= [\varphi, \mathbb{U} L_R \mathbb{U} \psi] + \int_{\Gamma_+} \varphi_+ \mathbb{R} \psi_- \, d\Gamma_+ - \int_{\Gamma_-} \mathbb{R} \varphi_+ \psi_- \, d\Gamma_- = [\varphi, \mathbb{U} L_R \mathbb{U} \psi]
 \end{aligned}$$

Similar to [1] one can show that $s^* = s = \mathbb{U} s \mathbb{U}$.

In the same manner as it was done in items 3.1, 3.2 one can construct the operator $(L_R^*)^{-1}$ and show that it exists if $\|\mathbb{R}\| \leq 1$, $(1 < p < \infty)$ and has the form of converging in $L_p(G \times \Omega)$ series:

$$(L_R^*)^{-1} = (L_0^*)^{-1} + e^{-\tau(r_-, r_+)} \mathbb{R}^* \left(\sum_0^\infty (\mathbb{T}_- \mathbb{R}^*)^n \right) P_- (L_0^*)^{-1}. \tag{3.9}$$

Here the operator P_- is defined by the ratio

$$P_- [\varphi(r, s)] = \varphi(r + \xi_- s, s),$$

and operator \mathbb{T}_- is defined by

$$\mathbb{T}_- \varphi(r_-, s) = e^{-\tau(r_-, r_+)} \varphi(r_-, s).$$

The operators $L_R, L_R^*, (L_R^*)^{-1}$ exists and therefore operator $(L_R^{-1})^*$ also exists and the following equality holds

$$(L_R^*)^{-1} = (L_R^{-1})^*.$$

Now using the explicit expressions for the operators L_R^{-1} and $(L_R^{-1})^*$ one can show that

$$(L_R^{-1})^* = \mathbb{U} (L_R^{-1}) \mathbb{U} \tag{3.10}$$

for $\|\mathbb{R}\| \leq 1$. The proof is done by the direct verification for the corresponding terms of the series for the operators.

3.5 According to items 3.1, 3.2 the problem (1)-(3) is reduced to the functional equation

$$\varphi = \lambda L_R^{-1} S \varphi \tag{3.11}$$

in the spaces L_p or H_p .

In this item we show that operator $L_R^{-1} S [L_p \Rightarrow L_p], (1 < p < \infty)$ is compact for the problems with $\|\mathbb{R}\|_p \leq 1$. The proof is based on the fact that the operator $L_0^{-1} S [L_p \Rightarrow L_p], (1 < p < \infty)$ is compact [1].

In case $\|\mathbb{R}\|_p < 1$ it is true because

$$L_0^{-1} S = \mathbb{K} L_0^{-1} S$$

(according to (3.5)).

Let $\|\mathbb{R}\|_p = 1$. According to item 3.3 the operator $\mathbb{L}_{\rho R}^{-1}$ is continuous in the parameter ρ , $\rho \in [-1, 1]$, so $\|\mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S} - \mathbb{L}_{\rho R}^{-1} \mathbb{S}\|_p = \|(\mathbb{L}_R^{-1} - \mathbb{L}_{\rho R}^{-1}) \mathbb{S}\|_p \leq \|\mathbb{L}_R^{-1} - \mathbb{L}_{\rho R}^{-1}\|_p \|\mathbb{S}\|_p \Rightarrow 0$ $\rho \Rightarrow 1$, $1 \leq p \leq \infty$.

Correspondingly operator $\mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S}$ is compact in $L_p(G \times \Omega)$, $1 < p < \infty$ as a limit by the norm of the compact operators $\mathbb{L}_{\rho R}^{-1} \mathbb{S}$.

So if $\|\mathbb{R}\|_p \leq 1$ then both the problem (1)-(3) and the equation (3.11) in the spaces $L_p(G \times \Omega)$, ($1 < p < \infty$) have a discrete spectrum with the only possible point of accumulation ∞ :

$$0 < |\lambda^1| \leq |\lambda^2| \leq |\lambda^3| \leq \dots$$

§4 MINIMA-MAXIMA PRINCIPLE FOR C.V. OF THE PROBLEM WITH $\mathbb{R} \neq 0$

In this and following sections problems (1)-(3) will be studied in the space $H_2(G \times \Omega)$. In this section it will be shown that for the c.v. of the problems with $\mathbb{R} \neq 0$ the variational principle similar to the ones considered in §2 for the problems with $\mathbb{R} = 0$ are valid. In item 4.1 the variational principle analogous to (2.3) and items 4.2-4.6 principle analogous to (2.6) are introduced.

4.1 One can see that operator $\mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{S}$ symmetrizes the operator $\mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S}$:

$$(\mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{S} \mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S})^* = (\mathbb{S})^* (\mathbb{L}_R^{-1})^* (\mathbb{S})^* (\mathbb{U})^* = (\mathbb{S}) (\mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{U}) (\mathbb{S}) (\mathbb{U}) = \mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{S} \mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S}.$$

So the positivity of $\mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{S}$ (i.e. conditions $\sigma_{2k}(r) \geq 0$, $\sigma_{2k+1}(r) \leq 0$, $k=0, 1, 2, \dots$ almost everywhere in G) lead to the fulfillment of the principle (2.3) with \mathbb{L}_0^{-1} replaced by \mathbb{L}_R^{-1} .

4.2 Let us show that for problems with even scattering $\mathbb{S} = \mathbb{U} \mathbb{I} \mathbb{S}$ (i.e. $\sigma_{2k+1}(r) = 0$ almost everywhere in G) the variational principle (2.6) is valid (with replacement of \mathbb{M} by another operator and with changing the region of search).

By the commonly used substitution

$$u(r, s) = \frac{1}{2}(\varphi(r, s) + \varphi(r, -s)), \quad v(r, s) = \frac{1}{2}(\varphi(r, s) - \varphi(r, -s))$$

$$(i.e. \varphi(r, s) = u(r, s) + v(r, s), \quad \varphi(r, -s) = u(r, s) - v(r, s))$$

one can transform the equation (1) to the form

$$\mathbb{M} u = -\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla\right) u + u = \lambda s u \quad (4.1)$$

$$\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla\right) u + v = 0$$

The boundary conditions (3) are reduced by these displacements to the form

$$u(r, s) + v(r, s) = \int_{\Gamma_-} R(r, s, r', s') (u(r', s') - v(r', s')) d\Gamma'_-, \quad (r, s), (r', s') \in \Gamma_-$$

$$u(r, s) + v(r, s) = \mathbb{R}u(u(r, s) - v(r, s)), \quad (r, s) \in \Gamma_-,$$

$$(\mathbb{I} - \mathbb{R}u) u(r, s) = -(\mathbb{I} + \mathbb{R}u) v(r, s) = (\mathbb{I} + \mathbb{R}u) \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u(r, s), \quad (r, s) \in \Gamma_- \quad (4.2)$$

If operator $\mathbb{L}_R^{-1}[H_2 \Rightarrow H_2]$ for the problem (1)-(3) exists, then one can show that operator \mathbb{M}_R^{-1} also exists and can be expressed by the ratio

$$\mathbb{M}_R^{-1} = \frac{1}{2} (\mathbb{L}_R^{-1} + u \mathbb{L}_R^{-1} u)$$

and $\|\mathbb{M}_R^{-1}\| \leq \|\mathbb{L}_R^{-1}\|$. Correspondingly, the problem (4.1)-(4.2) is equivalent to the equation

$$u = \lambda \mathbb{M}_R^{-1} \mathbb{S} u, \quad u \in A_R \quad (4.3)$$

where operator $\mathbb{M}_R^{-1} \mathbb{S}$ is compact if the $\mathbb{L}_R^{-1} \mathbb{S}$ operator is compact.

It is evident that if λ_0 and φ_0 are the c.v. and corresponding eigenfunction (e.f.) of the problem (1)-(3) then λ_0 and $u_0 = \frac{1}{2}(\varphi_0(r, s) + \varphi_0(r, -s))$ are the c.v. and e.f. of the problem (4.1)-(4.2). And conversely if λ_0 and u_0 are the c.v. and corresponding e.f. of the problem (4.1)-(4.2) then λ_0 and $\varphi_0 = -\left(s, \frac{1}{2} \nabla\right) u_0 + u_0$ are the c.v. and e.f. of the problem (1)-(3).

So further in this section we shall study the spectrum of the problem (4.3) instead of problem (1)-(3) spectra studies.

4.3 The set of the even (in angle) functions $u \in H_2$ satisfying the boundary conditions (4.2) is designated further in this section as A_R .

Let us introduce bilinear form

$$[\mathbb{M}_R u, w] \equiv [u, w] + \left[\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u, \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) w \right] - \int_{\Gamma} \text{sign}(s, n) w \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u d\Gamma \quad (4.4)$$

Further, let this form be defined, bounded, positive and symmetric on the whole A_R . (The aggregate of these conditions is referred to further in the section as the condition «M».) Then one can introduce the inner product in A_R by the expression $\|u, w\| = [\mathbb{M}_R u, w]$ and the resulting space is complete.

In this case the spectrum of the equation (4.3) is real, the set of eigenfunctions is complete in the space $\|\cdot\|$ for the all eigenfunctions $\|u_i, u_j\| = 0$, $i \neq j$ and correspondingly $[Su_i, u_j] = 0$, $i \neq j$. For the c.v. the following minima-maxima variational principle is valid

$$\frac{1}{\lambda_+^p} = \min_{\substack{u_i \in A_2 \subset H_2 \\ k = 0, 1, \dots, p-1}} \max_{\substack{u \in A_2 \subset H_2 \\ [u, Su_i] = 0 \\ [u, Su] \neq 0}} \Phi_R(u), \quad p = 0, 1, \dots$$

(4.5)

$$\frac{1}{\lambda_-^q} = \max_{\substack{u_i \in A_2 \subset H_2 \\ k = 0, 1, \dots, q-1}} \min_{\substack{u \in A_2 \subset H_2 \\ [u, su_i] = 0 \\ [u, su] \neq 0}} \Phi_R(u), q = 0, 1, \dots$$

where

$$\Phi_R(u) = \frac{\|M_R^{-1} S u, u\|}{\|u, u\|} = \frac{[s u, u]}{[M_R u, u]},$$

and λ_+^p , λ_-^q are the c.v. in the left and on the right of the zero.

4.4 Let us consider for what type of boundary conditions (i.e. for what A_R) the condition «M» is valid and consequently, (4.5) is valid.

The first two terms of (4.4) satisfy «M» not only on the A_R but also on the whole H_2 . So the question is about the third term: it should be symmetric and nonnegative.

Possibility 1. $\|\mathbb{R}U\| < 1$. Then $(I + \mathbb{R}U)^{-1}$ exists on Γ_- and the boundary condition (4.2) can be rewritten in the form

$$\mathbb{B} u(r, s) \equiv (I + \mathbb{R}U)^{-1} (I - \mathbb{R}U) u(r, s) = \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u(r, s), (r, s) \in \Gamma_- \quad (4.6)$$

The operator \mathbb{B} is represented as the absolutely converging series

$$\mathbb{B} = \left(\sum_0^{\infty} (-1)^n (\mathbb{R}U)^n \right) (I - \mathbb{R}U), \quad (4.7)$$

$$\|\mathbb{B}\| \leq \frac{1 + \|\mathbb{R}U\|}{1 - \|\mathbb{R}U\|}.$$

For the symmetry of \mathbb{B} the symmetry of $\mathbb{R}U$ is enough because all the $(\mathbb{R}U)^n$ are also symmetric and correspondingly the sum of the series (4.7) is symmetric.

Expressing u and v through φ , one has

$$\begin{aligned} - \int_{\Gamma} \text{sign}(s, n) u(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u d\Gamma &= 2 \int u v d\Gamma_+ = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_+} [\varphi(r, s) + \varphi(r, -s)] [\varphi(r, s) - \varphi(r, -s)] d\Gamma_+ = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_+} [\varphi^2(r, s) - \varphi^2(r, -s)] d\Gamma_+ \end{aligned}$$

the last is not negative if $\|\mathbb{R}U\| < 1$.

Possibility 2. The third term in (4.4) equals to zero. This is possible in the following evident cases:

a. $w(r_-, s) = w(r_+, s) = 0$

It is a reflection backward with the change of the flux

$$\text{sign } \varphi(r, s) = -\varphi(r, -s), (r, s) \in \Gamma_- \text{ (i.e. } \mathbb{R}U = -1 \text{)}.$$

b. $(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u(r_-, s) = (s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u(r_+, s) = 0$

It is the reflection of the flux backward without changing the sign $\varphi(r, s) = \varphi(r, -s)$,

$(r,s) \in \Gamma_-$ (i.e. $\mathbb{R}U = I$).

Possibility 3. Γ_+ can be divided into two subdomains Γ_+^1 and Γ_+^2 so that in Γ_+^1 \mathbb{R} corresponds to the possibility 1 and in Γ_+^2 to the possibility 2.

4.5 Now one can consider the possibility of broadening the set for the extremum search of the functional (4.5) from A_R up to the set of all angularly even functions from H_2 (because the functional $\Phi_R[u]$ is defined formally on all functions in H_2).

By direct variations of the functional $\Phi_R[u]$ one can see that for possibility 1 from item 4.4 the «natural» boundary conditions are

$$\mathbb{B} u(r,s) \equiv (I + \mathbb{R}U)^{-1} (I - \mathbb{R}U) u(r,s) = \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u(r,s), \quad (r,s) \in \Gamma_-.$$

For the possibility 2 of item 4.4 the «natural» boundary conditions are the case «b»:

$$\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u(r,s) = 0, \quad (r,s) \in \Gamma_-,$$

and correspondingly the boundary conditions of case «a» are «rigid» in H_2 .

§5 DEPENDENCE OF THE CV ON THE PROBLEM PARAMETERS

For problems (1)-(3) the c.v. $\{\lambda^k\}$ are determined by the properties of G (i.e. by the cross-sections σ , σ_s and by the shape of G) and by the boundary condition \mathbb{R} :

$$\lambda^k = \lambda^k(\sigma, \sigma_{s_0}, \sigma_{s_1}, \dots, \sigma_{s_l}; G, \mathbb{R}).$$

In this and following sections we shall investigate this function. In item 5.1 of this section the dependence of the c.v. on these parameters (except shape of G and \mathbb{R}) is considered for the spatially homogeneous transport equation. In item 5.2 three types of possible consistent variations of parameters $(\sigma, \sigma_s, G, \mathbb{R})$ keeping the $\{\lambda^k\}$ fixed are mentioned for problems (1)-(3).

In the following sections for problems (1)-(3) the dependence of the c.v. $\{\lambda^k\}$ on the parameters for the case then the scattering operator s meets the demands of §4 (and correspondingly all the c.v. $\{\lambda^k\}$ are real) is studied. The main tools for these studies are the minima-maxima principles obtained in §4 (a technique widely used in mathematical physics, see [13, 14]) and the well-known theorem of the analysis [15]:

Theorem: *Let the linear self-adjoint in the Hilbert space H operator $K=K(q)$ be presented as an analytic function of the parameter q in the domain Q of the complex surface. Let $q_0 \in Q$ and let $\lambda(q_0) \equiv \lambda_0$ be the unique m -multiple c.v. of $K(q_0)$ in the interval $(\lambda_0 - \delta, \lambda_0 + \delta)$ and $\Phi_i(x) \in H$ be the elgenfunctions*

corresponding to this c.v. $i=1, 2, 3, \dots, m$. Then for sufficiently small $\varepsilon = \varepsilon(q_0, \delta)$ and $|q - q_0| < \varepsilon$ there are m real functions

$$\lambda_i(q) = \lambda_0 + \lambda_1^i(q - q_0) + \dots, \quad i=1, 2, 3, \dots, m$$

determining the c.v. of the operator $K(q_0)$ and m corresponding eigenfunctions

$$\Phi_i(x, q) = \Phi_i^{(0)}(x) + \Phi_i^{(1)}(x)(q - q_0) + \dots \in H, \quad i=1, 2, \dots, m;$$

there are no other c.v. in the interval $(\lambda_0 - \delta, \lambda_0 + \delta)$; the set of functions $\Phi_i(x, q)$ is an orthonormal system in H .

5.1 For the spatially homogeneous problem (in the infinite region) the c.v. are defined by the equations

$$\lambda_k = \lambda_\ell^m = \frac{1}{\omega_\ell} = \frac{\sigma}{\sigma_{s_\ell}}, \quad \ell=0, 1, \dots, L, m=0, \pm 1, \dots, \pm L. \quad (5.1)$$

the multiplicity of λ_ℓ^m is $2_\ell + 1$ and corresponding eigenfunctions are the spherical functions

$$Y_\ell^m(s) = P_\ell^m(\cos \theta) \cos m\varphi, \quad m=0, \dots, \ell$$

$$Y_\ell^m(s) = P_\ell^{|m|}(\cos \theta) \sin m\varphi, \quad m=-1, -2, \dots, -\ell,$$

where θ and φ are the polar and azimuthal angles at the unit sphere.

From (5.1) one can see that λ_ℓ^m are decreasing with σ_{s_ℓ} increment; the positive λ_ℓ^m are increasing and negative λ_ℓ^m are decreasing with σ increment; partial derivatives $\frac{\partial \lambda_\ell^m}{\partial \sigma}$, $\frac{\partial \lambda_\ell^m}{\partial \sigma_{s_\ell}}$ exist and have the following signs:

$$\frac{\partial |\lambda_\ell^m|}{\partial \sigma} > 0; \quad \frac{\partial \lambda_\ell^m}{\partial \sigma_{s_\ell}} < 0; \quad \frac{\partial \lambda_\ell^m}{\partial \sigma_{s_{\tilde{1}}}} = 0 \quad \text{if } \ell \neq \tilde{1}.$$

5.2 Next three types of transformations clearly do not change the c.v. $\{\lambda^k\}$ of the problem (1)-(3).

The first transformation is the parallel translation and rotation of the region G or its non-interacting parts.

The second transformation. The problem is defined in G with boundary conditions \mathbb{R} . Let G_0 be the additional subregion seen from some points of ∂G and G_0 that insures (by its own internal scattering) the same boundary conditions for these points of the ∂G as they are for the problem for G . Then the inclusion of G_0 as an additional subregion to the problem in G does not change the c.v. For example, the transformation from the problem with convex G and $\mathbb{R} \equiv 0$ to the problem including the additional subregion G_0 ($G_0 \cap G = 0$) with purely absorbing media doesn't change the c.v. if the boundary condition between G and G_0 is the streaming through the voids and $\mathbb{R} \equiv 0$ in the other part of the boundary.

The third transformation not changing the $\{\lambda^k\}$ is the similar expansion of G by ε times (i.g. G, r, s changes according to the rules $\varepsilon G = G_1, \varepsilon r = r_1, s = s_1$ cross-sections change by the laws $\sigma_1(r_1) = \sigma_1(\varepsilon r) = \frac{1}{\varepsilon} \sigma(r), \sigma_{s_1}(r_1, \chi) = \sigma_{s_1}(\varepsilon r, \chi) = \frac{1}{\varepsilon} \sigma_s(r, \chi)$,

and simultaneous alteration of the boundary condition in a following way:

$$\mathbb{R}_1(r_1, s_1, r'_1, s'_1) = \frac{1}{\varepsilon} \mathbb{R}(r, s, r', s').$$

§6 DEPENDENCE OF THE C.V. ON THE PARAMETERS. PROBLEMS WITH EVEN SCATTERING CROSS-SECTIONS

In this section we consider the problems with even cross-section of scattering $\mathbb{U}S = S$ (i.g. $\sigma_{S_{2\ell+1}} = 0$ almost everywhere in G). The operator \mathbb{R} satisfies one of two conditions: a) $\|\mathbb{R}\| < 1$, or b) $\|\mathbb{R}\| = 1$ and belongs to one of the permissible types considered in item 4.4. The following facts will be established:

- 1) monotonic dependence of c.v. $\{\lambda^k\}$ on $\sigma_{S_{2\ell}}(r)$;
- 2) analyticity (in some sense) of the dependence $\{\lambda^k\}$ on $\sigma_{S_{2\ell}}$;
- 3) strictly monotonic dependence of λ^0 on σ_{S_0} in the case of vacuum conditions with streaming through the voids;
- 4) sufficient conditions for the monotonous dependence of $\{\lambda^k\}$ on the simultaneous changes of $\sigma(r)$ and $\sigma_S(r, \chi)$ according to the linear law $\sigma(r) = \alpha_1 \sigma(r)$ and $\sigma_S(r, \chi) = \alpha_2 \sigma_S(r, \chi)$ in the region G ;
- 5) monotonic (in some sense) dependence of $\{\lambda^k\}$ on \mathbb{R} ;
- 6) estimations of the c.v. $\{\lambda^k\}$ for the problem with $\mathbb{R} = 0$ will be given in terms of the c.v. $\{\lambda^{k+}\}$ and $\{\lambda^{k-}\}$ for the auxiliary problems with a special type of boundary conditions \mathbb{R}^+ and \mathbb{R}^- (region G and the cross-sections for these three problems are the same).

6.1 Let us show that $\{\lambda^k\}$ are monotonic functions of $\sigma_{S_{2\ell}}$. The numerator of the functional (4.5) has an appearance

$$[\mathbb{S}u, u] = \int_G \sum_{\ell=0}^L \frac{4\ell+1}{2\pi} \sigma_{S_{2\ell}}(r) \sum_{m=-2\ell}^{2\ell} a_{2\ell m} u_{2\ell m}^2(r) dr,$$

where

$$u_{2\ell m} = \int_G ds u(r, s) Y_{2\ell}^m(s), \quad a_{2\ell m} = \frac{(2\ell - |m|)}{(2\ell + |m|)} \frac{2}{(1 + \delta_{0m})}, \quad a_{00} = 1$$

and for every fixed function $u(r, s)$ does not decrease with the increment of the coefficients $\sigma_{S_{2\ell}}$, $\ell = 0, 1, \dots, L$. The denominator of the functional does not depend on these variables. Consequently all the maxima and minima of the functional at every constant set of functions does not decrease with the increase of $\sigma_{S_{2\ell}}$, $\ell = 0, 1, \dots, L$. So, values $\frac{1}{\lambda_{\pm}^k}$ do not decrease, and λ_{\pm}^k do not increase with the increase of $\sigma_{S_{2\ell}}$, $\ell = 0, 1, \dots, L$. This result is in an agreement with (5.1) and with the results obtained in [1] for the problem with vacuum boundary conditions and streaming through the cavities.

6.2 Let

$$\sigma_s^\alpha(\mathbf{r}, \chi) = \sigma_s(\mathbf{r}, \chi) + \alpha \eta(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r}) P_{2\ell}(\chi)$$

where $\eta(\mathbf{r}) \in L_\infty(G)$, $\eta(\mathbf{r}) > 0$, α is a numeral parameter. In this item we shall consider the question about the differentiability of the c.v. $\{\lambda^k\}$ in the parameter α .

The scattering operator has the form

$$S_\alpha = S + \alpha \eta(\mathbf{r}) P_{2\ell}(\chi) \quad (6.1)$$

where S_α and $P_{2\ell}$ are the operators of type (2) with kernels $\frac{\sigma_s^\alpha(\mathbf{r}, \chi)}{\sigma}$ and $P_{2\ell}(\chi)$.

Then $M_R^{-1} S_R$ is a self-adjoint compact operator in the Hilbert space H_2 with the inner product $[M_R u, v]$ and this operator has the form of a linear function of parameter α .

So according to the Theorem of §5 all the c.v. $\{\lambda^k\}$ and eigenfunctions $u_k(\mathbf{r}, s)$ of the problem (4.3) are the analytic functions of α .

6.3 Suppose $G = \bigcup_{j=0}^J G_j$, $J < \infty$ and in each subregion G_j the cross-sections of scattering are constant $\sigma_{S_{2\ell}}(\mathbf{r}) = \sigma_{S_{2\ell}}$. In $\eta(\mathbf{r})$ is the characteristic function of the subregion G_j ($\eta(\mathbf{r}) = 1$ for $\mathbf{r} \in G_j$ and $\eta(\mathbf{r}) = 0$ for $\mathbf{r} \notin G_j$), then from the previous item

there follows the existence and boundedness of all the derivatives $\frac{d^n(\lambda^k)}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)^n}$ and

$$\frac{d^n(u^k)}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)^n} \text{ in } H_2.$$

One can differentiate equations (4.1)-(4.2) in $\sigma_{S_{2\ell}}^j$ to obtain the expressions

for $\frac{d(\lambda^k)}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)}$ and $\frac{d(u^k)}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)}$:

$$M \frac{du^k}{d\sigma_{S_{2\ell}}^j} = \lambda S \frac{du^k}{d\sigma_{S_{2\ell}}^j} + \frac{d\lambda^k}{d\sigma_{S_{2\ell}}^j} S u^k + \lambda \eta(\mathbf{r}) u^k \quad (6.2)$$

$$(I - RU) \frac{d^k u}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)^k} = (I + RU)(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) \frac{d^k u}{d(\sigma_{S_{2\ell}}^j)^k}.$$

Here u^k is the eigenfunction corresponding to the c.v. λ^k . By multiplying the equation (6.2) by u^k in H_2 space with respect of self-adjointness of operators M_R and s and by using the relations

$$\frac{1}{\lambda^k} [S u^k, u^k] = \frac{1}{(\lambda^k)^2} [M_R u^k, u^k] > 0$$

$$[\eta_j P_{2\ell} u^k, u^k] = \int_{G_j} \sigma(\mathbf{r}) \frac{4\ell + 1}{4\pi} \sum_{m=-2\ell}^{2\ell} a_{2\ell m} (u_{2\ell m}^k(\mathbf{r}))^2 d\mathbf{r}$$

one can get the relations

$$\frac{d\lambda^k}{d\sigma_{S_{2\ell}}^j} = -\frac{(\lambda^k)^2 [\eta_j P_{2\ell} u^k, u^k]}{[M_R u^k, u^k]} = \tag{6.3}$$

$$= -(\lambda^k)^2 \left[\frac{4\ell+1}{4\pi} \int_{G_j} \sigma(r) \sum_{m=-2\ell}^{2\ell} a_{2\ell m} (u_{2\ell m}^k(r))^2 dr \right] / [M_R u, u] \leq 0.$$

These inequalities correspond to the results of item 6.1.

In some cases these inequalities can be sharpened. If some eigenfunction $u^k(r,s)$ is not orthogonal at least to one of the spherical functions $Y_{2\ell}^m(s)$, $m = -2\ell, \dots, 2\ell$ on a set of positive measure in G then for the c.v. λ^k corresponding to this eigenfunction one has $\frac{d\lambda^k}{d\sigma_{S_{2\ell}}^j} < 0$.

In [1] it is shown that for the problems with $\sigma_s(r, \chi) \geq 0$ almost everywhere in $G \times [-1,1]$ and vacuum boundary conditions with streaming through the cavities eigenfunction $\varphi^0(r,s)$ (and consequently also $U\varphi^0(r,s)$ and $u^0(r,s)$) is positive just everywhere in $G \times \Omega$. Correspondingly, for these problems (6.3) leads to $\frac{d\lambda^0}{d\sigma_{S_0}^j} < 0$.

6.4 Let us consider the variations of $\{\lambda^k\}$ caused by the simultaneous changes of σ and σ_s throughout G according to the laws

$$\sigma^{(1)}(r) = \alpha_1 \sigma(r), \quad \sigma_s^{(2)}(r, \chi) = \alpha_2 \sigma_s(r, \chi),$$

where α_1, α_2 are numbers $\alpha_1, \alpha_2 > 0$.

Using the notations

$$[u, v]_{\alpha_1} = \int_{G \times \Omega} \sigma^{(1)} uv dr ds = \alpha_1 \int \sigma uv dr ds = \alpha_1 [u, v]$$

$$S_{\alpha_1 \alpha_2} u = \frac{1}{\sigma^{(1)}} \int \sigma_s^{(2)}(r, \chi) u(r, s') ds' = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} S u$$

the variational functional (4.5) can be written in the form

$$\Phi_R^{\alpha_1 \alpha_2} [u] = \frac{[S_{\alpha_1 \alpha_2} u, u]_{\alpha_1}}{[u, u]_{\alpha_1} + \left[(s, \frac{1}{\sigma^{(1)}} \nabla) u, (s, \frac{1}{\sigma^{(1)}} \nabla) u \right]_{\alpha_1} + 2 \int_{\Gamma_-} u (I + R U)^{-1} (I - R U) u d\Gamma_-}$$

$$= \frac{[S u, u]}{\frac{\alpha_1}{\alpha_2} [u, u] + \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2} \left[(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u, (s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u \right] + \frac{2}{\alpha_2} \int_{\Gamma_-} u (I + R U)^{-1} (I - R U) u d\Gamma_-}$$

One can find at what values of α_1, α_2 inequality $|\Phi[u]| \leq |\Phi^{\alpha_1 \alpha_2} [u]|$ is valid for every u and at what values $|\Phi[u]| \geq |\Phi^{\alpha_1 \alpha_2} [u]|$ for every u . Correspondingly the regions of α_1, α_2 changes leading to the a) not decreasing in $|\lambda_{\pm}^k|$ and b) not increasing in $|\lambda_{\pm}^k|$ will be found. Due to nonnegativity of each of the terms in the

denominator, a sufficient condition for not decreasing of $|\lambda_{\pm}^k|$ is the simultaneous fulfillment of the inequalities $\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \geq 1, \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2} \geq 1, \frac{1}{\alpha_2} \geq 1$. Similarly, a sufficient condition for not increasing of $|\lambda_{\pm}^k|$ is that $\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \leq 1, \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2} \leq 1, \frac{1}{\alpha_2} \leq 1$. There are shown graphically in the Fig. 1.

If $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ then

$$\Phi_{\mathbb{R}}^{\alpha} [u] = \frac{[su, u]}{[u, u] + \frac{1}{\alpha\alpha} \left[(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u, (s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u \right] + \frac{2}{\alpha} \int_{\Gamma} u(I + \mathbb{R}U)^{-1} (I - \mathbb{R}U) u d\Gamma}$$

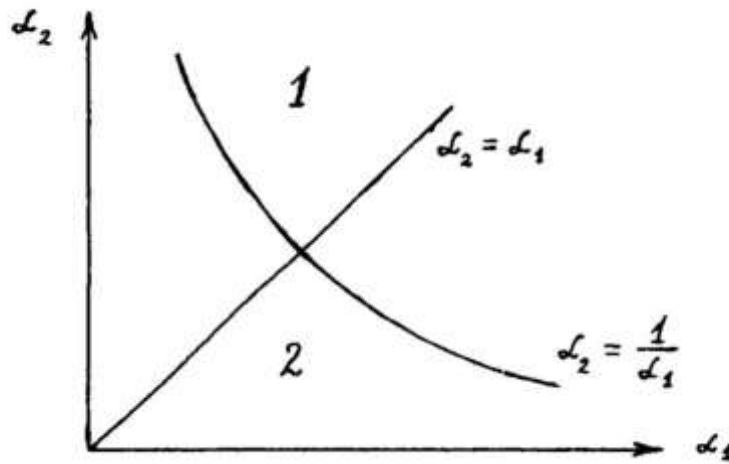


Fig.1. Domain 1 (including the boundary lines) is a domain of α_1 and α_2 changes leading to not increasing the $|\lambda_{\pm}^k|$. Domain 2 (including the boundary lines) is a domain of α_1 and α_2 changes leading to not decreasing the $|\lambda_{\pm}^k|$.

and correspondingly $\alpha > 1$ lead to not increasing $|\lambda_{\pm}^k|$ and $\alpha < 1$ to not decreasing $|\lambda_{\pm}^k|$

6.5 In §4 it is shown that $[Mu, u] \geq 0$ for every even $u, u \in H_2$ if $\|\mathbb{R}\| \leq 1$. This means that no changes in \mathbb{R} preserving $\|\mathbb{R}\| \leq 1$ and no changes in s preserving $[su, u] \geq 0$ can lead to appearance of the negative c.v. in the problem.

6.6 Let us consider the dependence of the c.v. of the problem on the operator \mathbb{R} in the range $\|\mathbb{R}\| \leq 1$. The variation in (5.5) is carried out over all even functions $u \in H_2$. The numerator of (5.5) does not depend on \mathbb{R} . The denominator equals $[Mu, u]$ and depends on \mathbb{R} . Using the relation

$$(I + \mathbb{R}U)^{-1} (I - \mathbb{R}U) = -I + 2(I + \mathbb{R}U)^{-1}$$

one can get

$$\begin{aligned} [\mathbb{M}u, u] &= [u, u] + \left[\left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u, \left(s, \frac{1}{\sigma} \nabla \right) u \right] - 2 \int_{\Gamma_-} u^2(r, s) d\Gamma_- + \\ &+ 4 \int_{\Gamma_-} u(r, s) (I + \mathbb{R}U)^{-1} u(r, s) d\Gamma_- . \end{aligned}$$

Considering two problems with operators \mathbb{R}_1 and \mathbb{R}_2 one can say that $|\Phi_{\mathbb{R}_1}[u]| \geq |\Phi_{\mathbb{R}_2}[u]|$ for every $u \in H_2$ (and correspondingly $|\lambda_1^k| \leq |\lambda_2^k|$) if for every u

$$\left[\mathbb{M}_{\mathbb{R}_1} u, u \right] - \left[\mathbb{M}_{\mathbb{R}_2} u, u \right] = 4 \int_{\Gamma_-} u \left[(I + \mathbb{R}_1 U)^{-1} - (I + \mathbb{R}_2 U)^{-1} \right] u d\Gamma_- \geq 0$$

One can consider several types of \mathbb{R}_1 and \mathbb{R}_2 operators ensuring the fulfillment of this condition.

1-st type of operator \mathbb{R} :

$$\int_{\Gamma_-} \int_{\Gamma_-} (\mathbb{R}U)^2 d\Gamma d\Gamma' \leq C < \infty$$

i.e. self-adjoint operators $\mathbb{R}U [\Gamma_- \Rightarrow \Gamma_-]$ are compact. Let $\mu_k^{(1)}, \mu_k^{(2)}, v_k^{(1)}, v_k^{(2)}$ denote the eigenvalues and eigenfunctions of operators $\mathbb{R}_1 U$ and $\mathbb{R}_2 U$ respectively. If $v_k^{(1)} = v_k^{(2)}$ then the condition of positivity of (6.4) is $\mu_k^{(1)} \geq \mu_k^{(2)}$.

The consequence of this is the following proposition. If operator $\mathbb{R}U$ can be presented as a finite or infinite series.

$$\mathbb{R}U = \sum_{k=1}^K \mu_k v_k(r, s) v_k(r, s),$$

where μ_k are numbers, $|\mu_k| < 1$, $v_k(r, s) \in L_2(\Gamma_-)$,

$$\int_{\Gamma_-} v_k v_p d\Gamma_- = 0, \quad k \neq p$$

$$\int_{\Gamma_-} v_k^2 d\Gamma_- = 1, \quad k = 1, 2, \dots, K.$$

then increase of every μ_k in the range $|\mu_k| < 1$ does not lead to decrease of the c.v. moduli $|\lambda^k|$ of the problem.

Remark: On the compactness of the operators \mathbb{R} formed by the multiple scattering of surrounding bodies see [7, 8].

2-nd type of operator \mathbb{R} : $\mathbb{R}(r, s, r', s') = \delta(r - r') P(s, s')$

i.e. $\varphi(r, s)_{(r, s) \in \Gamma_-} = \int_{(s', n) > 0} P(s, s') \varphi(r, s') ds'$.

$$\text{If } \int_{(s, n) < 0} \int_{(s', n) < 0} P^2(s, -s') ds' ds \leq C < \infty,$$

then operator with the kernel $P(s, -s')$ is compact and can be treated analogously to the operator $\mathbb{R}U$ of the 1-st type. So if

$$\mathbb{R}(r, s, r', s') = \delta(r - r') \sum_{k=1}^K \mu_k v_k(s) v_k(s'),$$

$$|\mu_k| < 1, \quad v_k \in L_2(2\pi),$$

$$\int_{2\pi} v_k(s) v_p(s) |(s, n)| ds = 0, \quad p \neq k,$$

$$\int_{2\pi} v_k^2 |(s, n)| ds = 1, \quad k = 1, 2, \dots, K.$$

then increase of every μ_k in the range $|\mu_k| < 1$ does not lead to decrease of $\{|\lambda^k|\}$. An example is the multiplication if the isotropic (Lambertian) reflection by the positive function $\rho(r) \in L_\infty$, $\rho(r) \geq 1$.

3-rd type of operator \mathbb{R} : $\mathbb{R}(r, s, r', s') = \rho(r, s) \delta(r - r') \delta(s + s')$

(i.e. $\varphi(r, s)_{(r, s) \in \Gamma_-} = \rho(r, s) \varphi(r, -s)$)

In this case

$$(\mathbb{I} + \mathbb{R}\mathbb{U})^{-1} = \frac{1}{1 + \rho(r, s)} \delta(r - r') \delta(s + s')$$

and the condition of positiveness of (6.4) is

$$\rho_1(r, s) \geq \rho_2(r, s) \text{ at the } \Gamma_-.$$

4-th type of operator \mathbb{R} : The whole boundary number Γ of the region G can be divided into some number of domains Γ_i : $\Gamma = \bigcup \Gamma_i$, $0 = \Gamma_i \cap \Gamma_j$, $i \neq j$ so that the operator \mathbb{R} is $\mathbb{R}(\Gamma_i \Rightarrow \Gamma_j) \equiv 0$, $i \neq j$ and in each of Γ_i $\mathbb{R}(\Gamma_i \Rightarrow \Gamma_i)$ satisfies one of the above types of conditions. In this case fulfillment of corresponding conditions on the \mathbb{R} changes in each of domains Γ_i ensures the positivity of (6.4).

6.7 Let us consider the dependence of c.v. for the problems with the operator \mathbb{R} of a special type $\mathbb{R}(r, s, r', s') = \kappa \delta(r - r') \delta(s + s')$ where κ is a number, $\kappa \in [-1, 1]$. Four problems $-1 = \kappa_1 < \kappa_2 \leq \kappa_3 < \kappa_4 = 1$ will be considered and their c.v. $\{\lambda_{\kappa_1}^k\}$, $\{\lambda_{\kappa_2}^k\}$, $\{\lambda_{\kappa_3}^k\}$, $\{\lambda_{\kappa_4}^k\}$ will be compared.

According to the previous item of the section $|\lambda_{\kappa_3}^{\pm k}| \leq |\lambda_{\kappa_2}^{\pm k}|$.

It is shown in §4 that for the problem with $\kappa_4 = 1$ and for the problem with κ_3 ($|\kappa_3| < 1$) the search for functional extremums is carried out over the same set of functions (even functions of angle from the space H_2). But for these problems the denominator of the functional has the following form

$$[\mathbb{M}_{\kappa_3} u, u] = [u, u] + \left[(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u, (s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u \right] + 2 \frac{(1 - \kappa_3)}{(1 + \kappa_3)} \int_{\Gamma_-} u^2 d\Gamma$$

$$[\mathbb{M}_{\kappa_4} u, u] = [u, u] + \left[(s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u, (s, \frac{1}{\sigma} \nabla) u \right].$$

So for every function u from this set $|\Phi_{\mathbb{R}_3}[u]| \leq |\Phi_{\mathbb{R}_4}[u]|$ and correspondingly $|\lambda_{\kappa_4}^{\pm k}| \leq |\lambda_{\kappa_3}^{\pm k}|$.

For the problem with $\kappa_1 = -1$ the extrema of the functional $\Phi_{\mathbb{R}_1}[u]$ are sought over the set of functions $u \in H_2$ (even in the angle) satisfying the boundary condition $u(r, s)_{(r, s) \in \Gamma_-} = 0$. We shall denote this set as «B». For the problem with

$\kappa_2 (|\kappa_2| < 1)$ the extrema are sought over the set of functions $u \in H_2$ (even in the angle). This set of functions we shall denote as «C». Since for every function from the set «B» $\Phi_{R_1}[u] = \Phi_{R_2}[u]$ and since «B» \subset «C» so $|\lambda_{\kappa_2}| \leq |\lambda_{\kappa_1}|$.

So the proven result is: for the problems with the numbers $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4$ in the boundary conditions the c.v. are related in the following way

$$|\lambda_{\kappa_4}^{\pm k}| \leq |\lambda_{\kappa_3}^{\pm k}| \leq |\lambda_{\kappa_2}^{\pm k}| \leq |\lambda_{\kappa_1}^{\pm k}|.$$

The obtained inequality permits estimating all the c.v. $\{\lambda^k\}$ of the problem with the boundary conditions

$$\varphi(r, s)_{(r,s) \in \Gamma_-} = \kappa \varphi(r, -s), \quad \kappa \in (-1, 1)$$

and specifically with $\kappa = 0$ (i.e. problems with $\mathbb{R} \equiv 0$) by the c.v. $\{\lambda_+^k\}$ and $\{\lambda_-^k\}$ of the «extreme» problems with

$$\varphi(r, s)_{(r,s) \in \Gamma_-} = \varphi(r, -s)$$

and

$$\varphi(r, s)_{(r,s) \in \Gamma_-} = -\varphi(r, -s)$$

This result is interesting because in some cases the spectrum of the problem with such special boundary conditions is more easy to investigate (for example by the separation of variables method).

Such a majorization is analogous to the majorization of the c.v. of the boundary value problem for the diffusion equation by the c.v. of the Neumann and Dirichlet boundary value problems.

In [10, 11] result of item 6.7 was obtained by another technique and without sufficient proof.

§7 DEPENDENCE OF THE C.V. ON THE PARAMETERS UNDER THE CONDITION $\mathbb{U}S \geq 0$

In this section we shall consider the problem with scattering operator s satisfying the condition $\mathbb{U}S \geq 0$ (i.e. $\sigma_{S_{2\ell}} \geq 0$, $\sigma_{S_{2\ell+1}} \leq 0$ almost everywhere in G). The c.v. analyticity (in some sense) in σ and \mathbb{R} is considered.

7.1 Let $\mathbb{R} \equiv 0$ and $\sigma(r)$ be changed by the law

$$\sigma_\alpha(r) = \sigma(r)[1 + \alpha\eta(r)],$$

where $\eta(r) \in L_\infty(G)$, $\eta \geq 0$, α is a number. Let us show that $\{\lambda^k\}$ are analytic function of the parameter α . Operators S_α and $L_{0\alpha}^{-1}$ are defined by the relations (2), (2.2) with $\sigma(r)$ changed by $\sigma_\alpha(r)$. Let us consider the problem

$$\varphi = \lambda L_{0\alpha}^{-1} S_\alpha \varphi.$$

Decomposing the exponent in (2.2) into a series one can represent the operator $L_{0\alpha}^{-1} S_\alpha$ in the form

$$L_{0\alpha}^{-1}S_\alpha = L_0^{-1}S + \sum \frac{(-\alpha)^n}{n!} V_n S \tag{7.1}$$

where V_n do not depend on α and are defined by the relation

$$V_n F(r, s) = \int_0^{|r-r|} e^{-\tau(r, r_\xi)} [\tau_\eta(r, r_\xi)]^n \sigma(r_\xi) F(r_\xi, s) d\xi$$

$$r_\xi = r - \xi s, \tau_\eta(r, r_\xi) = \int_0^{|r-r_\xi|} \eta(r_{\xi'}) \sigma(r_{\xi'}) d\xi', r_{\xi'} = r - \xi' s.$$

By changing the order of integration one can show that $[V_n F, G] = [F, U V_n U G]$. That is $[U S V_n S F, \Phi] = [F, U S V_n S \Phi]$. So all the operators $V_n S$ (as well as operator $L_0^{-1} S$) are symmetrized by the positive operator $U S$.

All the operators $\|V_n S\|$ are bounded:

$$\|V_n S\| \leq \|\eta \sigma\|_{L_\infty}^n D^n \|L_0^{-1} S\|,$$

where $D = \text{diam } G$.

So the changing of $\sigma(r)$ according to the law leads to symmetrized analytic perturbation of the symmetrized operator $L_R^{-1} S$ in H_2 and correspondingly all the λ^k, φ^k are the analytic functions of parameter α .

Remarks: 1. Due to the fact $M_0^{-1} = \frac{1}{2}(L_0^{-1} + U L_0^{-1} U)$ one has the proof of analyticity of λ^k in α for the problems with $U S = S$.

2. The obtained results can be carried over (with some restrictions) to the problems with $R \neq 0$.

7.2 Let $R = R_0 + \alpha R_1 (R_0^* = U R_0 U, R_1^* = U R_1 U, \|R\| < 1)$. The analyticity of c.v. in parameter α for the problem

$$\varphi = \lambda L_R^{-1} S \varphi$$

can be established similarly, by expanding L_R^{-1} into power series of α and analyzing its terms.

§8 DEPENDENCE OF THE C.V. ON THE PARAMETERS OF THE PROBLEM UNDER CONDITIONS $U S = S \geq 0, R = 0$

Problems with $R \equiv 0$ and the scattering operator s satisfying the conditions $U S = S \geq 0$ are considered in this section.

8.1 In this item we consider the dependence of λ^k on the densities ρ_j^i of the elements filling the subregions G_j . Let $\sigma^\alpha(r) = \sigma(r) + \alpha \eta_j(r) \sigma^i(r), \sigma_s^\nu(r, \chi) = \sigma_s(r, \chi) + \nu \eta_j(r) \sigma^i(r, \chi)$

where α, ν are numbers, $\eta_j(r)$ is a characteristic function of subregion G_j . According to item 6.2 functions $f^k(\alpha, \nu) = \lambda^k(\sigma^\alpha, \sigma_s^\nu)$ are analytic functions of the

parameter ν at every α . According to item 7.1 they are also the analytic functions of parameter α at every ν . Correspondingly $f^k(\alpha, \nu)$ are continuous functions in all points α, ν . Assuming $\alpha = \nu = \rho_j^i$ one obtains the consequence that functions $\lambda^k(\sigma^{\rho_j^i}, \sigma_s^{\rho_j^i})$ are continuous in ρ_j^i .

8.2 In this item the c.v. behavior during the transformation of the convex region G into the convex region G' will be considered. The value of deformation $G \Rightarrow G'$ is characterized by the values of parameters $\Delta_M(G, G')$ and $\Delta_m(G, G')$.

$$\Delta_M(G, G') = \max_{r \in \partial G} \min_{r' \in \partial G'} \rho(r, r')$$

$$\Delta_m(G, G') = \min_{r \in \partial G} \max_{r' \in \partial G'} \rho(r, r')$$

where $\rho(r, r')$ is the distance between the points r, r' . The parameter $\Delta_M(G, G')$ defines the thickness of the surrounding ∂G layer inside which all points of $\partial G'$ are situated. The parameter $\Delta_m(G, G')$ defines the thickness of the surrounding ∂G layer inside which there are no points of $\partial G'$.

Let G be transformed into $G'(G \Rightarrow G')$, and let σ and σ_s be constant throughout G and fixed during the deformation. One can show that dependence of the λ^k (induced by the deformation $G \Rightarrow G'$) on the parameter of deformation $\Delta_M(G, G')$ is continuous in the sense $|\lambda^k(G) - \lambda^k(G')| \Rightarrow 0$ if $\Delta_M(G, G') \Rightarrow 0$.

Let us take point r_0 strictly inside G , then

$$C_0 = \inf_{r' \in \partial G} [n(r'), (r' - r_0)] > 0,$$

where $n(r')$ is the normal to ∂G in the point r' , and $[.,.]$ is the inner product of two vectors.

The proportional expansion $G \Rightarrow G_1 = \varepsilon G$, ($\varepsilon > 1$) and compression $G \Rightarrow G_2 = \frac{1}{\varepsilon} G$, ($\varepsilon > 1$) relatively the point r_0 is concerned (point r_0 is fixed). It is obvious that $G_2 \subset G \subset G_1$, $\partial G \cap \partial G_1 = \emptyset$, $\partial G \cap \partial G_2 = \emptyset$, $\partial G_2 \cap \partial G_1 = \emptyset$, $\Delta_M(G, G_1) > 0$, $\Delta_M(G, G_2) > 0$, $\Delta_M(G, G_1) \Rightarrow 0$ and $\Delta_M(G, G_2) \Rightarrow 0$ if $\varepsilon \Rightarrow 1$.

Problems with the regions G and G_1 and G_2 are analogous to the problems with the fixed region G and changing cross-sections $\sigma^1 = \varepsilon \sigma$, $\sigma_s^1 = \varepsilon \sigma_s$ and $\sigma^2 = \frac{1}{\varepsilon} \sigma$,

$\sigma_s^2 = \frac{1}{\varepsilon} \sigma_s$. Correspondingly to item 6.4, 8.1

$$\lambda_{G_2}^k \leq \lambda_G^k \leq \lambda_{G_1}^k, \left| \lambda_{G_1}^k - \lambda_{G_2}^k \right| \Rightarrow 0, \quad \text{if } \varepsilon \Rightarrow 0. \quad (8.1)$$

Let us introduce value $\Delta_0(\varepsilon)$:

$$0 \leq \Delta_0(\varepsilon) \equiv \frac{C_0}{2} \left[\inf_{r' \in \Gamma} (r_0 - r') \right] \left[\min\left(\left(\varepsilon - 1\right), \left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right)\right) \right] \leq \\ \leq \min[\Delta_m(G, G_1), \Delta_m(G, G_2)].$$

It is clear that $\Delta_0(\varepsilon) \Rightarrow 0$ if $\varepsilon \Rightarrow 1$.

Let G' be the arbitrary region such that $\Delta_M(G, G') \leq \Delta_0(\varepsilon)$, i.e. $G_2 \subset G' \subset G_1$. Correspondingly, to items 5.2 and 6.1 one has: $\lambda_{G_2}^k \leq \lambda_{G'}^k \leq \lambda_{G_1}^k$. From (8.1) one has that $|\lambda_{G'}^k - \lambda_G^k| \leq |\lambda_{G_1}^k - \lambda_{G_2}^k| \Rightarrow 0$ if $\varepsilon \Rightarrow 1$.

The continuity is proven.

The proof can be extended to the regions with «star-like» shape.

§9 CONCLUDING REMARKS

In this work the boundary value problem for the transport equation with general law of reflection from the boundary ($R \leq 0$) was considered. Analysis of the continuous problem permitted to formulate minima-maxima variational principle for the c.v. of the problem. The dependence of the c.v. on the problem parameters was studied on the basis of these principles and on the basis of the theory of analytical perturbations. The obtained results should be considered as the tool to investigate the spectra of considerably complicated problems on the basis of the results about spectra of more easy problems. In our next work some results obtained in this direction will be presented.

PEFERENCES

1.V.S. Vladimirov «Mathematical problems of the monoenergetic transport theory». Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. The USSR Ac. of Sci., LXI, Moscow, 1961, (in Russian).

2.T.A. Germogenova «The generalized solutions of the boundary value problem for the transport equation». Zurnal Vichislitelnoi Matematiki I Matematicheskoi Fiziki, v.9, № 3, 605-625, 1969, (in Russian).

3.T.A. Germogenova «Boundary value problems for the transport equation». Thesis of the doctoral dissertation. Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 1971, (in Russian).

4.S.B. Shikhov «Problems of the mathematical theory of reactors. Linear analysis», Moscow, 1973, (in Russian).

5.S.B. Shikhov, Yu.I. Ershov «Mathematical basis of the transport theory», Vol. 1,2, Moscow, «Energoatomizdat», 1985, (in Russian).

6.T.A. Germogenova «The local properties of the transport equation solutions», Moscow, «Nauka», 1986, (in Russian).

7.V.I. Agoshkov «Generalized solutions of the transport equation and the properties of their smoothness», Moscow, «Nauka», 1988, (in Russian).

8.V.I. Agoshkov «On the one problem of the transport theory and the properties of the reflection operators», (Submitted to publication to journal Differential equations, Minsk, Belorussia), (in Russian).

9.A.A. Lobarev Report of Institute of Numerical Mathematics. Moscow, 1985, (in Russian).

10.M. Otelbaev «On the asymptotics of the transport equation spectrum in the slab», Dokladi Akademii Nauk, 1985, v. 284, №1, pp. 51-53, (in Russian).

11.D.N. Turmukhambetov «On the asymptotics of the spectrum for the transport equation with energy in a slab», in «Differential equations, theory of function and their application», Alma-Ata, 1986, (in Russian).

12.V.Yu. Plyashkevich «On the spherical harmonics method for the transport equation», Dokladi Akademii Nauk, 1983, (in Russian).

13.R. Courant, D. Hilbert «Methods of the mathematical physics», vol. 1, Moscow-Leningrad, 1951, (translation from German).

14.M. Reed, B. Simon «Methods of the modern mathematical physics», vol. 4, Moscow, «Mir», (translation from English).

15.F. Riesz, S. Sz.-Nagy «Lectures on the functional analysis», Moscow, «Mir», 1979, (translation from French).

Received: November 1, 1991

Revised: August 3, 1992

Accepted: September 10, 1992

К РАЗВИТИЮ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Т.А.Гермогенова
Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН
125047, Москва, Миусская пл., д. 4.

VI РОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ЗАЩИТЕ ОТ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ ЯДЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

В докладе обсуждаются современное состояние программных средств, обеспечивающих численное решение уравнения переноса излучения в задачах радиационной защиты, и основные направления развития вычислительных методов и алгоритмов. В основу полагается обзор ряда работ, представленных на международных конференциях и в журнальных публикациях последних лет.

1. К настоящему времени в большинстве стран, где ядерная энергетика имеет существенное значение, сформированы крупные программные системы, обеспечивающие основные потребности проблем радиационной защиты в физических исследованиях, проектировании, контроле, ремонтных работах, транспортных задачах, вопросах хранения отходов.

В США – это, в первую очередь, система одно-, двух- и трех-мерных кодов серии ANISN-DORT-TORT (Oak Ridge Laboratory), в которых реализованы итерационные алгоритмы для ряда балансных схем Метода Дискретных Ординат (МДО). Программы этого комплекса, будучи дополнены в расчетах сложных композиций программами, реализующими различные варианты методов Монте-Карло, используются сейчас как стандартные рабочие инструменты в расчетах радиационных полей не только в США, но также и во многих других странах. В Японии аналогичным является комплекс BERMUDA(JAERI), в основу которого положен безитерационный метод прямого интегрирования мультигрупповых уравнений, в которых матрицы энерго-угловых переходов определяются численным интегрированием соответствующих дифференциальных сечений. В Европейских странах в большей мере ориентируются на комплексы серий MCBEND (Англия), TRIPOLI (Франция). В них реализованы алгоритмы метода Монте-Карло с привлечением простых моделей типа «Выведение-Диффузия» для функции ценности. Наряду с подобными хорошо отработанными комплексами, допускающими использование в широком круге задач, в ряде научных центров создаются специализированные коды, ориентированные на частные задачи.

В нашей стране используются как зарубежные, так и отечественные программы, опирающиеся на методы дискретных ординат (МДО), «Выведения-Диффузии», методы Монте-Карло.

2. С целью иллюстрации возможностей современного программного обеспечения приведем некоторые результаты характерных исследований.

Одной из наиболее важных сейчас является проблема охрупчивания корпусов ВВЭР, вызываемого длительным воздействием потоков быстрых нейтронов ($E > 0.1 \text{ MeV}$) из Активной Зоны. Численному моделированию этих потоков посвящены многие работы. Основным является расчет в $R-\theta$ - геометрии конструкций типа приведенной на рис. 1, отвечающей Davis-Besse реактору атомной станции Three Mile Island (2772 МВт) [1].

Группой проф. Nighthat (Penn State University, USA) выполнена большая серия расчетов по программе DORT с использованием 47 групповой библиотеки SAILOR. Основные расчеты проводились в $P_3 S_8$ приближении на сетке 127×83 по взвешенной алмазной семе (θWDD). Сравнения с Монте-Карловскими расчетами и результатами специально осуществленных экспериментов позволяют утверждать, что погрешности определения интегральных (по углам) потоков лежат в 10% интервале. Они сильно зависят от параметров используемых разностных схем, в частности, от алгоритмов сглаживания нефизических расчетных осцилляций (см. рис. 2) [2].

Группой Японских исследователей [3] были выполнены расчетные исследования поведения быстрых нейтронов в конструкции с большой полостью, имитирующей в $\{R-Z\}$ геометрии защитный блок инжектора нейтральных частиц в термоядерном реакторе (эксперимент описан в [4], см. рис.3). Использовались коды MCNP-3 DOT-3.5 BERMUDA 2DN-S16 с библиотеками ENDF/B-IV, JENDL-2, JNDL-3PR1. Здесь точное описание дифференциального сечения рассеяния, принятое в коде BERMUDA оказывается чрезвычайно важным (см. Рис 4.5).

В ряде докладов настоящей конференции представлены результаты отечественных расчетных исследований для конструкций сравнимой степени сложности.

3. Отличительной чертой сложившейся сейчас технологии численных исследований является многовариантность расчетов. Основную часть составляют расчеты, направленные на определение оптимальных параметров алгоритмов и обоснование оценок точности результатов. Оценка константной составляющей погрешности требует привлечения развитого аппарата расчета функций чувствительности. Обязательными являются процедуры верификации и валидации константных библиотек и программ на базе существующих или специально выполненных экспериментальных и численных бенчмарков, сравнения результатов, полученных численными методами для различных геометрических моделей с результатами статистического моделирования радиационных процессов в отдельных фрагментах конструкции. Такие работы выполняются, как правило коллективами высококвалифицированных исследователей, владеющих богатым набором кодов и константных библиотек, и требуют использования мощных вычислительных средств.

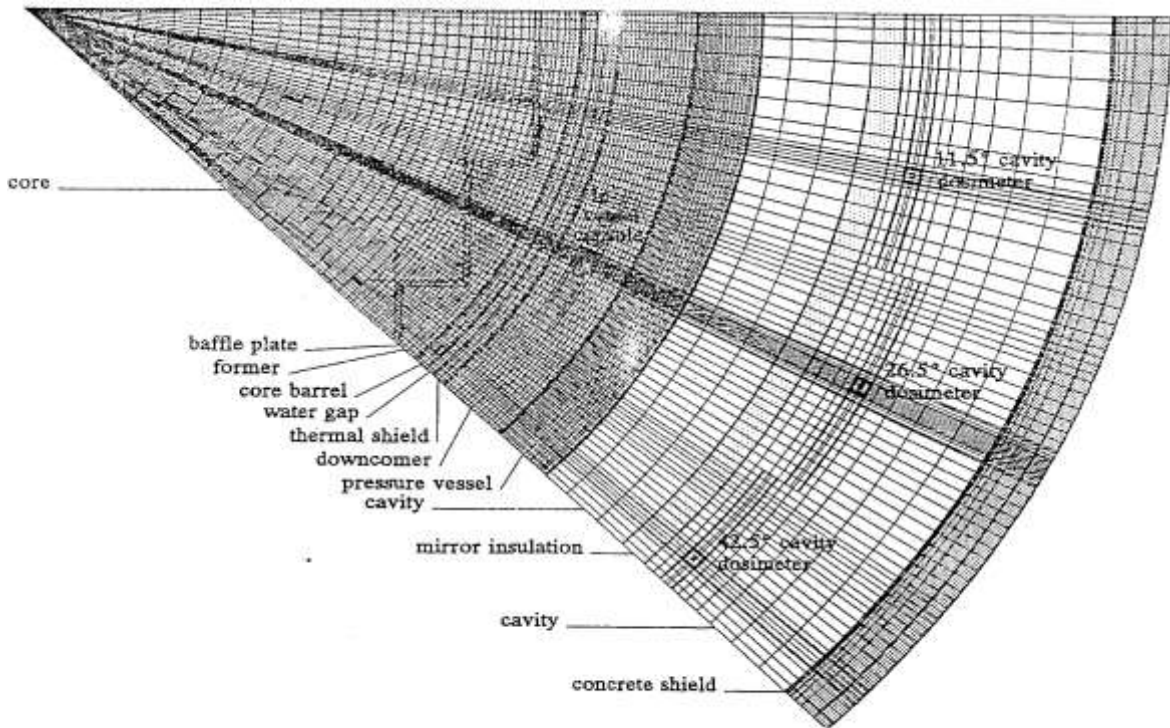


Рис.1. (R- θ) модель реактора Davis-Besse [1].

С другой стороны возрастание требований к точности и детальности расчетной информации, надежности оптимизационных результатов в традиционных задачах радиационной защиты и постоянный рост потребностей в численном моделировании радиационных полей в объектах микроэлектроники, в плазменных установках, ускорителях в геологоразведочных и медицинских приложениях приводят к необходимости рассмотрения новых задач с сильной анизотропией и нелинейностью для заряженного излучения, с сильной временной зависимостью, обратных задач радиационной диагностики. Продвижения в этих задачах на используемых компьютерах с существующими сейчас кодами требует неприемлемо больших затрат расчетного времени.

Большие надежды сейчас связываются с появлением и мощным развитием компьютеров с параллельной архитектурой, объединяющей от десятков до тысяч вычислительных элементов (транспьютеров) с высокой двух производительностью и со значительной общей памятью (десятки Gflops и десятки Mbytes соответственно в наиболее мощном сейчас компьютере KSR1 Oak Ridge) см. рис. 6.

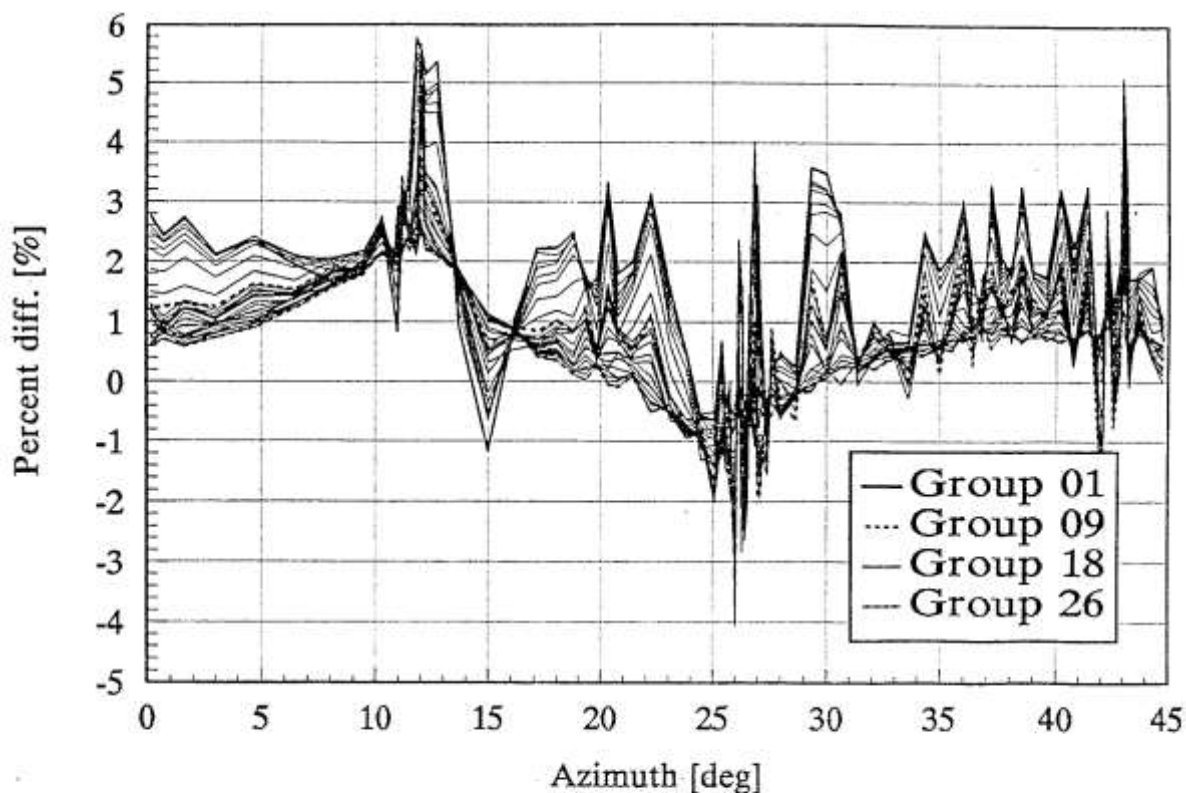


Рис.2. Относительные отклонения азимутальных распределений потоков нейтронов при $E > 0,1$ Мэв, рассчитанных по θ WDD - схеме при $\theta=0.9$, от результатов при $\theta=0$ (~ шаговая схема) [1]

Параллельная архитектура компьютеров нового поколения, отвечая параллелизму метода Монте-Карло, способствует в первую очередь усиленному развитию этого направления. Структура численных (детерминистских) методов, как правило сложнее, их параллелизация требует больших усилий. Однако первые оценки эффективности распараллеливания алгоритмов этих двух направлений на кодах MCNP (LANL) и ANOT (Oak Ridge) оказываются близкими: до 80-90% максимально возможного выигрыша [6] (см.Табл.1.). Распараллеливание численных алгоритмов опирается на разбиение расчетной области на подобласти по энергетическим, угловым и (или) пространственным переменным, в которых расчет каждой итерации общего решения может проводиться независимо. Далее встают проблемы оптимальной организации итерационного процесса, переработки и обмена информации, получаемой для каждой из подобластей. Значительного выигрыша в реальных двух- и трех- мерных задачах следует ожидать при работе на компьютерах с большой общей памятью.

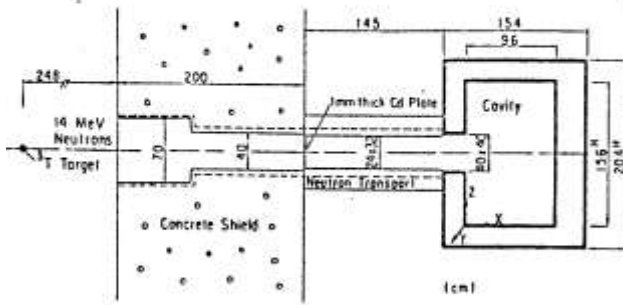


Рис.3. (R-Z)- модель радиационной защиты инжектора нейтральных частиц [3]

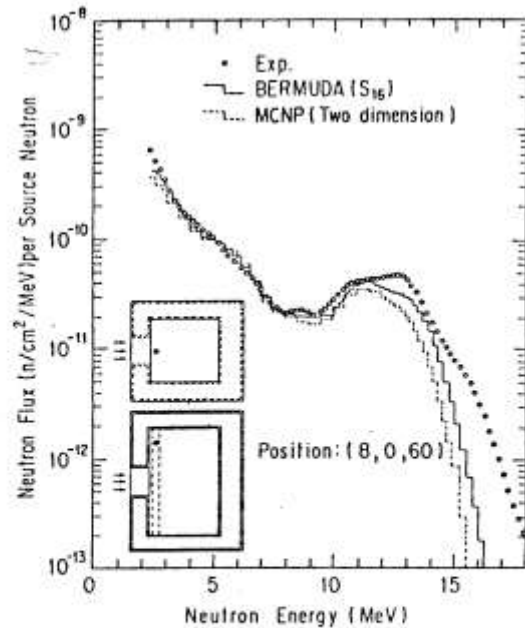


Рис.4 Экспериментальные и расчетные спектры быстрых нейтронов [3].

4. Как правило, необходимым, многократно повторяющимся элементом численного решения является расчет одноруппового уравнения для области сложной структуры и обычно больших размеров в характерных длинах свободного пробега. Поэтому создание быстродействующих программных модулей с реализацией высоко точных и надежных алгоритмов решения одноруппового уравнения оказывается сейчас ключевым моментом успешного решения широкого круга задач.

В последние годы основные усилия были направлены на развитие в рамках сеточной аппроксимации по угловым переменным, отвечающей MDO, нодальных схем с высокоточными пространственными аппроксимациями в каждой расчетной ячейке (“node”). В качестве исходной берется система балансных уравнений для $N+1$ пространственных моментов $\Psi^0, \Psi^1, \dots, \Psi^N$ в каждой ячейке (Finite Moments Method- F_N [7–9]).

Известные схемы входят в класс F_N , отвечая низким приближениям: DD соответствует $N=0$, LD и LM- $N=1$ (с различными способами замыкания системы моментных уравнений, отвечающих выражениям Ψ^2 через Ψ^0 и Ψ^1). Теоретический анализ погрешности сеточного решения $\Delta\Psi$ в простейших задачах с плоскопараллельной геометрией приводит к оценкам типа $\Delta\Psi = O(\delta^{2(N+1)})$ на густых сетках (при малых размерах шага δ в длинах свободного пробега) [8, 10].

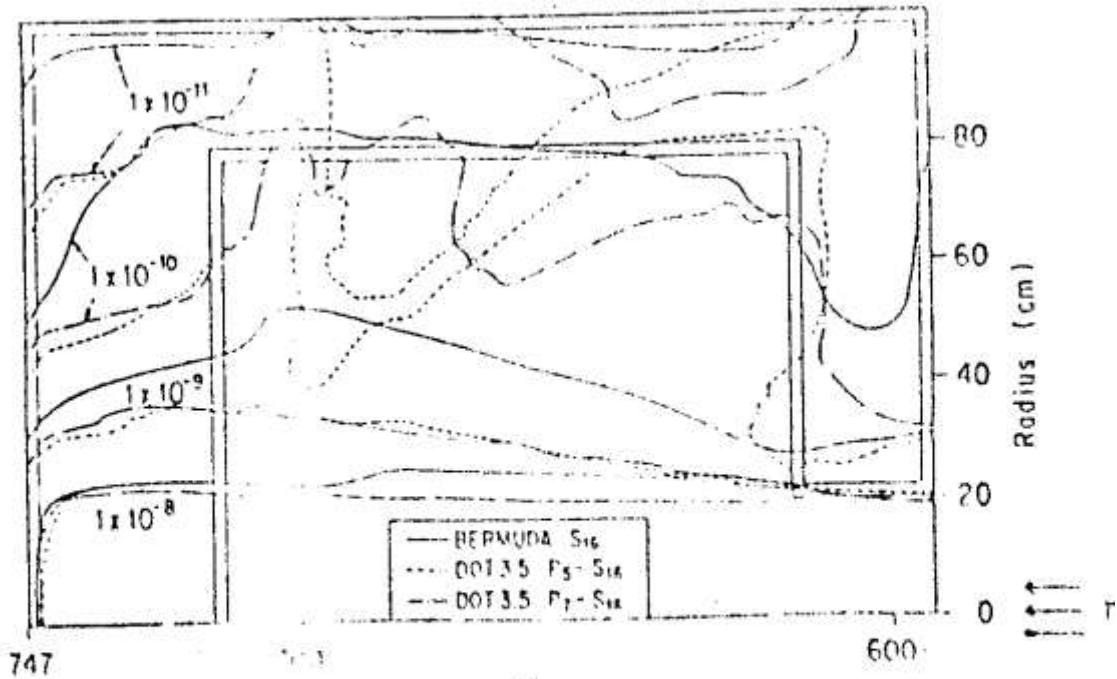


Рис. 5. Изолинии скалярных потоков при $E > 10$ Мэв в пустоте [3].

Однако целью разработки нодальных схем является использование грубосеточных аппроксимаций с $\delta \gg 1$. Как правило, из-за неположительности и немонотонности нодальных схем на грубых сетках появляются сильные искажения решения, сопровождаемые осцилляционными эффектами. Чтобы подавить осцилляции в схемы вводятся весовые параметры, определяемыми различными алгоритмами коррекции ("fix-up").

Одна из наиболее удачных форм коррекции предложена А.М.Волощенко в нелинейных Адаптивных Взвешенных схемах [8, 10], где весовые параметры в каждой ячейке определяются с помощью предварительной грубой оценки порядка изменения решения в этой ячейке. Внедренные в известные отечественные 1D и 2D программы (РОЗ-6 и КАСКАД) и в 3D программу в США [11] эти алгоритмы позволили существенно повысить точность расчетов.

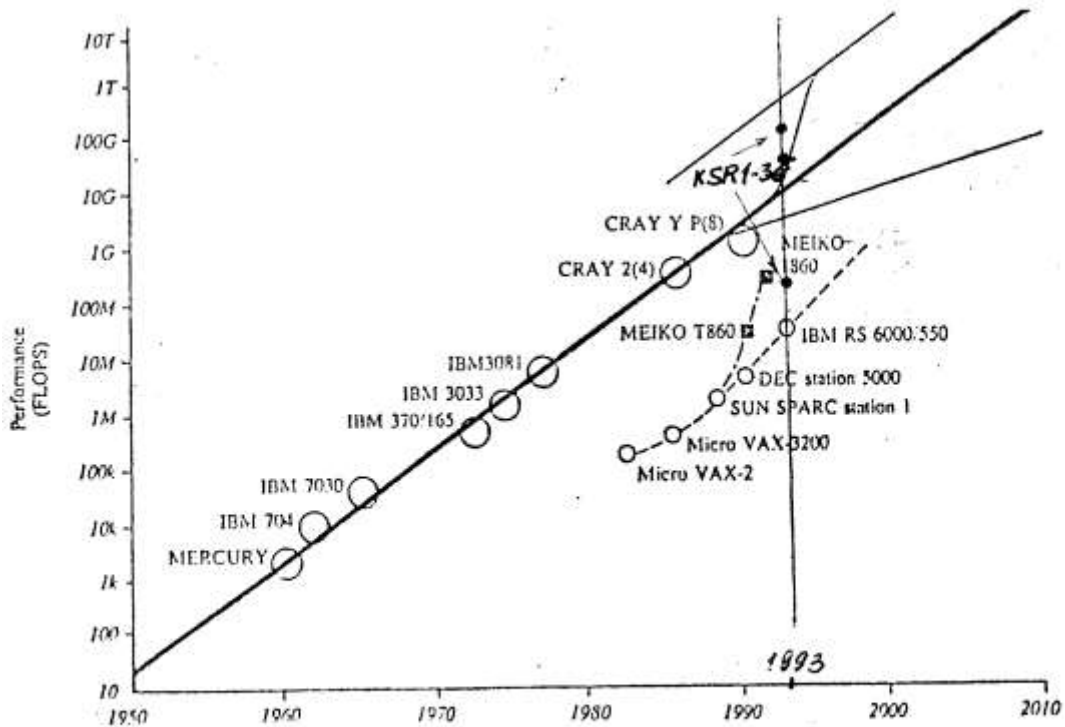


Рис. 6. Эффективность новых компьютеров в расчетах радиационной защиты [5].

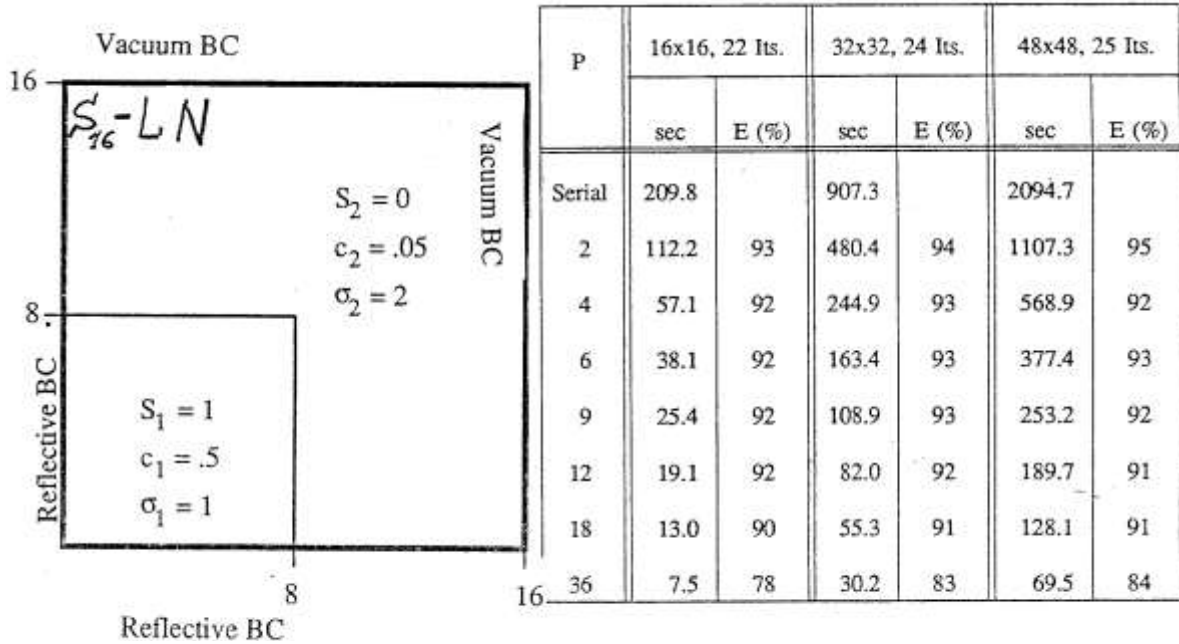


Табл. 1. Эффективность расчетных алгоритмов

Рис. 7. Пример 2D-задачи. код АНОТ на компьютерах KSR1-P [6]

Однако в 2D и 3D проблемах алгоритмы коррекции становятся достаточно сложными, особенно для областей с криволинейными геометриями. Это приводит к значительному усложнению согласованных алгоритмов ускорения сходимости по столкновениям. Кроме того, в неоднородных задачах (см. Рис.7.) могут возникать осцилляции,

обусловленные геометрическими факторами, присущими МДО (“ray-effects”). Указанные трудности лежат в основе формирующегося сейчас мнения о решительных преимуществах статистических методов на компьютерах с параллельной архитектурой [5].

Сейчас значительные успехи достигнуты в альтернативном направлении - в численных методах, где используется аппроксимация угловой зависимости системой базисных функций. Наиболее продвинутыми оказались упрощенные P_n - методы (“Simplified P_n » - SP_n [12, 13], опирающиеся на представление решения суммой регулярной и сингулярной компонент и теорию их асимптотических разложений по параметру ε - величине, обратной характерным оптическим размерам расчетной области [14]. Для коэффициентов разложения наиболее важной регулярной компоненты Ψ^r получают рекуррентные формулы и уравнения диффузионного типа, уточняющие известные диффузионное и P_1 - приближения.

Первые работы для оптически плотных областей с 2D - геометриями показали, что в расчетах не возникает ray-effect-ов, метод сравнительно прост в реализации и требует заметно меньшего расчетного времени, чем МДО, обеспечивая уже в низких приближениях (SP_2 , SP_3) высокую точность внутри зон с гладкими коэффициентами и источниками [15].

Для плоскопараллельной геометрии получено теоретическое обоснование метода [14]. Справедлива следующая оценка отклонения от точного решения Ψ разложения n - го порядка его регулярной компоненты Ψ_n^r :

$$\Psi(z, \mu) - \Psi_n^r(z, \mu) = O(\varepsilon^{(n+1)}) + O(e^{-\tau}),$$

где $\varepsilon \cong 1/\tau^*$, τ^* - толщина слоя, а $\tau = \tau(z)$ расстояние до ближайшей граничной поверхности (в длинах свободного пробега),

$$\Psi_n^r(z, \mu) = \sum_{k=0}^n \varepsilon^k \Phi_k(z, \mu), \quad \Phi_k(z, \mu) = \sum_{l=0}^k P_l(\mu) \Phi_k^l(z).$$

Построены простые алгоритмы расчета коэффициентов $\Phi_k^l(z)$ в задачах с рассеянием, близким к изотропному, и ведутся работы по распространению их на задачи с существенной анизотропией. Для определения сингулярной компоненты $\Psi^s = O(e^{-\tau})$ должны быть использованы более точные алгоритмы, отвечающие, например, нодальным схемам семейства F_N . Условия положительности этих схем устанавливаются на основании их спектрального анализа [16]. Полученные явные представления собственных функций сеточных аппроксимаций исходной задачи могут быть использованы в процедурах ускорения сходимости итераций по столкновениям.

Если распространение алгоритмов расчета Ψ^r на неодномерные геометрии принципиальных трудностей не вызывает, то эффективный расчет компоненты Ψ^s требует развития существующих подходов. В особенности сложны задачи областей с сильной гетерогенностью и пустотами. Алгоритмы с использованием интегрирования вдоль характеристик здесь имеют определенные преимущества [17, 18].

С целью работы на грубых сетках и по пространственным и по угловым переменным обращаются к Методу матриц отклика, способному хорошо передать усредненные характеристики решения. На первом этапе определяются коэффициенты отражения и пропускания каждой расчетной ячейки с аккуратным учетом ее внутренней структуры (методом характеристик [19], вариационным методом [20] и др.). Далее находится решение системы линейных уравнений, связывающих усредненные по угловым переменным значения потоков на граничных поверхностях ячеек. Метод матриц отклика успешно используется в реакторных расчетах.

Развития специализированных алгоритмов требуют задачи с сильной анизотропией, характерной для рассеяния высокоэнергетических нейтронов, гамма-квантов и, в особенности, заряженного излучения. Поточечное задание индикатрис рассеяния вместо использования их P_L - представлений и переход от расчета потоков в дискретном наборе направлений к расчету средних по элементарным телесным углам уже позволяет существенно повысить точность в нейтронных и гамма-задачах [3, 21]. Резерфордское рассеяние заряженных частиц вынуждает к более решительным шагам: декомпозиции индикатрисы на регулярную и сингулярную компоненты и переходу к новым формам уравнения переноса: уравнению Фоккера – Планка и уравнению Больцмана - Фоккера – Планка [22, 23]. В разработке численных алгоритмов их решения существенную роль играют соображения о возможности использования известных программ с традиционными алгоритмами МДО.

В развитии специализированных алгоритмов нуждаются также возникающие задачи о поляризованном гамма – излучении [24].

5. В каждой из существующих сейчас программ, как правило, реализован некоторый определенный метод, допускающий приспособление к конкретной задаче лишь посредством подбора ряда параметров: шагов, весов, параметров сглаживания, итерационных параметров и т.п. Между тем из расчетной практики и из теоретических исследований известно, что поведение решения уравнения переноса в разных частях расчетной области может быть существенно различным. Поэтому следует ожидать значительного выигрыша от использования комбинаций различных подходов (диффузионного и SP_n - приближений с нодальными схемами или методом Монте – Карло, например), а также разных геометрических моделей. Такие комбинации успешно использовались многими авторами, главным образом, в инженерных методиках [25]. Однако слабым местом, как правило, оказывались алгоритмы объединения. В последние годы существенное

продвижение в этом направлении достигнуто на базе предложенного Э.Е.Петровым использования поверхностных билинейных функционалов [26, 27]. Другой подход опирается на Метод пограничных слоев, разделяющий отыскание регулярной и сингулярной компонент решения, что также создает основу комбинаций расчетных моделей различного уровня.

6. Характерным для нашего времени является значительное сокращение государственной поддержки разработок и модернизации свободно распространяемых общецелевых программ [5]. Постоянное расширение области приложений известных кодов и их обновленных вариантов, а также появление новых кодов порождают естественное беспокойство о надежности расчетных результатов. Поэтому значительные усилия направлены на работы по верификации и валидации алгоритмов и программ и выполнение необходимых для этих работ прецизионных экспериментов («бенчмарков») и расчетов с высокой точностью типичных задач.

В последние годы получены полуаналитические решения с гарантированной высокой точностью в некоторых классах двух- и трехмерных задачах о глубоко проникающем излучении [28].

Начаты работы по созданию верификационных библиотек и банков, содержащих аналитические и прецизионные численные результаты, необходимые для развития и отработки алгоритмов и программ радиационной защиты [29, 30].

В ORNL создан валидационный банк SINBAD [31], в котором собираются результаты прецизионных экспериментов, обеспечивающих проверку точности используемого в конкретном расчете программно – константного аппарата в целом.

7. В настоящее время следующие факторы определяют, в основном, развитие вычислительных методов и программные разработки в приложениях теории переноса излучений к задачам радиационной физики.

* Постоянный рост требований к скорости счета, точности и надежности результатов в традиционных задачах радиационной защиты.

* Рост потребностей в численном моделировании радиационных полей в объектах микроэлектроники, в плазменных установках, ускорителях, в геологоразведочных и медицинских приложениях.

* Обеспокоенность надежностью расчетных результатов.

* Появление и мощное развитие компьютеров с параллельной архитектурой.

Литература

1. *B.G.Petrovich, A.Haghighat et al, Validation of S_N Transport Calculations for Vessel Pressure Fluence Determination at Penn State. Proc. 8 th IGRS, p. 721-728, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.*

2. *B.G.Petrovich, A.Haghighat* Impact of the Numerical Options in the DORT Code on PWR Pressure Vessel Fluence Calculations, Proc. Topl. Mtg. Adv. React. Physics, p. 219-229. Knoxville, Tennessee, USA, April, 11-15, 1994.
3. *A.Hesegava et al*, Development of BERMUDA: a Neutron and Photon Transport Code System. Proc. 8 th IGRS, p. 539-546, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.
4. *H.Nakashima et al*, Experiment and Analysis of 14 – Mev Neutron Deep Penetration in a Type 316L Stainless steel Assembly. Fusion Eng. Design, 10, 121, 1989.
5. *J.Butler*, Forty Years on: Quo Vadimus, Proc. 8 th IGRS, p. 3-13, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.
6. *J.Azmy*, Neutron Transport Methods on Scalable Shared Memory Multiprocessors, Proc. Topl. Mtg. Adv. React. Physics, p. 396-405, Knoxville, Tennessee, USA, April, 11-15, 1994.
7. *R.Vaidyanathan*, Finite Moments Algorithm for Particle Transport Problems, Nucl. Sci. Eng. 71, N 1, 46-54, 1979.
8. *Л.П.Басс, А.М.Волощенко, Т.А.Гермогенова*, Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения, М, 1986, Изд. ИПМ им. М.В.Келдыша.
9. *A.Badruzaman*, Asymptotic Analysis of the Finite Moments Transport Equations, Nucl. Sci. Eng., 112, N 4, 1992, p.321-335.
10. *T.A.Germogenova, A.V.Shwetsov, A.M.Voloschenko*, Adaptive Positive Nodal Method for Transport Equation, Transp. Theory and Stat. Physics, 23, N 7, 1994.
11. *R.E.Alcouffe*, An Adaptive Weighted Diamond Differencing Method for X,Y,Z – Geometry, TANS, 68, 1993, p. 206-208.
12. *E.W.Larsen, G.S.Poraning*, P_N - Theory as an Asymptotic Limit of Transport Theory in Planar Geometry, Part 1: Analysis. Nucl. Sci. Eng., 109, p.49-75, 1991.
13. *E.V.Larsen et. al*, Asymptotic Derivation of the Simplified P_N - Equations, Proc. Joint Int. Conf. Mathematical Methods and SuperComputing in Nuclear Applications, April 19-23, 1993, Karlsruhe, Germany, 1, 718-729.
14. *T.A.Germogenova*, Asymptotic Expansions of the Transport Equation Solutions in Optically Thick Media, Proc. 8 th ICRS, p. 564-571, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.
15. *D.Tomashevich, E.W.Larsen*. The Simplified P_2 Correction to the Multidimensional Diffusion Equation, TANS, 66, p.232, 1992.
16. *T.A.Germogenova*, Regular and Singular Eigenfunctions of the Finite Transport Methods in Optically Thick Media, submitted to Int. Conf. on Math. And Comp., Reactor Phys. and Environmental Analyses, Portland, Oregon, USA, April 30 -May 4, 1995.
17. *И.П.Суслов*, Решение уравнения переноса нейтронов в трехмерной нерегулярной геометрии. Тезисы докладов международного Симпозиума «Численные методы решения уравнения переноса», Москва, 1992, с. 228-231.
18. *Л.П.Басс, О.В.Николаева*, Численное решение уравнения переноса в двумерных областях с пустотами. Доклад на данной Конференции.

19. *И.П.Сулов*, Вопросы аппроксимации и ускорения итерационных процессов при решении уравнения переноса методом матрицы отклика, Тезисы докладов международного Симпозиума «Численные методы решения уравнения переноса», Москва, 1992, с. 224-227.
20. *G.Palmiotti, C.Carrico, E.Lewis*, Variational Nodal Transport Methods with Anisotropic Scattering, Nucl. Sci. Eng. 115, N3, p.233-242, 1992.
21. *V.V.Khromov et al*, Probabilistic Method of Discrete Ordinates (PMDO): Development and Applications in Global-Local Calculation, Proc. Joint Int. Conf. Mathematical Methods and SuperComputing in Nuclear Applications, April 19-23, 1993, Karlsruhe, Germany, 2, p. 605-614.
22. *K.Przybylski, J.Ligon*, Numerical Analysis of the Boltzmann Equation Including Fokker-Planck Terms, Nucl. Sci. Eng. 81, N1, p.92-109, 1982.
23. *А.М.Волощенко, С.В.Гуков*, Об аппроксимации сильно анизотропных сечений путем их декомпозиции на регулярную и сингулярную компоненты. Доклад на данной Конференции.
24. *H.Hirayama et al*, Effect of Liner Polarization and Doppler Broadening on the Exposure Buildup Factors of Low-Energy Gamma-Rays. Proc. 8 th ICRS, p. 586-593, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.
25. *Ю.А.Кураченко*, Возможности комплексных методик для расчета характеристик полей нейтронов. Доклад на данной Конференции.
26. *Э.Е.Петров, В.В.Коробейников, В.И.Усанов*, Свойства поверхностных билинейных функционалов и решение локальных задач в теории переноса излучений. Доклад на данной Конференции.
27. *В.В.Коробейников, В.И.Усанов, Э.Е.Петров*, Применение методов сопряжения к задачам расчета характеристик излучения ЯЭУ. Доклад на данной Конференции.
28. *T.A.Germogenova, E.B. Pavelyeva*, Semi-Analytical Benchmark Calculation for 2D and 3D Deep Penetration Problems, Proc. 8 th ICRS, p. 185-192, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.
29. *B.D.Ganapol*. The Analytical Benchmark Library for Neutron Transport Theory, Proc, Topl. Mtg. Adv. React. Physics, p. 306-312, Knoxville, Tennessee, USA, April 11-15, 1994.
30. *T.A.Гермогенова, Н.В.Коновалов, Е.Б.Павельева*, Банк тестовых задач радиационной защиты. Доклад на данной Конференции.
31. *H.Hunter, D. Ingersoll, R. Roussin et al*, SINBAD – a Shielding Integral Benchmark Archive and Data Base for PC's, Proc. 8 th ICRS, p. 795-801, Arlington, Texas, USA, April, 24-28, 1994.

NUMERICAL SOLUTION OF THE TIME-DEPENDENT TRANSPORT EQUATION WITH PULSED SOURCES

A.M. Voloschenko and T.A. Germogenova

Keldysh Institute of Applied Mathematics,
Acad. of Sci., Moscow 125047, Russia

TRANSPORT THEORY AND STATISTICAL PHYSICS, 23(6), 845-869 (1994)

ABSTRACT

A numerical algorithm for obtaining the discrete ordinates solution of the time-dependent multigroup neutron and γ -ray transport equation with pulsed sources is discussed. The Adaptive Weighted Diamond Differenced scheme (AWDD scheme) and the S_2 rebalance method for accelerating inner iterations, consistent with the discretization of the transport equation, are described. The spectral analysis of stability of the WDD scheme is presented. Special tools for correct treatment of the time-dependent problems with pulsed sources are provided. The results of calculations of some benchmark problems given by B. D. Ganopol et al. are presented.

I. INTRODUCTION

A numerical solution of the time-dependent transport equation with pulsed sources claims the high level requirements for numerical algorithm. It is due, in fact, to high gradients of the flux in the vicinity of moving radiation front and to large "quasi-diffusion" regions behind the front as well as to a wide range of solutions changing both in time and space.

One of the possible ways to improve the accuracy of calculations is to employ the streaming ray (SR) method¹ that uses a Lagrangian grid for a cell-uncollided part of the flux. But there are some difficulties to apply the SR method to curvilinear geometries.

Another possible way of solving the time-dependent problems, particularly for two- or three-dimensional geometries, is to use nodal schemes²⁻⁴ and special tools for correct treatment of pulsed sources^{5,6} together with a fix-up algorithm that ensures positivity, prevents large errors in numerical solution in the vicinity of radiation front and works well in large diffusion regions.

Perhaps the most attractive way to solve the time-dependent problems is using a combination of the SR method and nodal schemes. It is also desirable to use the consistent unconditionally stable methods such as the P_1 synthetic method to accelerate the convergence of scattering source iterations.

In 1988 we completed the work on the one-dimensional time-dependent discrete ordinate code ROZ-W.2⁵ based on WDD schemes. In this paper we discuss a few numerical algorithms implemented in ROZ-W.2 which are simple and have proved to be effective for solving practical problems with pulsed sources.

In our opinion, this experience can be used for the development of more complicated two-dimensional nodal algorithms.

In Sec. II we outline the suitable fix-up algorithm called the Adaptive Weighted Diamond Differenced scheme (AWDD scheme)^{7,6,8}. This scheme is the general multidimensional curvilinear geometry development of the adaptive difference scheme proposed by B. G. Carlson in Ref. 9 for the plane geometry case.

The AWDD scheme has some advantages compared with the Θ -WDD fix-up algorithm.¹⁰ To choose the weighting coefficients the AWDD scheme utilizes natural parameters: effective optical thicknesses of the mesh cell in different variables that are proportional to the flux gradients for each variable. So this practical algorithm is ideologically close to the thick diffusion limits requirements.¹¹ The AWDD scheme prevents large errors in the regions with large gradients, works well in thick diffusion regions, and saves generally high accuracy of the DD scheme in computation of the integral quantities.

The adaptive fix-up algorithm permits a generalization to the family of nodal WLM-WLD schemes of the second to the fourth order of accuracy.⁴

In Sec. III we present the spectral stability analysis of the WDD scheme for the time-dependent plane geometry case based on the results of D.A. Bayuk and T.A. Germogenova^{12,8} for X-Y geometry case. This analysis gives us an alternative way to explain the oscillation nature of the DD scheme, the superfluous smoothness of the Step scheme and good quality of the positive schemes. In some aspects our analysis supplements the Bad-ruzzaman results.^{3,13}

In Sec. IV in an example of the time-dependent spherical geometry case we outline the S_2 rebalance method of the acceleration of inner iterations, consistent with the WDD discretization of the transport equation. This method uses two multiple corrections and has proved to be effective for time-dependent problems with anisotropic scattering.

In Sec. V we discuss a few special tools for pulsed source problems: the correct selection of an unscattered component, the radiation front problems, etc.

In Sec. VI numerical results are presented. We conclude with a brief discussion in Sec. VII.

II. ADAPTIVE WDD SCHEME

We discuss the main idea of the AWDD scheme on an example of time-dependent one group transport equation in the one-dimensional spherical geometry

$$\begin{aligned} \frac{r^2 \partial \psi}{v \partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \psi(r, \mu, t)) + r \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \psi(r, \mu, t) \right] + \\ + \sigma r^2 \psi(r, \mu, t) = r^2 S(r, \mu, t), \end{aligned} \quad (2.1)$$

where the variables have their usual meanings. The AWDD scheme is a nonlinear algorithm for choosing the weighting parameters in the WDD scheme. The WDD scheme equations for the problem are given by the balance equation:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{\Delta tv} (\psi_{s+1/2} - \psi_{s-1/2}) + |\mu| (A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + \\ & \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \psi_{m-1/2}) + \sigma V \psi = VS \end{aligned} \quad (2.2)$$

and the supplementary equations:

$$\begin{aligned} \psi_{m+1/2} &= (1 + P_\mu) \psi - P_\mu \psi_{m-1/2}, \quad \psi^+ = (1 + P_r) \psi - P_r \psi^-, \\ \psi_{s+1/2} &= (1 + P_t) \psi - P_t \psi_{s-1/2}, \quad 0 \leq P_\mu, P_r, P_t \leq 1 \end{aligned} \quad (2.3)$$

with

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

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

$$V_i = \frac{1}{3} (r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3), \quad \Delta t_s = t_{s+1/2} - t_{s-1/2}, \quad C_i = r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2.$$

Here and below we usually omit the integer subscripts. For any variable (for example, r) the WDD system can be presented in the "quasi one-dimensional" form

$$\begin{aligned} |\mu| \left[(A^+ \psi^+ - A^- \psi^-) + (A^- - A^+) \psi \right] + \sigma_r V \psi &= VS_r, \\ \psi^+ &= (1 + P_r) \psi - P_r \psi^-, \end{aligned} \quad (2.4)$$

where σ_r and S_r are, respectively, the effective total cross-section and the source for extrapolation in r direction:

$$\begin{aligned} \sigma_r V &= \sigma V + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) + \frac{V}{\Delta tv} (1 + P_t), \\ S_r V &= SV + \frac{C}{w} (\alpha_{m-1/2} + P_\mu \alpha_{m+1/2}) \psi_{m-1/2} + \frac{V}{\Delta tv} (1 + P_t) \psi_{s-1/2}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

We note that $\sigma_r > \sigma$ and increases with σ the number of variables. From Eq. (2.4)

we have:

$$\psi_{P_r=1} = \frac{2 + h_r (S_r / \sigma_r)}{2 + h_r}, \quad h_r = \frac{2\sigma_r V}{|\mu| (A^- - A^+)}. \quad (2.6)$$

The h_r in Eq. (2.6) can be interpreted as an optical thickness of the cell in r direction. As observed by B.G. Carlson in Ref. 9, the real change of the flux in a cell is determined by the effective optical thick-ness:

$$h_r' \cong h_r \left(1 - \frac{S_r}{\sigma_r \psi_{P_r=1}}\right) = 2 \left(\frac{\psi^- - \psi}{\psi}\right) \equiv 2 U_r \sim \frac{\partial \psi}{\partial r} \psi. \quad (2.7)$$

Note that h_r' is generally smaller than h_r (often considerably smaller).

Another point of view is possible. The supplementary equation in system (2.4) can also be written as

$$\psi^+ / \psi = 1 - P_r U_r, \quad U_r = (\psi^- - \psi) / \psi \sim \frac{\partial \psi}{\partial r} \psi. \quad (2.8)$$

From Eq. (2.7) we can deduce that U_r defines the real change of the flux in a cell in r direction. The next inequality:

$$\left|U_r(P_r)\right| \leq \frac{|U_r^{DD}|}{\sigma_r P_r + 1 - \sigma_r}, \quad U_r^{DD} \equiv U_r|_{P_r=1}, \quad \sigma_r = \frac{A^+}{A^- + A^+} \quad (2.9)$$

takes place.

Theorem 2.1: Suppose ψ^- , $S \geq 0$. Then if $P_r = 1$ for $U_r^{DD} \leq 1$ and $0 \leq 0 \leq P_r \leq (1 - \sigma_r) / (U_r^{DD} - \sigma_r)$ for $U_r^{DD} > 1$, then $\psi^+ \geq 0$.

This theorem follows from inequality (2.9).

In view of Theorem 2.1 the choice of in P_r the AWDD scheme is

$$P_r = \begin{cases} 1, & |U_r^{DD}| \leq U_r^0 \\ P_r(|U_r^{DD}|), & |U_r^{DD}| > U_r^0 \end{cases}$$

Here U_r^0 is a parameter such that $0 < U_r^0 < 1$, P_r is the weighting function which is chosen from the assumption that correction is "soft": $P_r(U = U_r^0) = 1$, $P_r'(U = U_r^0) = 0$, and the algorithm is positive, i.e. $0 \leq P_r(U) \leq (1 - \sigma_r) / (U - \sigma_r)$. The acceptable formulas for $P_r(U)$ are given in Ref. 9 for the case $\sigma_r = 1/2$ and in Ref. 7 for general case.

Theorem 2.2: If $P_r = 1$ for $b|U_r^{DD}| \leq 1 - \sigma_r$ and $P_r \leq (1 - \sigma_r) / b|U_r^{DD}|$ for $b|U_r^{DD}| > 1 - \sigma_r$, where b is a parameter ($b \geq 1$), then

$$\psi^+ > \left(1 - \frac{1 - \sigma_r}{b}\right) \frac{S_r}{\sigma_r} \quad \text{for } \psi^- > \frac{S_r}{\sigma_r},$$

$$\psi^+ < \left(1 + \frac{1 - \sigma_r}{b}\right) \frac{S_r}{\sigma_r} \quad \text{for } \psi^- < \frac{S_r}{\sigma_r}. \quad (2.10)$$

It is known⁸ that the necessary and sufficient condition of monotonicity of the WDD scheme in r direction is

$$\left(\psi^+ - \frac{S_r}{\sigma_r}\right) \left(\psi^- - \frac{S_r}{\sigma_r}\right) \geq 0. \quad (2.11)$$

From inequalities (2.10) and (2.11) it is seen that by increasing the parameter b we are able to improve the monotonicity properties of the scheme.

In the AWDD scheme, after calculating ψ by the DD scheme ($P_r = P_t = P_\mu = 1$), we estimate the next three quantities

$$\bar{U}_t = b_t \left| \frac{\psi_{s-1/2} - \psi}{\psi} \right|, \dots, \bar{U}_r = b_r \left| \frac{\psi^- - \psi}{\psi} \right|, \bar{U}_\mu = b_\mu \left| \frac{\psi_{m-1/2} - \psi}{\psi} \right| \quad (2.12)$$

Here $b_x \geq 1$, where $x = t, r$ or μ , are the parameters that regulate the degree of monotonicity for each variable. If, for example, $\bar{U}_t > U_t^0$ the cell is recalculated with weight $P_t = P_t(U_t)$. After this U_t is calculated, etc. In the ROZ-W.2 the next choice of $P_x(\bar{U}_x)$ and b_x with $x = t, r$ or μ is used:

$$U_t^0 = 1/2, P_t(\bar{U}_t) = U_t^0 / \bar{U}_t, b_t = 2,$$

$$U_r^0 = 1 - \sigma_r, P_r(\bar{U}_r) = U_r^0 / \bar{U}_r, b_r = 2, \delta_r = \frac{A^+}{A^- + A^+},$$

$$U_\mu^0 = 1/2, P_\mu(\bar{U}_\mu) = \frac{1 - \sigma_\mu}{\bar{U}_\mu - \sigma_\mu + 0.25 / \bar{U}_\mu}, b_\mu = 1,$$

$$\delta_\mu = \frac{\alpha_{m+1/2}}{\alpha_{m-1/2} + \alpha_{m+1/2}}$$

Practical choice of b_x depends on the dimensionality of the problem, the requirements to the level of scheme monotonicity, etc. With increasing of b_x the number of fix-ups also increases. So, we recommend to use b_x as minimal as possible. For one- and two-dimensional stationary problems we usually use respectively $b_x = 1 \div 2$ and $b_x = 2 \div 3$.

The AWDD scheme has several merits in practical calculations. It is arithmetically simple, positive, homogeneous, takes no effect upon convergence of inner iterations and enables us to smooth out unwanted flux oscillations. Aside from ROZ-W.2 the AWDD scheme has been implemented in a few stationary transport codes: ROZ-6.4, KASKAD-1, RADUGA-4.0. For practical calculations the AWDD scheme has been used since 1982.

III. SPECTRAL STABILITY ANALYSIS OF WDD SCHEMES

We present here the stability analysis of the WDD scheme for the time-dependent plane geometry case. The balance equation and supplementary WDD equations for the cell $\left(x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\right) \times \left(t_{s-1/2}, t_{s+1/2}\right)$ are:

$$1/h_t(\psi_t^+ - \psi_t^-) + 1/h_x(\psi_x^+ - \psi_x^-) + \psi = S/\sigma, \quad (3.1)$$

$$\psi_t^+ = (1 + P_t)\psi - P_t\psi_t^-, \quad \psi_x^+ = (1 + P_x)\psi - P_x\psi_x^- \quad (3.2)$$

Here $h_x = \sigma\Delta x_i/\mu_m$, $h_t = \sigma\nu\Delta t_s$, $\psi = \psi_{is}$ is the cell-average flux, $\psi_t^\pm = \psi_{i,s\pm 1/2}$ and $\psi_x^\pm = \psi_{i\pm 1/2,s}$ are the cell side average fluxes.

Excluding ψ from Eqs. (3.1) and (3.2) we obtain the system of equations for ψ_t^+ and ψ_x^+ :

$$\psi_x^+ = a_x\psi_x^- + a_t\psi_t^- + c(1 + P_x)B, \quad \psi_t^+ = b_x\psi_x^- + b_t\psi_t^- + c(1 + P_t)B \quad (3.3)$$

with

$$a_x = \left[(1 + P_x)h_t - P_x(1 + P_t)h_x - P_x h_x h_t \right] / q,$$

$$a_t = (1 + P_x)(1 + P_t)h_x / q,$$

$$b_t = \left[(1 + P_t)h_x - P_t(1 + P_x)h_t - P_t h_x h_t \right] / q,$$

$$b_x = (1 + P_x)(1 + P_t)h_t / q,$$

$$c = h_x h_t / q, \quad B = S/\sigma, \quad q = (1 + P_x)h_t + (1 + P_t)h_x + h_x h_t,$$

$$\psi = \left[(1 + P_x)h_t\psi_x^- - (1 + P_t)h_x\psi_t^- + h_x h_t B \right] / q.$$

Assuming that the space mesh is uniform ($\Delta x = \text{const}$) and using a standard spectral stability analysis we represent $\psi_{i,s\pm 1/2}$ and $\psi_{i\pm 1/2,s}$ by their Fourier expansion:

$$\begin{aligned} \psi_{i,s\pm 1/2} &= \sum_{j=-I/2+1}^{1/2} A_{j,s\pm 1/2} e^{i\beta_j}, \quad \psi_{i\pm 1/2,s} = \sum_{j=-I/2+1}^{1/2} A_{j,s} e^{i\beta_j}, \\ \psi_{i-1/2,s} &= \sum_{j=-I/2+1}^{1/2} A_{j,s} e^{i\beta_{(i-1)}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

with $i = \sqrt{-1}$, $\beta = 2\pi j/I$ and $I = X/\Delta_x$.

To estimate the amplitude change of every (j-th) harmonic when passing from the (s-1)-th to the s-th time step for problems without sources ($B \equiv 0$) we obtain from Eq. (3.3) the next equations (the index j is omitted):

$$A_s = a_x e^{-i\beta} A_s + a_t A_{s-1/2}, \quad A_{s+1/2} = b_x e^{-i\beta} A_s + b_t A_{s-1/2} \quad (3.5)$$

From Eq. (3.5) we get:

$$A_{s+1/2} = \frac{de^{-i\beta}b}{1-a_x e^{-i\beta}} A_{s-1/2}$$

with

$$d = a_t b_x - a_x b_t = \left[(P_x(1+P_t)h_x + P_t(1+P_x)h_t - P_x P_t h_x h_t) \right] / q.$$

For the damping coefficient $\rho = |A_{s+1/2} / A_{s-1/2}|$ we obtain:

$$\rho = \left| \frac{d + b_t e^{i\beta}}{e^{i\beta} - a_x} \right| = \left| \frac{(d + b_t)^2 - 2b_t d(1 - \cos \beta)}{(1 - a_x) + 2a_x(1 - \cos \beta)} \right|^{1/2} \quad (3.6)$$

To achieve the scheme stability it is sufficient to fulfill the inequality $\rho \leq 1$. Let us prove that for all P_x and $P_t \in [0, 1]$ this inequality takes place independently of h_x and $h_t > 0$. From Eq. (3.6) the next presentation of ρ^2 follows:

$$\rho^2 = \frac{A + Bf(\beta)}{1 + f(\beta)}$$

with

$$A = \left(\frac{b_t + d}{1 - a_x} \right), B = - \left(\frac{b_t d}{a_x} \right), f(\beta) = \frac{2a_x}{1 - a_x} (1 - \cos \beta).$$

Since $\frac{d}{d\beta} \rho^2 = (B - A)f' / (1 + f)^2$ and $f(\beta)$ is a monotonous function on $[0, \pi]$, the function $\rho(\beta)$ is also monotonous on the interval $[0, \pi]$. So it is sufficient to verify the inequality $\rho \leq 1$ at the adge points $\beta = 0$ and $\beta = \pi$.

Let us put $\beta = 0$. Then

$$f(\beta) = 0, \rho|_{(\beta)=0} = \left| \frac{b_t + d}{1 - a_x} \right| = \left| \frac{1 + P_t(1 - h_t)}{1 + P_t + h_t} \right| \leq 1 \quad (3.7)$$

if $h_t > 0$ and $P_t > -1$.

For $\beta = \pi$ we have

$$f(\beta) = \frac{4a_x}{1 - a_x}, \rho|_{\beta=\pi} = \left| \frac{b_t - d}{1 + a_x} \right| \quad (3.8)$$

Since for all h_x and $h_t > 0$, P_x and $P_t \in (-1, 1]$ the next inequalities hold:

$$\begin{aligned} 1 + a_x &= [2(1 + P_x)h_t + (1 - P_x)(1 + P_t)h_x + (1 - P_x)h_x h_t] / q > 0, \\ 1 + a_x - (b_t - d) &= 2h_t [(1 + P_x)(1 + P_t) + h_x(1 - P_x)] / q > 0, \\ 1 + a_x + (b_t - d) &= 2[(1 + P_x)(1 + P_t)h_t + (1 - P_x)(1 + P_t)h_x] / q \geq 0, \end{aligned}$$

from Ex. (3.8) we have the desirable estimation: $\rho|_{(\beta)=0} \leq 1$. So the stability of the WDD scheme takes place for all h_x and $h_t > 0$, P_x and $P_t \in (-1, 1]$ under the assumption $B \equiv 0$, h_x and $h_t > 0$.

It is known^{8,12} that for the local error δ_{loc} of the WDD scheme (3.3) the next estimation holds:

$$\delta_{loc} \leq [(1 - P_x) + (1 - P_t)] \max_{x,t,m} |D^2 \psi_{ex}^m| h^2 + O(\max_{x,t,m} |D^3 \psi|) h_x \quad (3.9)$$

with

$$h = \max\{h_t, h_x\}, D^k \psi = \max_{k_1+k_2=k} \frac{\partial^{k_1+k_2} \psi}{\partial x^{k_1} \partial t^{k_2}}, k = 2, 3.$$

The proved estimation of ρ gives us the possibility to assert that the DD scheme has the second order of accuracy, and the WDD scheme for $P_t < 1$ or (and) $P_x < 1$ - the first order in the integer norms.

Let us consider two special cases.

1. The Step schemes. The weighting coefficient $P_x = P_t = 0$. In this case

$$a_x = b_x = h_t / q, a_t = b_t = h_x / q, q = h_x + h_t + h_x h_t, d = 0.$$

$$\rho = \left[(1 + h_t)^2 + 2h_t / h_x (1 + h_t + h_t / h_x) (1 - \cos \beta) \right]^{-1/2}$$

For fixed h_x and h_t the quantity ρ monotonically decreases as β increases, i.e. the high level harmonics are damped more intensively as β increases. For $\beta > 0$ the damping does not vanish, if h_x and $h_t \rightarrow 0$ while $h_t / h_x \cong \text{const}$. The zero harmonic is damped very weakly:

$$\rho|_{(\beta)=0} = (1 + h_t)^{-1} > \exp(-h_t) = \rho^{ex},$$

that leads to the overestimation of the solution on the whole. Here ρ^{ex} is the damping coefficient on the step Δ_t of Fourier ω -harmonic of the exact solution to the homogeneous transport equation

$$\psi_{\omega}^{ex}(x, t) = \exp(i\omega x - \lambda t), \lambda = \sigma v + i\omega \mu v.$$

The error of the quantity ρ has the first order on $h = \max(h_x, h_t)$. For small β and $h_t \rightarrow 0$

$$|\rho^{ex} - \rho| / \rho^{ex} = h_t^2 + \beta^2 O(h).$$

Note, that the zero harmonic error is less than others.

2. The DD scheme. The weighting coefficient $P_x = P_t = 1$. From Eq. (3.7)

we have
$$\rho^2 = \frac{(1 - h_t/2)^2 - \frac{1}{2} \left[(1 - h_t/2)^2 - (h_t/h_x)^2 \right] (1 - \cos \beta)}{(1 + h_t/2)^2 - \frac{1}{2} \left[(1 + h_t/2)^2 - (h_t/h_x)^2 \right] (1 - \cos \beta)}.$$

This quantity monotonically with increasing β from

$$\rho|_{(\beta)=0} = \frac{1 - h_t/2}{1 + h_t/2} = e^{-h_t} + O(h_t^3) < 1$$

to $\rho|_{(\beta)=0} = 1$. The high frequency harmonics of the solution practically do not damp and exactly this fact defines an oscillatory nature of the solution far from the sources. For $h_t \rightarrow 0$ the dependence of ρ on β disappears:

$$\rho^2 = (\rho^{\text{ex}})^2 - h_t^3/2 + (1 - \cos \beta) O(h_t^2).$$

In Figs. 1a - 1c we present results of calculations of the cell edge angular flux values ψ_m^\pm for the system (3.1) and (3.2) in the case $S = 0$, slab thickness $X = 20$, $\sigma = 1$, $\mu_m = 1/\nu = 0,7$, $h_x = 0,25$ and $h_t = 0,5$ with vacuum boundary conditions and next initial angular flux values:

$$\psi_m(x, t)|_{t=0} = \begin{cases} 1, & x \in [3, 6] \\ 0, & x < 3 \text{ or } x > 6 \end{cases}$$

The Step scheme and the DD scheme have been used. The numerical results show that for the Step scheme there is a tendency to smooth out the solution. This is connected with strong damping of high frequency harmonics in this scheme. For the DD scheme the strong oscillations arise. The initial wave package is spilled: the weakoscillating low harmonics are damped strongly, but the high frequency harmonics do not damp practically at all.

By using the intermediate positive WDD scheme we are able to reduce both the superfluous approximate diffusion of the Step scheme, and the excessive dispersion of the DD scheme. In Fig. 1d we present results of calculations by the AWDD scheme with $b_t = b_x = 2$ for problem that differs from the first one only by the values of $\sigma = 5$ and $h_x = 2,5$. The amplitude of oscillations of the cell-averaged flux values is less than for edge flux values. By increasing monotonization parameters values we can decrease the amplitude of oscillations.

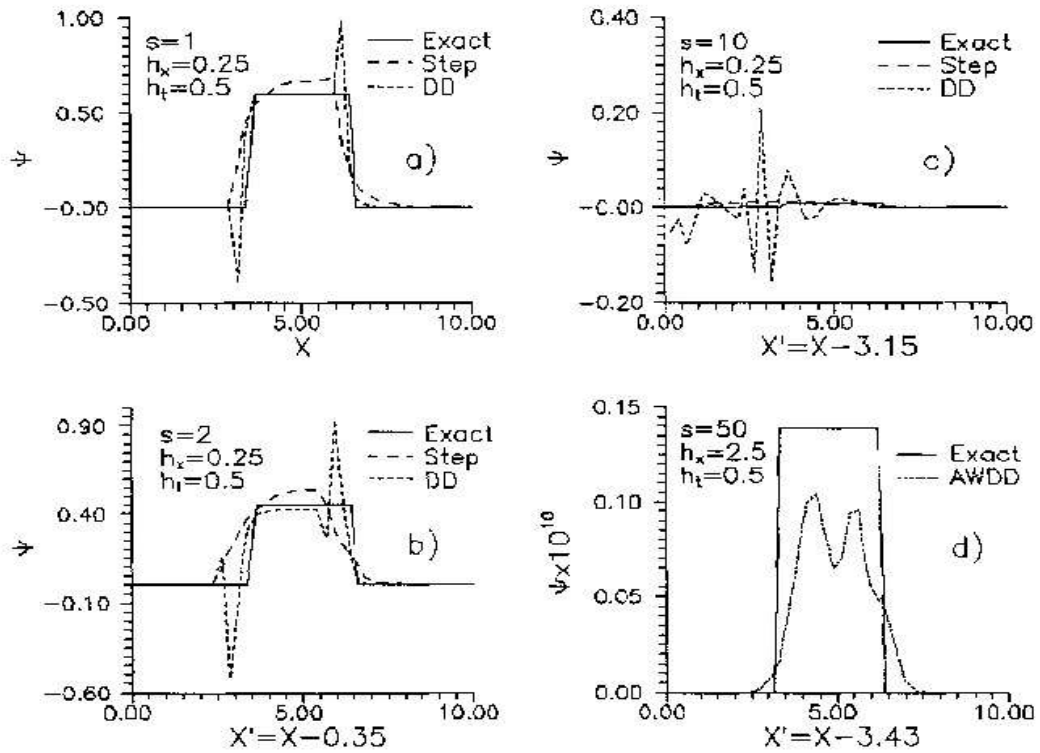


FIG. 1a-1d. Variation with time the cell edge angular flux values calculated by the DD, Step and AWDD schemes for model problem in (x,t) geometry, s = number of step in time.

To obtain the positive WDD scheme (3.3) it is sufficient to achieve the positivity of the coefficients a_x and b_t since the other ones are positive for all h_x and $h_t > 0$, P_x and $P_t \in [0,1]$.

The inequalities $a_x(P_x, P_t) \geq 0$ and $b_x(P_x, P_t) \geq 0$ define on the plane P_x, P_t the region under the positive branches of the hyperbolas:

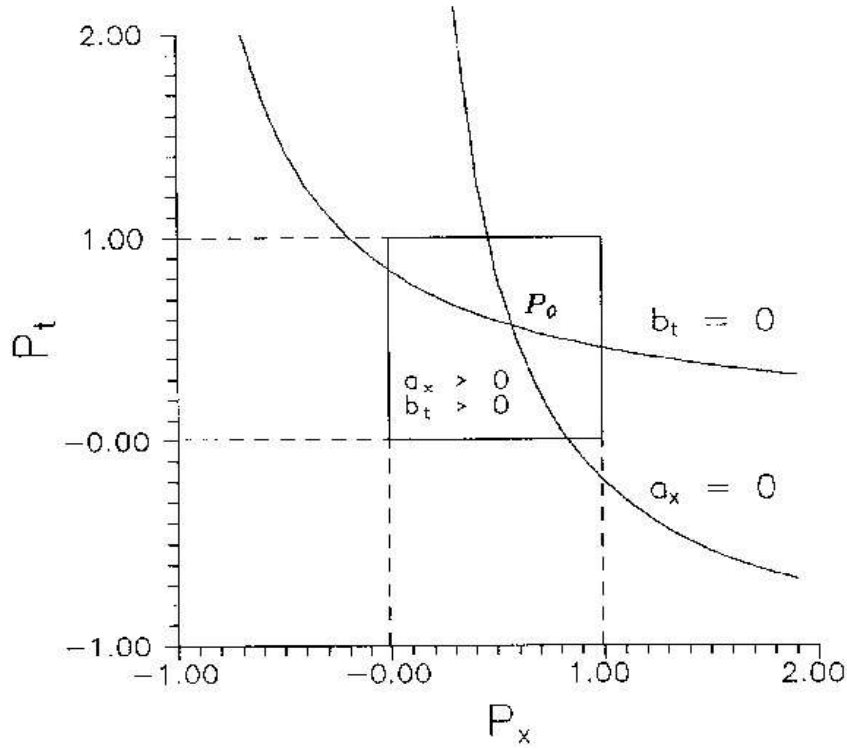


FIG.2. Positivity region of the WDD scheme in (x,t) geometry for the case $h_x=h_t=1.2$.

$$\begin{aligned} h_x P_x [P_t + (h_x - h_t + h_x h_t) / h_x] - h_t &= 0, \\ h_t P_t [P_x + (h_x - h_t + h_x h_t) / h_t] - h_x &= 0. \end{aligned}$$

Fig. 2 corresponds to the case of the neighboring quantities of h_t and h_x , where the inequality

$$|h_x - h_t| \leq h_x h_t / 2$$

takes place, and the point of intersection P_0 of the hyperbolas lies in the square $J^2 = [0,1] \times [0,1]$. This point corresponds to the optimal WDD_0 scheme for which the quantity ρ does not depend on β , and its deviation from ρ^{ex} for $h_t \rightarrow 0$ has the order $\sim O(h_t^2)$.

If the condition (3.11) is not satisfied, the hyperbolas either do not intersect or the intersection point is located outside J^2 . As has been shown in Refs. 8 and 12, in this case the optimal WDD scheme, for which the error in ρ is minimal, also exists.

For the positive WDD scheme the maximum principle takes place. For this principle the estimations of the maximum of the solution to the system (3.3) through the maxima of the initial and boundary fluxes, and internal sources values hold.¹⁴ From this we have the estimation of the WDD scheme error:

$$\max_{i,s} \left\{ \left| \psi_{i,s\pm 1/2}^m - \psi_{ex}^m(x_i, t_{s\pm 1/2}) \right|, \left| \psi_{i\pm 1/2s}^m - \psi_{ex}^m(x_{i\pm 1/2}, t_{s\pm 1/2}) \right| \right\} \leq \sigma_{loc} / t,$$

where $\psi_{\text{ex}}^m(\mathbf{x}, t)$ is the exact transport equation solution in the discrete ordinate approximation for the given right-hand side S , σ_{loc} is the approximation local error which is defined by Eq. (3.9), and

$$t = 1 - a_x - a_t = 1 - b_x - b_t = \frac{(1 + P_x) h_x h_t}{(1 + P_x) h_t + (1 + P_t) h_x + h_x h_t} \geq \frac{1}{2(1/h_t + 1/h_x + 1)}.$$

From estimation (3.9) we obtain that the WDD scheme has the first order of approximation if h_t and $h_x \rightarrow 0$. But if h_x and $h_t \geq 0(1)$, then $t = 0(1)$ and

$$\left| \psi_{i\pm 1/2, s}^m - \psi_{\text{ex}}^m(x_{i\pm 1/2}, t_s) \right| = O(\sigma_{\text{loc}}), \quad \left| \psi_{i, s\pm 1/2}^m - \psi_{\text{ex}}^m(x_i, t_{s\pm 1/2}) \right| = O(\sigma_{\text{loc}}).$$

This explains good numerical results for positive schemes in the cases where parameters P_x and P_t provide good approximation of an exact problem by means of the scheme (3.3).

Practically, we find it more effective to use the Adaptive WDD scheme that was outlined in Sec. II, in which the positivity of ψ_x^-, ψ_t^- and B in each calculation cell.

IV. S_2 REBALANCE METHOD FOR ACCELERATE INNER ITERATIONS

In ROZ-W.2 the S_2 rebalance acceleration method, consistent with discretization of the transport equation, is used. In this method a solution $\psi^{(k+1/2)}$ for the $(k+1)$ -th transport iteration is renormed by means of two sets of the rebalance coefficient $\{ \overset{+}{n}_i, \overset{+}{n}_{i+1/2} \}$ and $\{ \overset{+}{n}_{i, s+1/2} \}$ and $\{ \overset{-}{n}_i, \overset{-}{n}_{i+1/2} \}$ and $\{ \overset{-}{n}_{i, s\pm 1/2} \}$ (for angles $\mu > 0$ and $\mu < 0$):

$$\psi_{i, m, s}^{(k+1)} = \begin{cases} \overset{+}{n}_i \psi_{i, m, s}^{(k+1/2)}, \mu_m > 0 \\ \overset{-}{n}_i \psi_{i, m, s}^{(k+1/2)}, \mu_m < 0 \end{cases}, \quad \psi_{i\pm 1/2, m, s}^{(k+1)} = \begin{cases} \overset{+}{n}_{i\pm 1/2} \psi_{i\pm 1/2, m, s}^{(k+1/2)}, \mu_m > 0 \\ \overset{-}{n}_{i\pm 1/2} \psi_{i\pm 1/2, m, s}^{(k+1/2)}, \mu_m < 0 \end{cases} \quad (4.1a)$$

$$\psi_{i, m+1/2, s}^{(k+1)} = \begin{cases} \overset{+}{n}_i \psi_{i, m+1/2, s}^{(k+1/2)}, \mu_m > 0 \\ \overset{*}{n}_i \psi_{i, m+1/2, s}^{(k+1/2)}, \mu_m^* \cong 0 \\ \overset{-}{n}_i \psi_{i, m-1/2, s}^{(k+1/2)}, \mu_m < 0 \end{cases}, \quad \psi_{i, m, s+1/2}^{(k+1)} = \begin{cases} \overset{+}{n}_{i, s+1/2} \psi_{i, m, s+1/2}^{(k+1/2)}, \mu_m > 0 \\ \overset{-}{n}_{i, s+1/2} \psi_{i, m, s+1/2}^{(k+1/2)}, \mu_m < 0 \end{cases} \quad (4.1b)$$

with $n_i = 1/2(n_i^+ + n_i^-)$. Integrating the balance equation (2.2) with $\psi = \psi^{(k+1)}$ for angles $\mu > 0$ and $\mu < 0$ we obtain a system of two equations for the rebalance coefficient $n_{i\pm 1/2}^+$, n_i^+ , $n_{i,s+1/2}^+$, $n_{i\pm 1/2}^-$, n_i^- and $n_{i,s+1/2}^-$. To complete this system for supplementary equations and boundary conditions are needed. The supplementary equations used follow from the condition of invariance of two equations mentioned above to the change:⁶⁻⁸

$$\psi \rightarrow \frac{1}{1+P_r} \psi^+ + \frac{P_r}{1+P_r} \psi^-, \quad \psi_{s+1/2} \rightarrow (1+P_t) \psi - P_t \psi_{s-1/2} \quad (4.2)$$

They have the form:

$$\begin{aligned} n_{i,s+1/2}^+ \sum_{\mu_m > 0} w_m \psi_{s+1/2}^+ &= n_i^+ \sum_{\mu_m > 0} w_m (1+P_t) \psi^+ - \sum_{\mu_m > 0} w_m P_t \psi_{s-1/2}^+, \\ n_{i,s+1/2}^- \sum_{\mu_m < 0} w_m \psi_{s+1/2}^- &= n_i^- \sum_{\mu_m < 0} w_m (1+P_t) \psi^- - \sum_{\mu_m < 0} w_m P_t \psi_{s-1/2}^-, \\ n_i^+ &= q_i^+ n_{i+1/2}^+ + (1-q_i^+) n_{i-1/2}^+ + (n_{i-1/2}^- - n_{i+1/2}^-) t_i^+, \\ n_i^- &= q_i^- n_{i-1/2}^- + (1-q_i^-) n_{i+1/2}^- + (n_{i+1/2}^+ - n_{i-1/2}^+) t_i^- \end{aligned} \quad (4.3)$$

with

$$q = \frac{1}{N^+} \left(\frac{\gamma^+}{B^+} - \frac{\delta^-}{A^-} \right), \quad t = \frac{1}{N^+} \left(\frac{\gamma^-}{A^-} - \frac{\delta^+}{B^+} \right), \quad N^+ = \left(\frac{A^+}{B^+} - \frac{B^-}{A^-} \right), \quad (4.4)$$

$$A^+ = \sum_{\mu_m > 0} (w_m \tilde{\sigma} - I_m^+) \psi_{i,m,s}^{(k+1/2)}, \quad B^+ = \sum_{\mu_m < 0} I_m^+ \psi_{i,m}^{(k+1/2)},$$

$$\gamma^+ = \sum_{\mu_m > 0} (w_m \tilde{\sigma} - I_m^+) \frac{\psi_{i+1/2,m,s}^{(k+1/2)}}{1+P_r}, \quad \delta^+ = \sum_{\mu_m < 0} I_m^+ \frac{\psi_{i-1/2,m,s}^{(k+1/2)}}{1+P_r} \quad (4.5a)$$

$$\tilde{\sigma} = \sigma + \frac{1+P_t}{\Delta t_s \nu}, \quad I_{m'}^+ = \sum_{\mu_m > 0} w_m w_{m'} K_{m',m}, \quad I_{m'}^- = \sum_{\mu_m < 0} w_m w_{m'} K_{m',m}^s \quad (4.5b)$$

In Eq. (4.5b) $K_{m',m}$ is the scattering kernel normalized to the scattering cross-section σ_{S0} . The quantities A^- , B^- , γ^- and δ^- in Eq. (4.4) are obtained from A^+ , B^+ , γ^+ and δ^+ in Eq. (4.5a) by the substitutions $i\pm 1/2 \rightarrow i\mp 1/2$, $\mu_m \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} 0 \begin{matrix} < \\ > \end{matrix} 0$ and $I_m^+ \rightarrow I_m^-$, and the coefficient q and t -from \bar{q} and \bar{t} in Eq. (4.4) by the substitutions $A^+ \rightarrow A^-$, $B^+ \rightarrow B^-$, etc.

Using (4.3) we can eliminate $\overset{+}{\mathbf{n}}_i$, $\overset{-}{\mathbf{n}}_i$, $\overset{+}{\mathbf{n}}_{i,s+1/2}$ from the two first equations of the system to find the system for $\overset{+}{\mathbf{n}}_{i\pm 1/2}$ and $\overset{-}{\mathbf{n}}_{i\pm 1/2}$:

$$\begin{cases} \overset{+}{\mathbf{n}}_{i\pm 1/2} \overset{+}{\mathbf{a}}_i - \overset{-}{\mathbf{n}}_{i-1/2} \overset{+}{\mathbf{b}}_i - \overset{+}{\mathbf{n}}_{i\pm 1/2} \overset{-}{\mathbf{c}}_i - \overset{-}{\mathbf{n}}_{i-1/2} \overset{+}{\mathbf{d}}_i = \overset{+}{\mathbf{f}}_i \\ \overset{-}{\mathbf{n}}_{i-1/2} \overset{-}{\mathbf{a}}_i - \overset{-}{\mathbf{n}}_{i+1/2} \overset{-}{\mathbf{b}}_i - \overset{+}{\mathbf{n}}_{i-1/2} \overset{-}{\mathbf{c}}_i - \overset{+}{\mathbf{n}}_{i+1/2} \overset{-}{\mathbf{d}}_i = \overset{-}{\mathbf{f}}_i \end{cases} \quad (4.6)$$

with

$$\overset{+}{\mathbf{f}}_i = \mathbf{V}_i \sum_{\mu_m > 0} \mathbf{w}_m \tilde{\mathbf{f}}_{i,m,s}, \quad \overset{-}{\mathbf{f}}_i = \mathbf{V}_i \sum_{\mu_m < 0} \mathbf{w}_m \tilde{\mathbf{f}}_{i,m,s}, \quad \tilde{\mathbf{f}}_{i,m,s} = \mathbf{f}_{i,m,s} + \frac{\psi_{s-1/2} (1 + \mathbf{P}_t)}{\Delta \mathbf{t}_s \nu},$$

where $\mathbf{f}_{i,m,s}$ is the fixed component of the source. The boundary conditions for the system (4.6) are obtained by integrating the ones for the transport equation with the weight μ_m for the angles $\mu_m > 0$ and $\mu_m < 0$.

The system (4.6) can be easily, for example, by the left through-computations method:

$$\overset{+}{\mathbf{n}}_{i+1/2} = \overset{+}{\xi}_i \overset{+}{\mathbf{n}}_{i-1/2} + \overset{+}{\eta}_i, \quad \overset{-}{\mathbf{n}}_{i-1/2} = \overset{-}{\xi}_i \overset{-}{\mathbf{n}}_{i+1/2} + \overset{-}{\eta}_i.$$

Our approach to solve a system for correction coefficients, unlike the one used in Ref. 15, puts no restrictions on the weights of the WDD scheme.

V. SPECIAL TOOLS FOR PULSED SOURCE PROBLEMS

To improve the accuracy for pulsed source problems the unscathed component of radiation ψ is selected. Note that in the right-hand side of the balance equation (2.2) S is an appropriate average of a source over a cell phase volume. Hence, for correct calculation of S the averaged value of ψ_0 is needed.

We consider the next σ -type pulsed sources:

the monodirectional plane source incident in angle cosine $\mu_0 = \left(\overset{\rightarrow}{\Omega}_0 \overset{\rightarrow}{\mathbf{n}}_x \right) > 0$ on the left boundary of the region:

$$\mathbf{f}^q(\mathbf{x}, \mu, \varphi, t) = \mathbf{F}^q \mu \delta(\mathbf{x}) \delta(\mu - \mu_0) \delta(\varphi) \mathbf{T}^q(t), \quad \mu = \left(\overset{\rightarrow}{\Omega} \overset{\rightarrow}{\mathbf{n}}_x \right); \quad (5.1a)$$

the isotropic point source:

$$\mathbf{f}^q(\mathbf{r}, \mu, t) = \frac{\mathbf{F}^q}{4\pi r^2} \delta(\mathbf{r}) \mathbf{T}^q(t), \quad \mu = \left(\overset{\rightarrow}{\Omega} \overset{\rightarrow}{\mathbf{n}}_r \right); \quad \text{and} \quad (5.1b)$$

the isotropic point source:

$$\mathbf{f}^q(\mathbf{r}, \mu, \varphi, t) = \frac{\mathbf{F}^q}{2\pi r} \delta(\mathbf{r}) \mathbf{T}^q(t), \quad \mu = \left(\overset{\rightarrow}{\Omega} \overset{\rightarrow}{\mathbf{n}}_z \right), \quad (5.1c)$$

where $q = \text{group number}$, $\{F^q\} = \text{source energy spectrum}$, $T^q(t) = \text{source time output function}$. The averaged value of ψ_0^q for sources (5.1a)- (5.1c), calculated in an assumption that the source is constant in E within the group interval $(E_{q+1/2}, E_{q-1/2})$, is given by

$$\varphi_{0,pl}^q(x_i, \mu, \varphi, t_s) \cong F^q \exp\left(-\int_0^{x_i} \sigma^q(x) dx\right) \delta(\mu - \mu_0) \delta(\varphi) I_{q,i,s}^1(\mu_0) \quad (5.2a)$$

$$\psi_{0,sp}^q(r_i, \mu, t_s) \cong \frac{F^q}{4\pi r_i^2} \exp\left(-\int_0^{r_i} \sigma^q(r) dr\right) \delta(\mu - 1) I_{q,i,s}^1(1) \quad (5.2b)$$

$$\psi_{0,c}^q(r_i, \mu, \varphi, t_s) \cong \frac{F^q}{4\pi r \sqrt{1 - \mu^2}} \exp\left(-\int_0^{r_i} \frac{\sigma(r) dr}{\sqrt{1 - \mu^2}}\right) \delta(\varphi) I_{q,i,s}^2(\sqrt{1 - \mu^2}) \quad (5.2c)$$

where $I_{q,i,s}^n(\mu_0)$, $n=1, 2, 3$ is the phase volume source contribution function

$$I_{q,i,s}^1(\mu_s) = \frac{1}{\Delta E_q} \int_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}} dE \frac{1}{V_i} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} dV \frac{1}{t_s} \int_{t_{s-1/2}}^{t_{s+1/2}} dt T^q\left(t - \frac{r}{\mu_0 v(E)}\right). \quad (5.3)$$

In Eq. (5.3) V_i is the space cell volume.

For line isotropical source (5.1c) the averaging procedure in angle interval $(\mu_{1-1/2}, \mu_{1+1/2})$ is also needed. But we use a rather rough approximated formula for $\varphi_{0,c}^q$ in assumption that

$$\frac{1}{\Delta \mu_1} \int_{\mu_{1-1/2}}^{\mu_{1+1/2}} I_{q,i,s}^2(\sqrt{1 - \mu^2}) d\mu \cong I_{q,i,s}^2(\sqrt{1 - \mu^2}).$$

For nonrelativistic neutrons $v(E) \cong A \sqrt{E(\text{Mev})} \text{ cm/nsec}$, $A=1.38227$; for photos $v(E) = 29.97925 \text{ cm/nsec}$. The integrals in Eq. (5.3) can be calculated exactly if $T^q(t) = \delta(t)$, or $T^q(t)$ is given by the histogram:

$$T^q(t) = \sum_{k=1}^K A_k^q T_k^q(t) \quad (5.4)$$

with

$$T_k^q(t) = \begin{cases} 1, & t_-^k \leq t \leq t_+^k \\ 0, & t < t_-^k \text{ and } t > t_+^k \end{cases}, \quad 0 \leq t_-^1 < t_+^1 = t_-^2 < t_+^2 = t_-^3 < \dots < t_+^k$$

For neutrons the formula for $I_{q,i,s}^n(\mu_0)$ in the case of instantaneous pulsed source with $T^q(t) = \delta(t)$ is:

$$I_{\text{neutr.}}^n(\mu_0) = \frac{2}{n A^2 V_i \Delta t_s \Delta E_q} \left\{ \mu_0^n \left[t_{s+1/2}^n B_{2+n}(v_{\min}, \tilde{v}^{++}) - \right. \right.$$

$$-t_{s-1/2}^n \mathbf{B}_{2+n}(\tilde{v}^-, v_{\max})] + \left[r_{i+1/2}^n \mathbf{B}_{1+n}(\tilde{v}^{++}, v_{\max}) - r_{i-1/2}^n \mathbf{B}_{1+n}(v_{\min}, \tilde{v}^{--}) \right] \Big\} \dots (5.5)$$

with

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{1}{k} (\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k), \quad v_{q\pm 1/2} = A \sqrt{E_{q\pm 1/2}}, \\ v_{\max} &= \min(v_{q-1/2}, v^{+-}), \quad v_{\min} = \max(v_{q+1/2}, v^{-+}), \\ \tilde{v}^{++} &= \max(v_{\min}, \min(v^{++}, v_{\max})), \quad \tilde{v}^{--} = \max(v_{\min}, \min(v^{--}, v_{\max})), \\ v^{++} &= \frac{r_{i+1/2}}{t_{s+1/2} \mu_0}, \quad v^{--} = \frac{r_{i-1/2}}{t_{s-1/2} \mu_0}, \quad v^{+-} = \frac{r_{i+1/2}}{t_{s-1/2} \mu_0}, \quad v^{-+} = \frac{r_{i-1/2}}{t_{s+1/2} \mu_0}. \end{aligned}$$

If $t_{s-1/2} = 0$ we put $v_{\max} = v^{--} = v_{q-1/2}$.

For photons and $\mathbf{T}^q(\mathbf{t}) = \delta(\mathbf{t})$ the formula for $\mathbf{I}_{q,i,s}^n(\mu_0)$ is simpler:

$$\mathbf{I}_{\gamma}^n(\mu_0) \equiv \frac{1}{V_i \Delta t_s} \mathbf{B}_n(a_{i-1/2}^3, a_{i+1/2}^3), \quad (5.6)$$

with

$$\begin{aligned} a_{i+1/2}^3 &= \max(a_{i-1/2}, \min(r_{i+1/2}, t_{s+1/2} \mu_0 v)), \\ a_{i-1/2} &= \max(r_{i-1/2}, t_{s-1/2} \mu_0 v). \end{aligned}$$

If $\mathbf{T}^q(\mathbf{t})$ is given by the histogram (5.4) in the case of neutron source the formula for $\mathbf{I}_{q,i,s}^n(\mu_0)$ is rather complicated and we do not present it here. For photons we have:

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{\gamma, \mathbf{T}}^n(\mu_0) &= \frac{2}{V_i \Delta t_s} \sum_{k=1}^K A_k^q \left\{ (t_+^k - t_{s-1/2}) \mathbf{B}_n(r_{\min}, \tilde{r}^{--}) + \right. \\ &\left. (t_+^k - t_-^k) \mathbf{B}_n(\tilde{r}^{--}, \tilde{r}^{++}) + (t_{s+1/2}^k - t^k) \mathbf{B}_n(\tilde{r}^{++}, r_{\max}) + \right. \\ &\left. \frac{1}{\mu_0 v} \left[\mathbf{B}_{n+1}(r_{\min}, \tilde{r}^{--}) - \mathbf{B}_{n+1}(\tilde{r}^{++}, r_{\max}) \right] \right\} \Theta(r_{\max} - r_{\min}) \quad (5.7) \end{aligned}$$

with

$$\begin{aligned} r_{\min} &= \max(r_{i-1/2}, r^{-+}), \quad r_{\max} = \min(r_{i+1/2}, r^{+-}), \quad \Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}, \\ \tilde{r}^{--} &= \max(r_{\min}, \min(r^{--}, r_{\max})), \quad \tilde{r}^{++} = \max(r_{\min}, \min(r^{++}, r_{\max})), \\ r^{++} &= \mu_0 v (t_{s+1/2} - t_+^k), \quad r^{--} = \mu_0 v (t_{s-1/2} - t_-^k), \\ r^{+-} &= \mu_0 v (t_{s+1/2} - t_-^k), \quad r^{-+} = \mu_0 v (t_{s-1/2} - t_+^k). \end{aligned}$$

The typical change time Δt_{sc} for a scattered component of radiation ψ_{sc} is defined not only by a source. In an essential way Δt_{sc} depends on a scattering law in a media, on a distance to a source and the function $\nu(E)$. Usually Δt_{sc} essentially exceeds typical change times of ψ_0 . There is a number of problems for which a detailed form of radiation pulse $\psi = \psi_0 + \psi_{sc}$ is needed. To solve this we use a relatively crude mesh to compute ψ_{sc} and a sufficiently fine time mesh for supplementary calculation of local values of ψ_0 at appropriate space points. In addition ROZ-W.2 can use a more detailed group structure for definition of F^q and $T^q(t)$ in Eq. (5.1) that is used in the employed cross-section library.

In ROZ-W.2 two radiation fronts that move from a source to the region boundaries are specially taken in to account. For a few spatial cells ahead of the supplementary equation $\psi^+ = (1 + P_r)\psi - P_r \psi^-$ in system (2.3) is changed by $\psi^+ = 0$. Nearly the same condition was used in TDA.¹⁶

Such a procedure gives a computational gain in the number of the mesh cells computed. But, unfortunately, in some problems it is a source of additional errors, especially in space distributions.

VI. NUMERICAL EXAMPLES

To establish the accuracy of the AWDD scheme calculations and usefulness of the selection of the unscattered component of radiation for pulsed source problems by formulas, derived in Sec. V, two suitable benchmark solutions^{17,18} accurate to four significant figures for mono energy problem are available. The first involves an isotropic pulsed point source (5.1b) with $T^q(t) = \delta(t)$ and $F^q = 1$ in an infinite isotropically scattering medium with $c = \sigma_s / \sigma = 1$. The second benchmark problem deals with an isotropic pulsed line source (5.1c) with $T^q(t) = \delta(t)$ and $F^q = 1$ in the same medium.

In the vicinity of radiation front where the fluxes vary strongly, comparing the ROZ-W.2 results with the benchmark solutions is complicated. Really, the AWDD scheme computes cell-averaged flux values, whereas the benchmark results^{17,18} are available for local flux values at discrete points.

TABLE 1

Comparison of the Scattered Flux Calculated by the AWDD scheme in S_{12} Approximation for Different Steps in Time Δt with the Benchmark for an Isotropic Pulsed Point Source at $r=0$ in a Nonabsorbing Infinite Medium ($c=1$)

(Time, t , is dimensionless and r is in mean-free-paths.)

t	r					
	1	2	3	4	5	6
3.0	2.45-2	9.67-3 ^a				
	2.19-2	1.01-2 ^b				
	2.20-2	1.02-2 ^c				
5.0	1.08-2	6.82-3	3.02-3	7.43-4		
	1.03-2	6.61-3	2.92-3	8.91-4		
	1.03-2	6.57-3	2.96-3	8.56-4		
9.0	4.42-3	3.44-3	2.24-3	1.21-3	5.32-4	1.84-4
	4.32-3	3.38-3	2.21-3	1.21-3	5.36-4	1.90-4
	4.31-3	3.35-3	2.19-3	1.19-3	5.30-4	1.86-4
13.0	2.54-3	2.14-3	1.60-3	1.06-3	6.13-4	3.11-4
	2.50-3	2.11-3	1.57-3	1.04-3	6.10-4	3.10-4
	2.49-3	2.09-3	1.56-3	1.04-3	6.04-4	3.09-4
45.0	3.92-4	3.73-4	3.43-4	3.05-4	2.62-4	2.18-4
	3.89-4	3.70-4	3.41-4	3.03-4	2.61-4	2.17-4
	3.86-4	3.67-4	3.38-4	3.01-4	2.59-4	2.15-4

^aAWDD scheme, $\Delta t=2/3$, cell-averaged flux value, read as $9.67 \cdot 10^{-3}$.

^bAWDD scheme, $\Delta t=2/9$.

^cBenchmark, local flux value.

In our calculations the infinite medium problems were approximated by the finite sufficiently large region: $0 < r < 14$. (The radius r is measured in mean-free-paths, the time t is dimensionless, $\nu = 1$.) This region was divided into three space zones: 0.5, 3.5 and 10.0 in size and sufficiently dense space mesh: 20, 20 and 40 intervals per space zone correspondingly was used. To calculate the flux values at desirable space points the linear interpolation in space was applied. In time variable the grids with constant step $\Delta t = 2/3$ and $\Delta t = 2/9$ were used. For these meshes we can compare the calculated cell-averaged flux values with the benchmark values at some mid-points of time intervals without interpolation. (In practical problems a logarithmic grid in time is usually used.)

The calculations were performed with the pointwise relative convergence criterion 10^{-3} and for values of monotonization parameters in Eqs (2.12) and (2.13) $b_t = b_r = 2$. As seen in Tables 1 and 2 the agreement is quite good.

TABLE 2

Comparison of the Scattered Flux Calculated by the AWDD scheme in S_{10} Approximation for Different Steps in Time Δt with the Benchmark for an Isotropic Pulsed Line Source at $r=0$ in a Nonabsorbing Infinite Medium ($c=1$)

(Time, t , is dimensionless and r is in mean-free-paths.)

t	r					
	1	2	3	4	5	6
3.0	7.62-2	2.70-2 ^a				
	7.19-2	3.06-2 ^b				
	7.43-2	3.20-2 ^c				
5.0	4.65-2	2.87-2	1.21-2	2.80-3		
	4.59-2	2.84-2	1.21-2	3.28-3		
	4.60-2	2.86-2	1.23-2	3.26-3		
9.0	2.62-2	2.02-2	1.30-2	6.94-3	2.99-3	1.01-3
	2.60-2	2.01-2	1.30-2	6.95-3	3.03-3	1.04-3
	2.60-2	2.01-2	1.30-2	6.98-3	3.03-3	1.03-3
45.0	5.29-3	5.03-3	4.62-3	4.11-3	3.54-3	2.94-3
	5.28-3	5.02-3	4.61-3	4.10-3	3.53-3	2.93-3
	5.29-3	5.03-3	4.62-3	4.11-3	3.54-3	2.94-3

^aAWDD scheme, $\Delta t=2/3$, cell-averaged flux value, read as $2.70 \cdot 10^{-2}$.

^bAWDD scheme, $\Delta t=2/9$.

^cBenchmark, local flux value.

The case of a nonabsorbing medium $c = 1$ is the simplest one for the AWDD scheme, as for this problem the width of the scattering component of radiation pulse essentially exceeds the half-width of the averaged unscattered component.

In Figs. 3 and 4 the results of calculations by the AWDD scheme with the monotization parameters in Eqs. (2.12) and (2.13) $b_t = b_r = 1, 2$ and 3 for the scattered flux due to an instantaneous isotropical pulsed point source at $r = 0$ in an infinite medium with $c = 0.9$ and $c = 0.3$ at t point $r = 6$ are compared with the benchmark results¹⁷. As is seen in Figs. 3 and 4 the agreement is also quite good. Acceptable values of monotization parameter b that practically prevents the violations in monotonicity of solution are located in the interval: $2 \leq b \leq 3$.

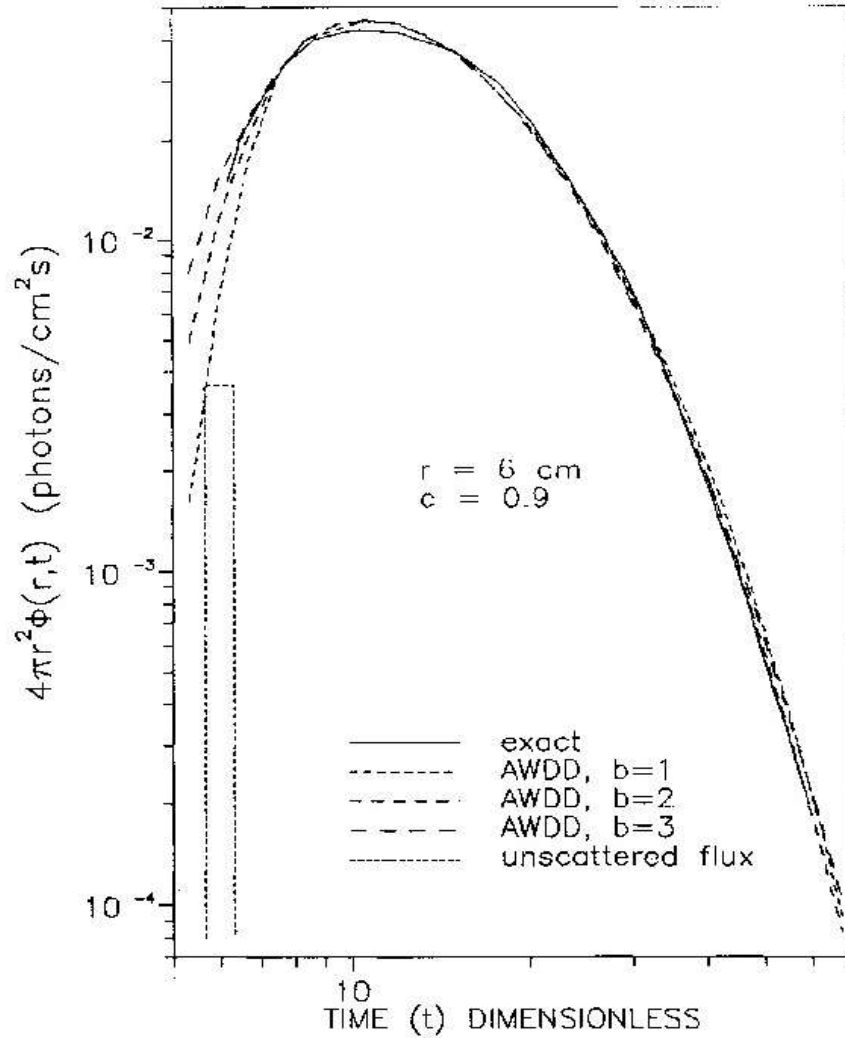


FIG.3. Comparison of the scattered component calculated by the AWDD scheme for different values of monotonization parameter b with the benchmark for an isotropical pulsed point source at $r=0$ in an infinite medium with $c=0.9$ at $r=6$ cm. The unscattered component is represented by a histogram.

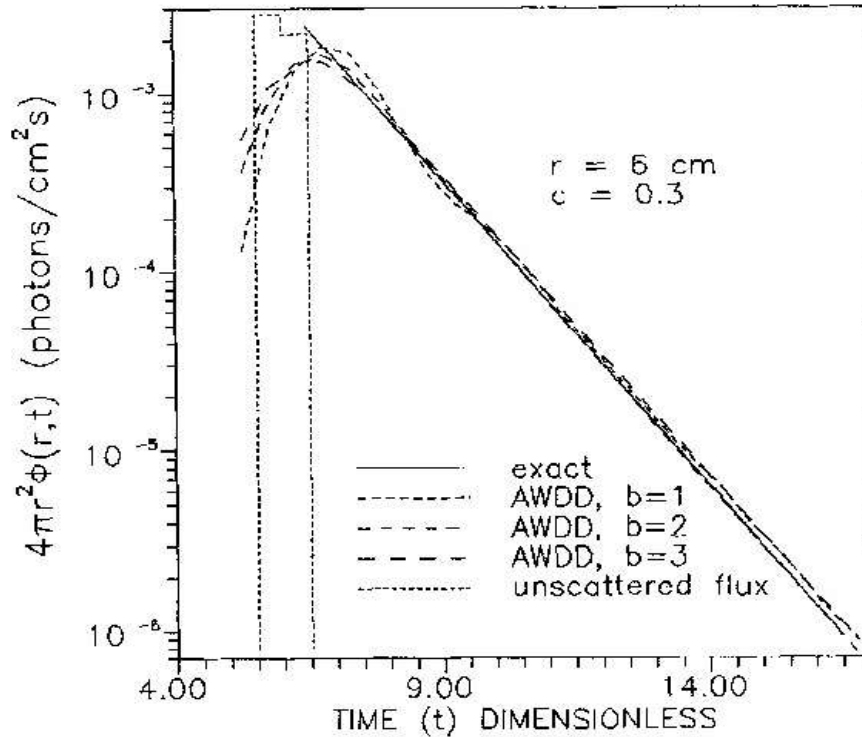


FIG.4. Comparison of the scattered component calculated by the AWDD scheme for different values of monotonization parameter b with the benchmark for an isotropical pulsed point source at $r=0$ in an infinite medium with $c=0.3$ at $r=6$ cm. The unscattered component is represented by a histogram.

VII. DISCUSSION

In this paper we consider a few numerical algorithms based on the WDD scheme that have proved to be effective for solving the time-dependent transport equation with pulsed sources.

In Sec. II we discussed the Adaptive WDD scheme. This is a suitable practical general geometry fix-up algorithm that combines the arithmetical simplicity and good accuracy with the possibility to damp unwanted flux oscillations. Our experience shows that this fix-up algorithm does not worsen the inner iterations convergence.

Of course, in comparison with nodal schemes, the AWDD scheme has essential numerical diffusion. But if it is used together with special tools for pulsed sources problems presented in Sec. V (especially the approach for deriving the unscattered component of radiation) this simple algorithm presents satisfactory accuracy for a wide class of applications.

The spectral stability analysis (Sec. III) gives us some insight to the explanation of the WDD scheme properties for different values of the weight coefficients.

In Sec. IV we outlined the S_2 rebalance method of acceleration of inner iterations consistent with the WDD scheme for anisotropic scattering time-dependent problems. This method is slightly more complicated than the P_1

synthetic method, but it gives good results for practical heterogeneous problems. We emphasize here that the approach used in Sec. IV to derive the consistence of the acceleration method with the WDD scheme approximation is quite general and can be used for other types of corrections and (or) difference approximations.

REFERENCES

1. W. F. Filippone and B. D. Ganopol, "Time-Dependent One-Dimensional Transport Calculations Using the Streaming Ray Method," *Nucl. Sci. Eng.*, 83, 366 (1983).
2. A. Badruzzaman, "A Nodal Method for Time-Dependent Transport Equation," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 56, 303 (1988).
3. A. Badruzzaman, "Finite-Moments Approaches to the Time-Dependent Boltzmann Equation," *Progress in Nuclear Energy*, 25, 127 (1991).
4. T. A. Germogenova, A. M. Voloschenko and A. V. Shwetsov, "The Adaptive Positive Nodal Method for the Transport Equation in Two-Dimensional Curvilinear Geometries," *Proc. of the PHYSOR-90, Marseille, France*, 23-27 April, 1990, vol. 2, p. XII-49.
5. M. Voloschenko and S. V. Gukov, "The ROZ-W.2 Time-Dependent One-Dimensional Discrete Ordinates Neutrons, Gamma-Rays and Charged Particles Transport Code," *Proc. Top. Mtg. Advances in Mathematics, Computations and Reactor Physics, Pittsburgh, USA, April 28 - May 2, 1991, VOL. 5*, p. 30.3 6-1.
6. M. Voloschenko, "Numerical Solution of the Time-Dependent Transport Equation with Pulsed Sources," *Ibid*, No. 4, 17 (1986).
7. A. M. Voloschenko and A. A. Dubinin, "The One-Dimensional Discrete Ordinates Code ROZ-6.3," *VANT, ser. Fizika i Tskhnika Yadernykh Reacforou*, No. 6, 30 (1984), in Russian.
8. L. P. Bass, A. M. Voloschenko and T. A. Germogenova, "Methods of Discrete Ordinates in Radiation Transport Problems," *Moscow, Keldysh Inst. Appl. Mathem., USSR Ac. of Sci.*, (1986), in Russian.
9. B. G. Carlson, "A Method of Characteristics and Other Improvements in Solution Methods for the Transport Equation," *Nucl. Sci. Eng.*, 61, 408 (1976).
10. W. A. Rhoades and W. W. Engle, "A New Weighted-Difference Formulation for Discrete Ordinates Calculations," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 27, 776 (1977).
11. E. W. Larsen, J. E. Morel and W. F. Miller, Jr., "Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes," *J. of Comp. Phys.*, 69, 283 (1987).
12. D. A. Bayuk and T. A. Germogenova, "Simplest Difference Schemes for Transport Equation in X-Y-Geometry and Fix-up Algorithms," *Preprint, Keldysh Inst. Appl. Math., USSR Ac. of Sci.*, No. 91 (1986), in Russian.
13. A. Badruzzaman, "Stability Analysis of Time-Dependent Transport Algorithms," *Proc. Top. Mtg. Advances in Mathematics, Computations and Reactor Physics, Pittsburgh, USA, April 28 - May 2, 1991, vol. 4*, 17.1 1-1.

14. A. A. Samarsky, "The Theory of Difference schemes." Moscow, Nauka, (1977), in Russian.
15. E. W. Larsen, "Unconditionally Stable Diffusion Acceleration of the Transport Equation," *Transp. Theory Stat. Phys.*, 11, 29 (1982).
16. W. W. Engle, F. R. Mynatt and R. S. Booth, "One-Dimensional Time-Dependent Discrete Ordinates," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 12, 400 (1969).
17. B. D. Ganopol, P. W. McKenty and K. L. Peddicord, "The Generation of Time-Dependent Neutron Transport Solution in Infinite Media," *Nucl. Sci. Eng.*, 64, 317 (1977).
18. B. D. Ganopol, "Solution of the One-Group Time-Dependent Neutron Transport Equation in an Infinite Medium by Polynomial Reconstruction," *Nucl. Sci. Eng.*, 92, 272 (1986).

Received: August 26, 1992

Revised: May 25, 1993

Accepted: June 29, 1993

ГРУБОСЕТОЧНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ. ЗАДАЧИ С СУЩЕСТВЕННЫМ ПОГЛОЩЕНИЕМ¹⁾

© 2001 г. Т. А. Гермогенова, О. В. Николаева

(125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМатем. РАН)
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.
2001, том 41, №4, с. 620-640

Рассматриваются сеточные аппроксимации краевых задач для стационарного односкоростного уравнения переноса в оптически плотном слое, отвечающие известным консервативным схемам (2-го-4-го порядков точности на густых сетках). Метод пограничных слоев сингулярной теории возмущений привлекается к построению грубосеточных аппроксимаций (с шагом, значительно превосходящим длину свободного пробега) в задачах с гладкими источниками. Предложены асимптотические краевые условия. Согласно полученным теоретическим оценкам и результатам методических расчетов, развитые грубосеточные алгоритмы обеспечивают высокую точность вне пограничных слоев.

ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование радиационных полей в протяженных областях с требуемыми сейчас в прикладных задачах полнотой и точностью оказывается весьма трудоемким. Обычно дискретизацией по угловым и энергетической переменным исходное уравнение переноса излучения сводится к системе дифференциальных уравнений, как правило, высокой степени жесткости. В последние годы для решения таких систем развиваются численные методы, ориентированные на использование грубых по пространственным переменным сеток, т.е. сеток с характерным размером ячеек Δ , значительно превышающим длину свободного пробега l (см. [1]-[3]). Сравнение расчетных результатов с существующими аналитическими данными показывает, что даже при гладких источниках такие методы не всегда обеспечивают необходимую точность расчета. Анализ вопросов разрешимости грубосеточных уравнений, их точности и устойчивости на основе традиционных теоретических подходов едва ли возможен, поскольку в них погрешности аппроксимации оцениваются величинами порядка $O((\Delta/l)^n)$, $n = 2, 3, \dots$, малыми лишь при $\Delta \ll l$.

В наших работах к исследованию как исходной задачи, так и ее грубосеточных аппроксимаций привлекается метод пограничных слоев теории сингулярных возмущений [4], [5]. В точной краевой задаче для

1) Работа выполнена при финансовой поддержке международного научно-технического центра (код проекта 115-95).

уравнения переноса с гладким источником в области диаметра $D \simeq 1$, характерный размер которой в длинах свободного пробега $\tau^* \simeq D/l$ велик (в реальных задачах он может превышать десятки и сотни длин свободного пробега), вводится малый параметр $\varepsilon = 1/\tau^* \simeq 1$. Асимптотическое приближение к точному решению при $\varepsilon \rightarrow 0$ представляется суммой регулярной (медленно меняющейся) и сингулярной (быстро убывающей с удалением от границ) компонент [6], [7]. Для каждой из них строится разложение по степеням параметра ε .

В работах [1] – [3], [8] – [10] исследовался широкий класс схем метода пространственных моментов (МПМ). Показано, что на густых сетках ($\Delta/\varepsilon < 1$) эти схемы, с высокой точностью аппроксимирующие решение в целом, хорошо передают обе компоненты асимптотических приближений. Однако на грубых сетках, где $\Delta \geq \varepsilon$, следует ожидать удовлетворительной аппроксимации лишь регулярной компоненты. Анализ грубосеточных приближений проводится нами для часто используемых схем МПМ: основных схем DD (Diamond Difference) и LM (Linear Moments), а также схем с весовыми параметрами (W-схем): SM (Step Moments), LD (Linear Discontinuous), WLD (Weighted Linear Discontinuous), WLM (Weighted Linear Discontinuous Moments) [2], [10]. В них расчетными величинами являются значения решения на гранях ячеек и пространственные моменты в каждой ячейке нулевого порядка (в DD-схеме) и нулевого и первого порядков (в остальных схемах). В этих схемах используются соотношения баланса нулевого и первого порядков в каждой ячейке, и на густых сетках они являются схемами 2-го-4-го порядков точности. Преимуществами этого семейства схем являются простота расчетных формул, возможность использования в едином расчетном аппарате схем различного порядка точности в зависимости от гладкости решения. Эти схемы, предложенные А.М. Волощенко как единственное семейство с двумя управляющими параметрами в задачах с плоской геометрией, затем были распространены на задачи с криволинейными и неоднородными геометриями [10],[2].

Опыт показывает, что на регулярных решениях грубосеточные варианты этих схем дают хорошие результаты. Однако в реальных задачах с сингулярностью точных решений в пограничных слоях, как правило, в расчетных результатах возникают осцилляции и сильные отклонения от точного решения во всей расчетной области. Использование специальным образом выбранных весовых параметров хотя и уменьшает амплитуду осцилляций, однако не всегда гарантирует приемлемую точность.

В настоящей работе развиваются грубосеточные (при $\Delta \geq \varepsilon$) алгоритмы расчета регулярных компонент асимптотических приближений к решению точной задачи. Важным моментом является использование асимптотических краевых условий, отвечающих краевым значениям регулярных компонент.

В данной работе рассматриваются задачи с существенным поглощением, в которых альbedo однократного рассеяния λ заметно меньше единицы. В этом случае спектр жесткий, все элементарные решения уравнения переноса

быстро убывают с удалением от граничных поверхностей, вырожденные исходная и сеточная задачи, возникающие при $\varepsilon \rightarrow 0$, однозначно разрешимы без дополнительных условий.

Рассмотрим простейшую форму уравнения переноса, отвечающую стационарным моноэнергетическим азимутально-симметричным задачам:

$$\mu \partial \Psi / \partial z + \sum_t \Psi(z, \mu) - \sum_s \hat{S}[\Psi(z, \mu)] = F(z), \quad 0 < z < Z, \quad -1 < \mu < 1. \quad (1)$$

Здесь функция $\Psi(z, \mu)$ определяет интенсивность излучения в точках z плоского слоя $(0, Z)$ в направлениях, составляющих угол $\arccos \mu$ с осью C , а функция $F(z)$ - изотропный внутренний источник. Предполагается, что величины \sum_t (полное сечение взаимодействия излучения с веществом) и \sum_s (сечение рассеяния) не зависят от z , а рассеяние изотропное:

$$\hat{S}[\Psi(z, \mu)] = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi(z, \mu) d\mu. \quad (2)$$

На граничных поверхностях задается угловое распределение входящего излучения:

$$\Psi(0, \mu) = B(\mu), \quad \Psi(Z, -\mu) = B(-\mu), \quad \mu > 0. \quad (3)$$

Общие свойства решений исходной задачи (1) – (3) в “приближении дискретных ординат” по угловой переменной [11], [10], используемые в настоящей работе, обсуждаются в разд. 1. Чтобы оценить точность рассчитываемых величин в рассматриваемом классе схем (значений на гранях ячейки и первых двух моментов), в разд. 2 построено первое асимптотическое приближение к решению исходной задачи в оптически плотном слое при существенном поглощении. В разд. 3 приведены сеточные уравнения, определяющие схемы рассматриваемого класса (LM, WLM, LD, SM, WLD и DD), и вводятся понятия регулярных и сингулярных сеточных функций. Далее (разд. 4) изучены свойства сеточных задач с асимптотическими краевыми условиями. Предложены грубосеточные алгоритмы расчета регулярных компонент, и получены теоретические оценки их точности. Приведены результаты методических расчетов, демонстрирующие возможности построенных алгоритмов (разд. 5).

1. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ

Для представления интеграла столкновений (2) в уравнении переноса (1) воспользуемся гауссовой квадратурной формулой порядка $2M$ с узлами μ_m и весами w_m , удовлетворяющими условиям

$$1 > \mu_1 > \dots > \mu_M > 0, \quad \mu_{-m} = -\mu_m, \quad w_{-m} = w_m, \quad \mu_0 = w_0 = 0, \quad (1.1)$$

$$\sum_{m=-M}^M \mu_m^{2\nu} w_m = 2/(2\nu + 1), \quad \nu = 0, 1, \dots, 2M - 1, \quad M > 1.$$

Положим $\Psi_m(z) = \Psi(z, \mu_m)$. Дискретизованную по угловой переменной задачу (1)-(3) запишем в виде

$$\hat{T}[\Psi_m(z)] = \mu_m d\Psi_m / dz + \sum_t \Psi_m(z) - \sum_s \hat{S}[\Psi_m(z)] = F(z), \quad (1.2)$$

$$\hat{S}[\Psi_m(z)] = \frac{1}{2} \sum_{m=-M}^M \Psi_m(z) w_m, \quad (1.3)$$

$$\Psi_m(0) = B_m, \quad \Psi_{-m}(Z) = B_{-m}, \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (1.4)$$

Будем полагать, что сечения \sum_t и \sum_s удовлетворяют условию

$$\sum_t > \sum_s > 0, \quad (1.5)$$

А внутренний источник $F(z)$ является гладкой функцией:

$$F(z) \in C^J[0, Z], \quad J > 0. \quad (1.6)$$

Задача (1.1) – (1.6) однозначно разрешима, и свойства ее решений хорошо изучены (см., например, монографии [11]-[13]). Отметим некоторые результаты, используемые в данной работе.

1. Справедливы принципы максимума и минимума и вытекающие из них теоремы сравнения и оценки [7],[13],[14]. В частности, в задачах с изотропным рассеянием справедливы неравенства

$$\bar{\Psi} = \sup_{z,m} |\Psi_m(z)| = \max[\bar{F} / (\sum_t - \sum_s), \bar{B}], \quad (1.7)$$

где

$$\bar{F} = \sup_z |F(z)|, \quad \bar{B} = \max_m |B_m|.$$

2. Элементарные решения однородного уравнения, соответствующего (1.2), при условии (1.5) могут быть представлены в виде

$$\Phi_m^i(z) = \exp(-k_i \sum_t z) \varphi_{im}, \quad \Phi_m^{-i}(z) = \exp[-k_i \sum_t (Z - z)] \varphi_{-im}, \quad (1.8)$$

где $i = 1, 2, \dots, M$, величины k_i – положительные собственные значения, а $\varphi_{im} = 1 / (1 - k_i \mu_m)$, $\varphi_{-im} = \varphi_{i-m}$ – соответствующие собственные функции характеристического уравнения

$$(1 - k_i \mu_m) \varphi_{im} = \lambda \hat{S}[\varphi_{im}], \quad 0 < h = \sum_s / \sum_t < 1. \quad (1.9)$$

Все значения k_i простые, и выполнены оценки

$$\sqrt{1 - \lambda} < k_1 < \min[\sqrt{3(1 - \lambda)} / \lambda, 1 / \mu_1], 1 / \mu_{i-1} < k_i |_{i>1} < 1 / \mu_i, k_{-i} = -k_i \quad (1.10)$$

Действительно, величины k_i^2 являются корнями уравнения

$$Y(k^2) \equiv 1 - \lambda \sum_{m=1}^M w_m / (1 - k^2 \mu_m^2) = 0. \quad (1.11)$$

Справедливы соотношения

$$Y(0) = 1 - \lambda > 0, \quad Y(k^2) \rightarrow \pm\infty \text{ при } k^2 \rightarrow 1/\mu_m^2 \pm 0,$$

$$dY(k^2)/dk^2 \Big|_{k^2 \neq 1/\mu_m^2} = -\lambda \sum_{m>0} w_m \mu_m^2 / (1 - k^2 \mu_m^2)^2 < 0.$$

Корни k_i^2 при $i > 1$ расположены между полюсами функции $Y(k^2)$. Отсюда следуют оценки (1.10) для $k_i \Big|_{i>1}$, а также неравенства

$$k_1^2 \mu_m^2 < 1 \quad \forall m. \quad (1.12)$$

Оценка (1.10) снизу для k_1 при $k_1 \geq 1$ очевидна, а при $k_1 < 1$ следует из цепочки выражений

$$1 = \lambda \sum_{m=1}^M w_m / (1 - k_1^2 \mu_m^2) < \lambda \sum_{m=1}^M w_m / (1 - k_1^2) = \lambda / (1 - k_1^2).$$

Оценка (1.10) для k_1 сверху опирается на (1.12) и соотношения

$$\lambda^{-1} = \sum_{m=1}^M w_m / (1 - k_1^2 \mu_m^2) > \sum_{m=1}^M w_m / (1 + k_1^2 \mu_m^2) = 1 + k_1^2 / 3.$$

Функции φ_{im} нормированы соотношениями

$$\frac{\lambda}{2} \sum_{m=-M}^M \varphi_{im} w_m = 1, \quad i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M, \quad (1.13)$$

и ортогональны с весом μ_m :

$$\sum_{m=-M}^M \mu_m \varphi_{im} \varphi_{jm} w_m = \delta_{ij} N_i, \quad (1.14)$$

где $\delta_{ii} = 1$, $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$, $N_i = -N_{-i} \neq 0$.

3. Чтобы найти аналитическое представление решения задачи (1.1) – (1.6), разложим величины $\Psi_m(z)$ и $F(z)$ по собственным функциям уравнения (1.9):

$$\Psi_m(z) = \sum_{i=-M}^M \psi_i(z) \varphi_{im}, \quad F(z) = \mu_m \sum_{i=-M}^M f_i(z) \varphi_{im}, \quad (1.15)$$

где $\psi_0(z) \equiv 0$, $f_0(z) \equiv 0$, а при $i \neq 0$, согласно (1.13) и (1.14),

$$\psi_i(z) = \sum_{m=-M}^M \mu_m \Psi_m(z) \varphi_{im} w_m / N_i, \quad (1.16)$$

$$f_i(z) = F(z) \sum_{m=-M}^M \varphi_{im} w_m / N_i = 2F(z) / (N_i \lambda).$$

Подставляя разложения (1.15) в уравнение (1.2) и используя соотношения (1.9), приходим к системе уравнений для функций $\psi_i(z)$:

$$d\psi_i/dz + k_i \sum_t \psi_i(z) = f_i(z) = 2F(z)/(N_i \lambda), \quad i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M.$$

Решение этой системы при краевых условиях

$$\psi_i(0)|_{i>0} = b_i, \quad \psi_i(Z)|_{i<0} = b_i$$

может быть представлено в виде

$$\psi_i(z)|_{i>0} = b_i \exp[-k_i \sum_t z] + \frac{2}{\lambda} \int_0^z F(t) \exp[k_i \sum_t (t-z)] dt / N_i, \quad (1.17)$$

$$\psi_i(z)|_{i<0} = b_i \exp[k_i \sum_t (Z-z)] - \frac{2}{\lambda} \int_z^Z F(t) \exp[k_i \sum_t (t-z)] dt / N_i.$$

Подставив следующие отсюда выражения для $\psi_i(Z)$ и $\psi_i(0)$ в разложение (1.15) и краевые условия (1.4), найдем систему уравнений для определения коэффициентов b_i :

$$B_m = \begin{cases} \sum_{j>0} [b_j \varphi_{jm} + (b_{-j} - d_{-j}) \varphi_{-jm}], & m > 0, \\ \sum_{j>0} [a_j (b_j + d_j) \varphi_{jm} + b_{-j} \varphi_{-jm}], & m < 0, \end{cases} \quad (1.18)$$

где

$$d_j = 2 \int_0^Z F(z) \exp(k_i \sum_t z) dz / (N_j \lambda), \quad a_j = \exp(-k_j \sum_t Z).$$

Система (1.18) имеет единственное решение в силу единственности решения исходной задачи (1.1)–(1.6).

4. В задачах для слоев большой оптической толщины $\tau^* = \sum_t Z$ введем малый параметр $\varepsilon = 1/\tau^*$ и заменой $\tilde{z} = z/Z$ получим для $\tilde{\Psi}_m(\tilde{z}) = \Psi_m(z)$ уравнение (1.2) с источником $\tilde{F}_m(\tilde{z}) = ZF_m(z)$ и коэффициентами $\tilde{\Sigma}_t = Z\Sigma_t = 1/\varepsilon$ и $\tilde{\Sigma}_s = \lambda/\varepsilon$. В таких задачах, как исходное, будем поэтому рассматривать уравнение (1.2) при

$$\Sigma_t = \sigma/\varepsilon, \quad \Sigma_s = \sigma_s/\varepsilon, \quad 0 < \sigma_s < \sigma, \sigma \approx 1, Z \approx 1, \varepsilon \ll 1. \quad (1.19)$$

В анализе задачи (1.1)–(1.6) в этих условиях существенным моментом является определение регулярной функции. Функцию $\Psi_m(z)$ будем называть регулярной, если $\Psi_m(z) \in C^1[0, Z]$ и

$$\forall(m, z): d\Psi_m(z)/dz = O(1) \sup_z |\Psi_m(z)| \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.20)$$

Не обладающие этим свойством функции будем называть сингулярными.

В задаче без внутреннего источника ($F(z) \equiv 0$) решение задачи (1.1)-(1.6) есть линейная комбинация элементарных решений:

$$\Psi_m(z) = \sum_{i=1}^M [b_i \Phi_m^i(z) + b_{-i} \Phi_m^{-i}(z)], \quad (1.21)$$

где коэффициенты $b_{\pm i}$ определяются уравнениями (1.18) при $d_j \equiv 0$.

Разделив элементарные решения $\Phi_m^i(z)$ на регулярные и сингулярные, функцию (1.21) представим в виде суммы ее регулярной и сингулярной компонент: $\Psi_m(z) = \Psi_m^{reg}(z) + \Psi_m^{sing}(z)$

В задачах с внутренним источником ($F(z) \not\equiv 0$) можно построить асимптотические приближения $\Psi_m^n(z)$ порядка n к решению задачи (1.1)-(1.6), удовлетворяющие оценке

$$\Psi_m^n(z) - \Psi_m(z) = O(\varepsilon^{n+1}) \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.22)$$

Такое приближение представляется суммой регулярной и сингулярной компонент $\Psi_m^n(z) = \Psi_m^{reg,n}(z) + \Psi_m^{sing,n}(z)$. Функция $\Psi_m^{reg,n}(z)$, так же как в [7] для задач без дискретизации по угловой переменной μ , ищется в виде разложения

$$\Psi_m^{reg,n}(z) = \sum_{i=1}^n \psi_m^k(z) \varepsilon^k,$$

коэффициенты $\psi_m^k(z)$ которого определяются через значения функции $F(z)$ и ее производных $d^j F(z) / dz^j$, $j = 1, 2, \dots, k$.

Поскольку рассматриваемые далее сеточные схемы позволяют рассчитывать в каждой ячейки лишь значения нулевого и первого моментов, определяющие средние значения решения и его первой производной, мы ограничимся построением первого асимптотического приближения

$\tilde{\Psi}_m^1(z) \equiv \Psi_m^1(z)$, удовлетворяющего оценке (1.22) при $n=1$:

$$\tilde{\Psi}_m^1(z) - \Psi_m(z) = O(\varepsilon^2) \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.23)$$

2. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

В задачах с существенным поглощением мы считаем альbedo однократного рассеяния λ удовлетворяющим условию

$$1 - \lambda \asymp 1 \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (2.1)$$

Внутренний и граничные источники нормируются таким образом, чтобы при $\varepsilon \rightarrow 0$ для решения задачи (1.1)–(1.6) была справедлива оценка $\bar{\Psi} \asymp 1$. В соответствии с (1.7) и (1.19) положим

$$F(z) = Q(z)/\varepsilon, \quad (2.2)$$

$$\bar{B} = \max_m |B_m| = O(1), \quad \bar{Q} = \sup_z |Q(z)| \asymp 1 \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad (2.3)$$

где $Q(z)$ – регулярная функция, т.е.

$$dQ(z)/dz = O(1)\bar{Q} \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (2.4)$$

Из (1.10) следует, что $k_i \asymp 1$ при всех $i > 1$, и поэтому в условиях (1.19) все функции (1.8) оказываются сингулярными:

$$\forall i: \sup_z |d\Phi_m^i(z)/dz| / \sup_z |\Phi_m^i(z)| = |k_{\pm i}\sigma/\varepsilon| \asymp 1/\varepsilon \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

В задаче без внутреннего источника вследствие сингулярности всех элементарных решений $\Phi_m^{\pm i}(z)$ функция (1.21) сингулярная. Для всех m и z справедливо неравенство (см.[13])

$$|\Psi_m(z)| \leq \bar{B} \max\{\exp[-(\Sigma_t - \Sigma_s)z], \exp[-(\Sigma_t - \Sigma_s)(Z - z)]\}. \quad (2.5)$$

Для задач с внутренним источником справедлива

Теорема 1. Пусть $Q(z) \in C^2[0, Z]$, выполнены условия (1.19), (2.1) – (2.4) и $d^2Q(z)/dz^2 = O(1)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\tilde{\Psi}_m(z) = \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) + \tilde{\Psi}_m^{sing}(z), \quad \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = \Psi^0(z) + \varepsilon\psi_m^1(z),$$

где

$$\psi^0(z) = Q(z)/[\sigma(1 - \lambda)], \quad \psi_m^1(z) = (-\mu_m/\sigma)d/dz\psi^0(z), \quad (2.6)$$

а функция $\tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ есть решение задачи

$$\begin{aligned} \hat{T}\tilde{\Psi}_m^{sing}(z) &= 0, \\ \tilde{\Psi}_m^{sing}(0)|_{m>0} &= B_m - \tilde{\Psi}_m^{reg}(0), \quad \tilde{\Psi}_m^{sing}(Z)|_{m<0} = B_m - \tilde{\Psi}_m^{reg}(Z). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Тогда функция $\tilde{\Psi}_m(z)$ удовлетворяет оценке (1.23) т.е. является первым асимптотическим приближением к решению задачи (1.1)–(1.6).

Действительно, разность $E_m(z) = \Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m(z)$ удовлетворяет краевой задаче

$$\hat{T}[E_m(z)] = -\hat{\Delta}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)], \quad E_m(0)|_{m>0} = E_m(Z)|_{m<0} = 0, \quad (2.8)$$

где $\hat{\Delta}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] = \hat{T}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] - Q(z)/\varepsilon = d_m^{-1}(z)/\varepsilon + d_m^0(z) + d_m^1(z)\varepsilon$ при

$$d_m^{-1}(z) = (\sigma - \sigma_s)\psi^0(z) - Q(z), \quad d_m^1(z) = \mu_m \frac{d}{dz}\psi_m^1(z),$$

$$d_m^0(z) = \mu_m \frac{d}{dz}\psi^0(z) + \sigma\psi_m^1(z) - \sigma_s \hat{S}[\psi_m^1(z)].$$

В условиях теоремы 1, $d_m^k(z) \equiv 0$ для $k=-1$ и при $\varepsilon \rightarrow 0$ имеем

$$\psi^0(z) = O(1), \quad \psi_m^1(z) = O(1), \quad d/dz\psi^0(z) = O(1), \quad d/dz\psi_m^1(z) = O(1),$$

т.е. $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ удовлетворяет условию регулярности (1.20) и

$\hat{\Delta}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] = O(\varepsilon)$. Используя неравенство (1.7) для решения задачи (2.8), получаем оценку (1.23). Теорема доказана.

Следствие 1. При $\varepsilon \rightarrow 0$ справедливы оценки

$$\sup_{m,z} |\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)| \asymp \bar{Q} \asymp 1, \quad (2.9)$$

$$\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = O(\varepsilon^2 + \exp[-\sigma(1-\lambda)z/\varepsilon] + \exp[-\sigma(1-\lambda)(Z-z)/\varepsilon]).$$

Последнее соотношение вытекает из равенства $\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = O(\varepsilon^2) + \tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ и оценки (2.5) для $\tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ как для решения задачи (2.7).

3. КОНСЕРВАТИВНЫЕ СХЕМЫ LM, WLM, LD, WLD, SM, DD

1. Пусть квазиравномерная сетка по пространственной переменной определена узлами $0 = z_{1/2} < \dots < z_{j+1/2} < \dots < z_{J+1/2} = Z, J \geq 2$, и

$$\Delta_j = z_{j+1/2} - z_{j-1/2}, \Delta = \max_j \Delta_j, \Delta_j \asymp \Delta \text{ при } \Delta \rightarrow 0, \text{ а параметр}$$

$$\delta = \max_j |\Delta_{j+1} - \Delta_j| \text{ характеризует неравномерность сетки. В}$$

рассматриваемых схемах расчетными величинами являются значения решения в узлах ячеек $\Psi_m(z_{j+1/2})$ и моменты

$${}^v[\Psi_m(z)]_j = (2v+1) \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \Psi_m(z) p_{vj}(z) dz / \Delta_j \quad \text{при } v=0,1 \quad (3.1)$$

относительно нулевого и первого полиномов Лежандра, отнесенных к j -й ячейке: $p_{0j}(z) = 1$, $p_{1j}(z) = 2(z - z_j) / \Delta_j$, $z_j = z_{j-1/2} + \Delta_j / 2$.

Компоненты решений сеточных задач, отвечающие значениям $\Psi_m(z_{j+1/2})$ и ${}^v[\Psi_m(z)]$, обозначим через $\Psi_{m,j+1/2}$ и ${}^v\Psi_{m,j}$ соответственно и для удобства изложения воспользуемся векторными обозначениями :

$$\begin{aligned} {}^v\Psi &= \{ {}^v\Psi_{m,j} : m = \pm 1, \dots, \pm M, j = 1, 2, \dots, J \} \quad v = 0, 1, \\ {}^e\Psi &= \{ \Psi_{m,j+1/2} : m = \pm 1, \dots, \pm M, j = 0, 1, \dots, J \} \quad \Psi = \{ {}^0\Psi, {}^1\Psi, {}^e\Psi \}, \\ {}^v\hat{\mathbf{P}}\Psi_m(z) &= \{ {}^v[\Psi_m(z)]_j : m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M, j = 1, 2, \dots, J \}, \\ {}^e\hat{\mathbf{P}}\Psi_m(z) &= \{ \Psi_m(z_{j+1/2}) : m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M, j = 0, 1, \dots, J \}, \\ \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] &= \{ {}^0\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)], {}^1\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)], {}^e\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] \}. \end{aligned}$$

Рассматриваемые схемы опираются на соотношения баланса нулевого и первого порядков. Эти соотношения получают (см. [10]) интегрированием уравнения (1.2) в j -й ячейке с весовыми функциями $p_{0j}(z)$, $p_{1j}(z)$ при $J = 1, 2, \dots, J, m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M$:

$${}^0\hat{T}_{mj}[\Psi] \equiv \mu_m {}^0\hat{t}_{mj}[\Psi] + \sum_t {}^0\Psi_{mj} - \sum_s \hat{S}[{}^0\Psi_{mj}] = {}^0F_j, \quad (3.2a)$$

$${}^1\hat{T}_{mj}[\Psi] \equiv \mu_m {}^1\hat{t}_{mj}[\Psi] + \sum_t {}^1\Psi_{mj} - \sum_s \hat{S}[{}^1\Psi_{mj}] = {}^1F_j. \quad (3.2б)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \hat{S}[{}^v\Psi_{mj}] &= \sum_{m=-M}^M w_m {}^v\Psi_{mj}/2, \quad {}^vF_j = {}^v[F(z)]_j, \\ {}^0\hat{t}_{mj}[\Psi] &= [\Psi_{m,j+1/2} - \Psi_{m,j-1/2}]/\Delta_j, \\ {}^1\hat{t}_{mj}[\Psi] &= 3[\Psi_{m,j+1/2} - \Psi_{m,j-1/2} - 2{}^0\Psi_{mj}]/\Delta_j \end{aligned} \quad (3.3)$$

Краевые условия запишем в виде

$$\Psi_{m,1/2} = B_m \text{ при } m > 0, \quad \Psi_{m,J+1/2} = B_m \text{ при } m < 0. \quad (3.2в)$$

Для замыкания системы уравнения (3.2) вводится (см. [10], [2]) аппроксимационное соотношение с весовыми параметрами p и q , связывающее величины ${}^v\Psi_{m,j}$, и $\Psi_{m,j+1/2}$ в каждой ячейке:

$$\hat{A}_{mj}[\Psi] \equiv \Psi_{m,j+s/2} - p\Psi_{m,j-s/2} - \hat{U}_{mj}[{}^v\Psi] = 0, \quad (3.2г)$$

где

$$\hat{U}_{mj}[{}^v\Psi] = (1-p){}^0\Psi_{mj} + s(p+q){}^1\Psi_{mj}, \quad s = \text{sign}(m). \quad (3.2д)$$

Параметрическое семейство схем (3.2) при

$$(p, q) \in \{ \{0 \leq p \leq 1, q = 1\} \cup \{p = 0, 1/3 \leq q < 1\} \cup \{p = -1, q = 1\} \} \quad (3.4)$$

содержит основные схемы LM ($p = q = 1$) и DD ($p = -1, q = 1$) в которых ${}^1\Psi_{mj} \equiv {}^1F_j \equiv 0$, и уравнения (3.2б) и (3.2г) эквиваленты, и W-схемы SM ($p = 0, q = 1/3$), WLD ($p = 0, q \in (1/3, 1)$), LD ($p = 0, q = 1$) и WLM ($p \in (0, 1), q = 1$).

Решение сеточных задач (3.2) осуществляется обычно методом итераций по столкновениям. Соответствующие алгоритмы для одномерных задач реализованы, например, в комплексе программ РОЗ-6.4 (см. [15]).

2. Обращаясь к задачам для оптически плоских сред ($\tau^* = \sum_t Z \geq 1$), введем малый параметр $\varepsilon = 1/\tau^*$ и рассмотрим задачу (3.2)–(3.4) в условиях (1.19) при $\varepsilon \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0$.

Для густых сеток, т.е. сеток с оптическими шагами $\sum_t \Delta_j = \sigma \Delta_j / \varepsilon < 1$, установлена однозначная разрешимость сеточных задач (3.2)–(3.4) и найдена оценка точности рассматриваемых схем при $\sum_t \Delta_j \rightarrow 0$ в зависимости от параметров p, q (см. [2], [10]). LM-схема оказывается схемой четвертого порядка, WLM и LD – третьего, SM, WLD и DD – второго. Для грубых сеток, где

$$\sum_t \Delta_j = \sigma \Delta_j / \varepsilon \geq 1, \quad (3.5)$$

в анализе точности схем существенным моментом является определение *регулярной* сеточной функции как функции, для которой при всех допустимых значениях m и j выполнены оценки

$${}^v \hat{t}_{mj}[\Psi] = O(1) \|\Psi\|, \quad v = 0, 1 \quad \text{при} \quad \Delta \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \varepsilon = O(\Delta). \quad (3.6)$$

Здесь и далее под нормой вектора понимается максимум модулей его компонент. Условия (3.6) эквивалентны соотношениям

$$\Psi_{m,j+1/2} - \Psi_{m,j-1/2} = O(\Delta) \|\Psi\|, \quad {}^0\Psi_{mj} - \Psi_{m,j-1/2} = O(\Delta) \|\Psi\|.$$

Они являются сеточным аналогом условия регулярности (1.20), поскольку в соответствии с определением моментов (3.1) имеем

$${}^v [d\Psi_m(z)/dz]_j = {}^v \hat{t}_{mj}[\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]], \quad v = 0, 1. \quad (3.7)$$

Сеточные функции, не удовлетворяющие (3.6), считаются *сингулярными*. В [8], [9] найдены аналитические представления элементарных решений сеточных систем (3.2)–(3.4), отвечающих LM- и DD-схемам, и показано, что на грубых сетках эти решения не аппроксимируют сингулярные элементарные решения исходной задачи. Следует ожидать, что на сетках (3.5) все схемы (3.2)–(3.4) могут удовлетворительно передать лишь регулярную компоненту решения.

4. СЕТОЧНЫЕ АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА РЕГУЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТ

1. Чтобы построить сеточную функцию Ψ^{reg} , аппроксимирующую регулярную компоненту $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$, представим ее суммой:

$$\Psi^{reg} = \sum_{k=0}^K \psi^k \varepsilon^k, \quad (4.1)$$

где $K=0$ для DD-схемы, $K=1$ для остальных схем, а коэффициенты ψ^k должны аппроксимировать функции $\psi_m^k(z)$. Такой выбор K обусловлен тем, что коэффициент $\psi_m^1(z)$ зависит от производной источника $Q'(z)$ и он может правильно передаваться только схемами, в число расчетных величин которых входят первые пространственные моменты.

Будем искать функцию Ψ^{reg} как приближение к решению сеточной задачи (3.2) с *асимптотическими краевыми условиями*, отвечающими граничным значениям регулярной компоненты первого асимптотического приближения $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$. Чтобы сформулировать эти условия, разобьем множество (3.4) параметров p и q на четыре непересекающихся подмножества:

$$g_{LM} = \{p, q : 1 - \Delta < p \leq 1, q = 1\}, \quad g_{WLM} = \{p, q : 0 < p \leq 1 - \Delta, q = 1\}, \\ g_{LD} = \{p = 0, 1/3 \leq q \leq 1\}, \quad g_{DD} = \{p = -1, q = 1\}.$$

Подмножество g_{LM} соответствует LM-схеме и WLM-схемам при $1 - p < \Delta$, g_{WLM} соответствует WLM-схемам при $1 - p \geq \Delta$, g_{LD} соответствует LD-, SM- и WLD-схемам, g_{DD} отвечает DD-схеме.

В качестве асимптотических краевых условий будем рассматривать условия (3.2в), в которых величины B_m заменены краевыми значениями регулярной компоненты $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z) \quad \forall (p, q) \in g_{LM}$:

$$B_m^{as} |_{m>0} = \psi^0(0) + \varepsilon \psi_m^1(0) \quad B_m^{as} |_{m<0} = \psi^0(Z) + \varepsilon \psi_m^1(Z) \quad (4.2a)$$

и величинами, аппроксимирующими эти значения при $(p, q) \notin g_{LM}$:

$$B_m^{as} |_{m>0} = {}^0[\psi^0(z)]_1 - [2 - q]^1[\psi^0(z)]_1 + \varepsilon \psi_m^1(0) \quad \forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD},$$

$$B_m^{as} |_{m<0} = {}^0[\psi^0(z)]_J + [2 - q]^1[\psi^0(z)]_J + \varepsilon \psi_m^1(Z) \quad \forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD},$$

$$B_m^{as} |_{m<0} = \psi^0(0), \quad B_m^{as} |_{m<0} = \psi^0(Z), \quad (p, q) \in g_{DD}$$

(4.26)

(оценки аппроксимации определяются ниже, см. соотношение (4.9б)).

В соответствии с (2.2) положим

$${}^v F_j = {}^v Q_j / \varepsilon, \quad {}^v Q_j = {}^v [Q(z)]_j.$$

Подставляя разложение (4.1) в уравнения (3.2а, б, г) и приравнявая выражения при равных степенях ε^k , получаем систему уравнений для определения коэффициентов Ψ^0 и Ψ^1 :

$$\sigma^v \psi_{mj}^0 - \sigma_s \hat{S}[\psi_{mj}^0] - {}^v Q_j = 0, \quad (4.3а)$$

$$\mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^0] + \sigma^v \psi_{mj}^1 - \sigma_s \hat{S}[\psi_{mj}^1] = 0, \quad (4.3б)$$

$$\psi_{m,j+s/2}^k - \hat{U}_{mj}[\psi_{mj}^k] - p\psi_{m,j-s/2}^k = 0, \quad s = \text{sign}(m), \quad (4.3в)$$

где $0 \leq v \leq K, 0 \leq k \leq K$.

Краевые условия для системы (4.3) следуют из (4.1) и (4.2)

$$\psi_{m,1/2}^0 \Big|_{m>0} = \begin{cases} \psi^0(0) & \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{DD}, \\ {}^0[\psi^0(z)]_1 - (2-q)^1[\psi^0(z)]_1 & \forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD}, \end{cases} \quad (4.4а)$$

$$\psi_{m,J+1/2}^0 \Big|_{m<0} = \begin{cases} \psi^0(Z) & \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{DD}, \\ {}^0[\psi^0(Z)]_J - (2-q)^1[\psi^0(z)]_J & \forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD}, \end{cases} \quad (4.4б)$$

$$\psi_{m,1/2}^1 \Big|_{m>0} = \psi_m^1(0), \psi_{m,J+1/2}^1 \Big|_{m<0} = \psi_m^1(Z) \quad \forall (p, q) \notin g_{DD}.$$

Найдем решение системы (4.3),(4.4). Из уравнений (4.3а) следует, что величины ${}^v \psi_{mj}^0$ не зависят от m :

$${}^v \psi_{mj}^0 = {}^v Q_j / [\sigma(1-\lambda)]. \quad (4.5а)$$

Применяя к уравнению (4.3б) оператор \hat{S} , получаем $\hat{S}[\psi_{mj}^0] = -\hat{S}[\mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^0]] / (\sigma - \sigma_s)$ и, следовательно,

$${}^v \psi_{mj}^1 = -\lambda \hat{S}[\mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^0]] / [\sigma(1-\lambda)] - \mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^0] / \sigma. \quad (4.5б)$$

Из уравнений (4.3в) находим соотношения

$$\psi_{m,j+s/2}^k = \hat{U}_{mj}[\psi_{mj}^k] + p\psi_{m,j-s/2}^k \quad \text{при } k = 0, 1. \quad (4.5в)$$

Таким образом, функция Ψ^{reg} определяется “упрощенной” сеточной задачей (уравнения (4.3) и краевые условия (4.4)), решение которой выражается соотношениями (4.5)

2. Оценки погрешности аппроксимации $\mathbf{E}^{reg} = \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m^{reg}(z)]$ содержатся в следующем утверждении.

Теорема 2. Пусть $Q(z) \in C^4[0, Z]$ и $\Delta \rightarrow 0, \varepsilon = O(\Delta)$. Тогда функция Ψ^{reg} аппроксимирует регулярную компоненту $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ первого асимптотического приближения со следующими погрешностями: при $(p, q) \in g_{LM}$

$${}^{\nu} \mathbf{E}^{reg} = O(\varepsilon \Delta^{2-\nu}), \quad {}^e \mathbf{E}^{reg} = O(\Delta^2 + \varepsilon);$$

при $(p, q) \in g_{WLM}$

$${}^0 \mathbf{E}^{reg} = O(\varepsilon) \min[\delta + \Delta^2, (1-p)\Delta], \quad {}^1 \mathbf{E}^{reg} = O(\varepsilon \Delta),$$

$${}^e E^{reg} = O(\Delta)[\Delta + \varepsilon/(1-p)];$$

при $(p, q) \in g_{LD}$

$${}^0 \mathbf{E}^{reg} = O(\delta + \Delta^2)(1-q + \Delta)\varepsilon/\Delta, \quad {}^1 \mathbf{E}^{reg} = O(\varepsilon)(1-q + \Delta),$$

$${}^e \mathbf{E}^{reg} = O(\Delta + \varepsilon)(1-q + \Delta);$$

при $(p, q) \in g_{DD}$

$${}^0 \mathbf{E}^{reg} = O(\varepsilon), \quad {}^e \mathbf{E}^{reg} = O(\delta + \Delta^2 + \varepsilon).$$

Для доказательства положим

$$\mathbf{E}^{reg} = \mathbf{E}^0 + \varepsilon \mathbf{E}^1, \quad (4.6)$$

где $\mathbf{E}^k = \hat{\mathbf{P}}[\psi_m^k(z)] - \psi^k$ при $k = 0, 1$. Так как следующие из (2.6) равенства ${}^{\nu}[\psi^0(z)]_j = {}^{\nu}Q_j / [\sigma(1-\lambda)]$ совпадают с (4.5a), то

$${}^{\nu} E_m^0 \equiv 0 \quad \forall (p, q). \quad (4.7)$$

Далее при выводе различных оценок используются соотношения, справедливые для произвольной функции $\Psi(z) \in C^4[0, Z]$:

$${}^0[\Psi(z)]_{j+i} = \Psi(z_{j+1/2}) - \Delta_{j+i}(-1)^i \Psi'(z_{j+1/2}) / 2 + \Delta_{j+i}^2 \Psi''(z_{j+1/2}) /$$

$$/ 6 - \Delta_{j+i}^3(-1)^i \Psi'''(z_{j+1/2}) / 24 + O(\Delta_{j+i}^4) \quad \text{при } i = 0, 1, \quad (4.8)$$

$${}^1[\Psi(z)]_{j+i} = \Delta_{j+i} \Psi'(z_{j+1/2}) / 2 - \Delta_{j+i}^2(-1)^i \Psi''(z_{j+1/2}) / 4 + 3\Delta_{j+i}^3 \Psi'''(z_{j+1/2}) /$$

$$/ 40 + O(\Delta_{j+i}^4) \quad \text{при } i = 0, 1.$$

Они получены из разложения подынтегральных выражений в (3.1) в ряд Тейлора в окрестности точек $z = z_{j+1/2}$.

Рассмотрим случай $m > 0$ (вариант $m < 0$ рассматривается аналогично). Индекс m будем опускать. Порядок аппроксимации краевыми условиями (4.4) граничных значений функций $\psi^k(z)$ оценивается с помощью соотношений (4.8):

$$E_{1/2}^0 = 0 \quad \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{DD}, \quad (4.9a)$$

$$E_{1/2}^0 = \frac{d}{dz} \psi^0(0) \Delta_1 (1-q) / 2 + (4-3q) \frac{d^2}{dz^2} \psi^0(0) \Delta_1^2 / 12 + O(\Delta_1^3), \quad (4.9b)$$

$\forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD}$

$$E_{1/2}^1 = 0 \quad \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{WLM} \cup g_{LD}. \quad (4.10)$$

Получим оценки величин $E_{j+1/2}^k$, $1 \leq j \leq J$, и ${}^v E_j^1$. Из уравнений (4.5б, в), (2.6) и (3.7) следуют соотношения

$$|{}^v E_j^1| \leq |{}^v \hat{t}_j[\mathbf{E}^0]| / [\sigma / (1 - \lambda)], \quad (4.11)$$

$$E_{j+1/2}^k = \hat{U}_j[{}^v \mathbf{E}^k] + \hat{A}_j[\hat{\mathbf{P}}[\psi^k(z)]] + pE_{j-1/2}^k. \quad (4.12)$$

Последнее равенство приводит к оценке

$$|E_{j+1/2}^k| \leq \max_i |\hat{U}_i[{}^v \mathbf{E}^k] + \hat{A}_i[\hat{\mathbf{P}}[\psi^k(z)]]| \min[J, 1/(1 - |p|)] + |p|^J |E_{1/2}^k|. \quad (4.13)$$

Используя (4.8), находим оценки величин $\hat{A}_j[\hat{\mathbf{P}}[\psi(z)]]$:

$$\begin{aligned} \hat{A}_j[\hat{\mathbf{P}}[\psi(z)]] &= \psi'(z_{j+1/2})\Delta_j(1-q)/2 + \psi''(z_{j+1/2})\Delta_j^2[1-p-3(1-q)]/12 + \\ &+ \psi'''(z_{j+1/2})\Delta_j^3(5-9q+6p)/120 + O(\Delta_j^4) = O(\Delta)[1-q+(1-p)\Delta+\Delta^2]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Учитывая тождество (4.7) и соотношения (4.9), (4.14), из неравенства (4.13) при $k=0$ получаем оценки

$$\|{}^e \mathbf{E}^0\| = \begin{cases} O(\Delta^2) & \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{WLM}, \\ (1-q+\Delta)O(\Delta) & \forall (p, q) \in g_{LD}, \\ O(\Delta), & \forall (p, q) \in g_{DD}. \end{cases} \quad (4.15a)$$

Оценку для DD-схемы можно уточнить, преобразуя (4.12) при $k=0$ с учетом (4.7) к виду

$$E_{j+1/2}^0 = A_j - A_{j-1} + E_{j-3/2}^0, \quad \text{где } A_j = \hat{A}_j[\hat{\mathbf{P}}[\psi^0(z)]].$$

Отсюда для j четного следуют неравенства

$$|E_{j+1/2}^0| \leq \max_i |A_i - A_{i-1}| j/2 + E_{1/2}^0,$$

которые вместе с (4.9) и (4.14) приводят к оценке

$$\|{}^e \mathbf{E}^0\| = O(\delta + \Delta^2), \quad (p, q) \in g_{DD}. \quad (4.15б)$$

Случай нечетного j рассматривается аналогично.

Далее, из (4.11), (4.12) при $k=0$ и из (4.7) следуют выражения

$$|{}^v E_j^1| = O(1) |{}^v \hat{t}_j[\mathbf{E}^0]| = O(1/\Delta) |A_j + [p - (-1)^v]E_{j-1/2}^0|. \quad (4.16)$$

Из (4.12) при $k=0$ и $0 \leq p < 1$ получаем

$$A_j - (1-p)E_{j-1/2}^0 = A_j - A_{j-1} + p[A_{j-1} - (1-p)E_{j-3/2}^0].$$

отсюда следует оценка

$$|A_j - (1-p)E_{j-1/2}^0| \leq \max_i |A_i - A_{i-1}| / (1-p) + [A_1 - (1-p)E_{1/2}^0] \quad \text{при} \\ 0 < p < 1. \quad (4.17)$$

Используя в (4.16) оценки (4.17), (4.9), (4.14) и (4.15), получаем

$$\begin{aligned}
& \| {}^0\mathbf{E}^1 \| = O(\Delta^2), \| {}^1\mathbf{E}^1 \| = O(\Delta) \quad \forall (p, q) \in g_{LM}, \\
& \| {}^0\mathbf{E}^1 \| = O(1) \min[\delta + \Delta^2, (1-p)\Delta], \| {}^1\mathbf{E}^1 \| = O(\Delta) \quad \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\
& \| {}^0\mathbf{E}^1 \| = O(1-q+\Delta)(\delta + \Delta^2) / \Delta, \quad \| {}^1\mathbf{E}^1 \| = O(1-q+\Delta) \\
& \quad \forall (p, q) \in g_{LD}.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Для оценки величин $\| {}^e\mathbf{E}^1 \|$ подставим в (4.13) при $k=1$ соотношения (4.10), (4.14) и (4.18):

$$\| {}^e\mathbf{E}^1 \| = \begin{cases} O(1) & \forall (p, q) \in g_{LM}, \\ (O(\Delta)/(1-p)) & \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\ O(1)(1-q+\Delta), & \forall (p, q) \in g_{LD}. \end{cases} \tag{4.19}$$

Используя в (4.6) соотношения (4.7), (4.15) и (4.18),(4.19), приходим к оценкам теоремы 2.

Следствие 2. Функция Ψ^{reg} , определяющая решение упрощенной сеточной задачи (4.3),(4.4), аппроксимирует решение $\Psi_m(z)$ задачи (1.1)-(1.6) с погрешностями

$$\| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] \| = \| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m^{reg}(z)] \| + O(\varepsilon^2) + O(1)[\hat{\mathbf{P}}[\chi_m(z)] \|,$$

где $\chi_m(z) = \exp[-\sigma(1-\lambda)z/\varepsilon] + \exp[-\sigma(1-\lambda)(Z-z)/\varepsilon]$, а для величин $\| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m^{reg}(z)] \|$ справедливы оценки теоремы 2. Это утверждение опирается на (2.9) и неравенство

$$\| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] \| \leq \| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m^{reg}(z)] \| + \| \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z) - \Psi_m^{reg}(z)] \|.$$

Следствие 3. Функция Ψ^{reg} регулярная.

Для доказательства подставим в определение (3.3) разность $\Psi^0 = \hat{\mathbf{P}}[\psi^0(z)] - \mathbf{E}^0$. Используя оценки (4.7),(4.15) и оценки ${}^v\hat{t}_j[\hat{\mathbf{P}}[\psi^0(z)]] = O(1)$, следующие из регулярности $\psi^0(z)$, находим

$${}^v\hat{t}_j[\Psi^0] = O(1) \quad \forall (p, q). \tag{4.20}$$

Опираясь на равенства (3.3), (4.5в) при $k=1$, получаем

$${}^0\hat{t}_j[\Psi^1] = [(1-p)({}^0\psi_j^1 - \psi_{j-1/2}^1) + (p+q){}^1\psi_j^1] / \Delta_j,$$

$${}^1t_j[\Psi^1] = 3[(1+p)(\psi_{j-1/2}^1 - {}^0\psi_j^1) + (p+q){}^1\psi_j^1] / \Delta_j.$$

Подставляя в эти выражения равенства $\Psi^1 = \hat{\mathbf{P}}[\psi^1(z)] - \mathbf{E}^1$ и используя оценки (4.18), (4.19) и (4.8), находим

$${}^v\hat{t}_j[\Psi^1] = \begin{cases} O(1/\Delta^v) & \forall (p, q) \in g_{LM}, \\ (O(1)/(1-p))^v & \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\ O[1+(1-q)/\Delta] & \forall (p, q) \in g_{LD}. \end{cases} \quad (4.21)$$

Из соотношений (4.20) и (4.21) следуют оценки ${}^v\hat{t}_j[\Psi^{reg}] = {}^v\hat{t}_j[\Psi^0] + {}^v\hat{t}_j[\Psi^1]\varepsilon = O(1)$, означающие регулярность функции Ψ^{reg} (см.(3.6)).

Следствие 4. Для невязок соотношений баланса (3.2а,б) на функции Ψ^{reg} справедливы оценки

$${}^v\hat{t}_j[\Psi^{reg}] = \begin{cases} O(\varepsilon/\Delta^v) & \forall (p, q) \in g_{LM}, \\ (O(\varepsilon)/(1-p))^v & \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\ O(\varepsilon)[1+(1-q)/\Delta] & \forall (p, q) \in g_{LD}, \\ O(1), & (p, q) \in g_{DD}. \end{cases} \quad (4.22)$$

Действительно, невязки уравнений баланса (3.2а,б) для $(p, q) \in g_{LM} \cup g_{WLM} \cup g_{LD}$ находим, складывая домноженное на $1/\varepsilon$ уравнение (4.3а) с уравнением (4.3б) и используя выражение (4.1):

$${}^v\hat{\Delta}_j[\Psi^{reg}] = \varepsilon\mu^v\hat{t}_j[\Psi^1] \quad \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{WLM} \cup g_{LD}. \quad (4.23а)$$

Оценки невязок $(p, q) \in g_{DD}$ получаем, прибавляя к домноженному на $1/\varepsilon$ уравнению (4.3а) слагаемое $\pm\mu^v\hat{t}_j[\Psi^0]$ и привлекая представление (4.1):

$${}^0\hat{\Delta}_j[\Psi^{reg}] = \mu^0\hat{t}_j[\Psi^0] \quad (p, q) \in g_{DD}. \quad (4.23б)$$

Используя в выражениях (4.23) оценки (4.20),(4.21), приходим к (4.22).

3. Таким образом, функция Ψ^{reg} не является решением задачи (3.2),(4.2). Вследствие (4.22) эту функцию можно рассматривать как приближение к этому решению. Естественным образом встают вопросы о существовании решения Ψ задачи (3.2),(4.2), его регулярности, а также об оценках величин $\mathbf{Er} = \Psi - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]$.

Теорема 3. Пусть $Q(z) \in C^4[0, Z]$ и $C_0 = 1/[\sigma(1-\lambda)] \asymp 1$, $C_1 = \Delta/\min \Delta_i \asymp 1$, а величина C определяется формулами

$$C = \begin{cases} 6C_0C_1(2ZC_1 + \Delta) & \forall (p, q) \in g_{LM}, \\ 6C_0C_1(1-p + 2(1-p^J)) & \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\ 6C_0C_1(2+q) & \forall (p, q) \in g_{LD}, \\ 4C_0C_1^2Z, & (p, q) \in g_{DD}. \end{cases}$$

Тогда в условиях

$$\Delta \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad 0 < 1 - A\varepsilon \asymp 1, \quad (4.24)$$

где

$$A = C/[\Delta^\alpha (1-p)^{2-\alpha}], \quad \alpha = 2 \quad \forall (p, q) \in g_{LM} \cup g_{DD}, \quad \alpha = 1$$

$$\forall (p, q) \in g_{WLM} \cup g_{LD}$$

решение Ψ сеточной задачи (3.2), (4.2) существует, регулярно и для величин \mathbf{Er} справедливы следующие оценки:

$$\forall (p, q) \in g_{LM}$$

$${}^v \mathbf{Er} = O(1)(\varepsilon \Delta^{2-v} + \varepsilon^2/\Delta), \quad {}^e \mathbf{Er} = O(1)(\Delta + \varepsilon/\Delta)^2;$$

$$\forall (p, q) \in g_{WLM}$$

$${}^0 \mathbf{Er} = O(\varepsilon)(\min[\delta + \Delta^2, (1-p)\Delta] + \varepsilon/(1-p)),$$

$${}^1 \mathbf{Er} = O(\varepsilon)[\Delta + \varepsilon/(1-p)], \quad {}^e \mathbf{Er} = O(1)[\Delta + \varepsilon/(1-p)]^2$$

$$\forall (p, q) \in g_{LD}$$

$${}^0 \mathbf{Er} = O(\varepsilon/\Delta)(1-q+\Delta)(\delta + \Delta^2 + \varepsilon), \quad {}^1 \mathbf{Er} = O(\varepsilon)(1-q+\Delta)(1 + \varepsilon/\Delta),$$

$${}^e \mathbf{Er} = O(1)(1-q+\Delta)(\Delta + \varepsilon + \varepsilon^2/\Delta);$$

$$\forall (p, q) \in g_{DD}$$

$${}^0 \mathbf{Er} = O(\varepsilon), \quad {}^e \mathbf{Er} = O(1)(\delta + \Delta^2 + \varepsilon/\Delta).$$

Доказательство. Будем искать решения Ψ в виде суммы:

$$\Psi = \Psi^{reg} + \mathbf{r}, \quad \mathbf{r} = \sum_{k=K+1}^{\infty} \Psi^k \varepsilon^k. \quad (4.25)$$

Уравнения для коэффициентов Ψ^k при $k \geq K+1$ находится так же, как и уравнения (4.5) для коэффициентов Ψ^k при $0 \leq k \leq K$:

$${}^v \Psi_{mj}^k = -\lambda \hat{S}[\mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^{k-1}]]/[\sigma(1-\lambda)] - \mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^{k-1}]/\sigma, \quad (4.26a)$$

$$\Psi_{m, j+s/2}^k = \hat{U}_{mj} [{}^v \Psi^k] + p \Psi_{m, j-s/2}^k. \quad (4.26b)$$

Краевые условия для этих уравнений следует из (4.2) и (4.4):

$$\Psi_{m, 1/2}^k \Big|_{m>0} = 0, \quad \Psi_{m, J+s/2}^k \Big|_{m<0} = 0. \quad (4.26в)$$

Функция Ψ по построению будет решением задачи (3.2), (4.2), если ряд, определяющий остаточный член \mathbf{r} , сходится. Эта функция будет регулярной, если функция \mathbf{r} регулярна. Оценки величин \mathbf{E} опираются на оценки теоремы 2 и оценки остаточного члена \mathbf{r} .

Чтобы доказать сходимость определяющего \mathbf{r} ряда, оценим величины ${}^e \bar{\Psi}^k = \| {}^e \Psi^k \|$ и ${}^v \bar{\Psi}^k = \max_{i=0, K} \| {}^i \Psi^k \|$. Из уравнений (4.26a) находим

$$\| {}^v \Psi^k \| \leq C_0 \max_{j, m} | {}^v t_{mj}[\Psi^{k-1}] | \dots \quad (4.27)$$

Опираясь на вытекающее из (4.26b) при $m > 0$ выражение

$$\psi_{m,j+1/2}^k = \sum_{i=0}^j [(1-p)^0 \psi_{mj}^k + (q+p)^1 \psi_{mj}^k] p^{j-i} + p^j \psi_{m,1/2}^k$$

и на аналогичное соотношение для $m < 0$, а также на граничные условия (4.26в), приходим к неравенствам

$${}^e \bar{\psi}^k \leq \begin{cases} {}^v \bar{\psi}^k (1+q)(1-p^j)/(1-p) & \forall (p,q) \in g_{WLM} \cup g_{LD}, \\ 2J {}^v \bar{\psi}^k & \forall (p,q) \in g_{LM} \cup g_{DD}. \end{cases} \quad (4.28a)$$

Преобразуем последнюю оценку, учитывая, что $J \leq (C_1/\Delta)Z$:

$${}^e \bar{\psi}^k \leq 2(C_1/\Delta)Z {}^v \bar{\psi}^k \quad \forall (p,q) \in g_{LM} \cup g_{DD}. \quad (4.28б)$$

Из (3.3) следуют неравенства

$$|{}^0 \hat{t}_{mj}[\Psi^k]| \leq (2/\Delta_j) {}^e \bar{\psi}^k, \quad |{}^1 \hat{t}_{mj}[\Psi^k]| \leq (6/\Delta_j) ({}^e \bar{\psi}^k + {}^v \bar{\psi}^k).$$

Используя в этих выражениях оценки (4.28) и $1/\Delta_j \leq 2(C_1/\Delta)$, получаем

$$\max_{v=0,K} \max_{j,m} |{}^v \hat{t}_{mj}[\Psi^k]| \leq (A/C_0) {}^v \bar{\psi}^k \quad (4.29)$$

Из (4.27) и (4.29) следуют соотношения ${}^v \bar{\psi}^k \leq A {}^v \bar{\psi}^{k-1}$, которые приводят к оценкам

$${}^v \bar{\psi}^k \leq A^{k-(K+1)} {}^v \bar{\psi}^{K+1}. \quad (4.30)$$

С другой стороны, из (4.28) следует выражение

$${}^e \bar{\psi}^k \leq {}^v \bar{\psi}^k B / [(1-p)^{2-\alpha} \Delta^\alpha], \quad B \asymp 1. \quad (4.31)$$

Опираясь на оценки (4.30), (4.31), доказываем справедливость оценок

$$\begin{aligned} \|{}^v \mathbf{r}\| &\leq \sum_{k \geq K+1} \varepsilon^k A^{k-(K+1)} {}^v \bar{\psi}^{K+1}, \\ \|{}^e \mathbf{r}\| &\leq \sum_{k \geq K+1} \varepsilon^k A^{k-(K+1)} {}^v \bar{\psi}^{K+1} B / [(1-p)^{2-\alpha} \Delta^\alpha]. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Мажорантные ряды сходятся в условиях (4.24). Поэтому сходятся и ряды, определяющие функции \mathbf{r} и Ψ .

Теперь оценим величины $\|{}^v \mathbf{r}\|$ и $\|{}^e \mathbf{r}\|$. Используя в (4.27) при $k=K+1$ выражения (4.20), (4.21), получаем соотношения

$${}^v \bar{\psi}^2 = \begin{cases} O(1/\Delta) & \forall (p,q) \in g_{LM}, \\ (O(1)/(1-p)) & \forall (p,q) \in g_{WLM}, \\ O(1/\Delta)[1-q+\Delta] & \forall (p,q) \in g_{LD}, \end{cases} \quad (4.33a)$$

$${}^v \bar{\psi}^1 = O(1), \quad (p,q) \in g_{DD}. \quad (4.33б)$$

Поставляя эти оценки в выражения, следующие из (4.32), а именно

$$\|{}^v \mathbf{r}\| \leq \varepsilon^{K+1} {}^v \bar{\psi}^{K+1} / [1-\varepsilon A], \quad \|{}^e \mathbf{r}\| \leq {}^v \bar{\psi}^{K+1} \varepsilon^{K+1} B / [(1-p)^{2-\alpha} \Delta^\alpha (1-\varepsilon A)]$$

и учитывая условие (4.24), получаем

$$\|{}^v \mathbf{r}\| = O(\varepsilon^2/\Delta) \quad \|{}^e \mathbf{r}\| = O(\varepsilon^2/\Delta^2) \quad \forall (p,q) \in g_{LM},$$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{r}\| &= O(1)\varepsilon^2/(1-p), \quad \|\mathbf{r}\| = O(1)\varepsilon^2/(1-p)^2 \quad \forall (p, q) \in g_{WLM}, \\ \|\mathbf{r}\| &= O(\varepsilon^2/\Delta)[\Delta+1-q], \quad \|\mathbf{r}\| = O(\varepsilon^2/\Delta)[\Delta+1-q] \quad \forall (p, q) \in g_{LD} \\ \|\mathbf{r}\| &= O(\varepsilon), \quad \|\mathbf{r}\| = O(\varepsilon/\Delta), \quad (p, q) \in g_{DD}. \end{aligned}$$

Суммируя эти оценки с оценками теоремы 2, находим оценки теоремы 3.

Доказательство регулярности остаточного члена \mathbf{r} опирается на оценки (4.29), (4.30) и (4.33):

$$\begin{aligned} \max_{j,m,v} |{}^v t_{mj}[\mathbf{r}]| &\leq \sum_{k \geq K+1} \varepsilon^k A^{k-K} {}^v \bar{\psi}^{K+1} / C_0 = \\ &= {}^v \bar{\psi}^{K+1} \varepsilon^{K+1} (A/C_0) / [1 - \varepsilon A] = O(1). \end{aligned}$$

Следствие 5. В условиях теоремы 3 решение Ψ задачи (3.2),(4.2) аппроксимирует решение $\Psi_m(z)$ задачи (1.1) – (1.6) с погрешностями

$$\|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]\| = \|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]\| + O(\varepsilon^2) + O(1) \|\hat{\mathbf{P}}[\chi_m(z)]\|,$$

где $\chi_m(z) = \exp[-\sigma(1-\lambda)z/\varepsilon] + \exp[-\sigma(1-\lambda)(Z-z)/\varepsilon]$, а для величин $\|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]\|$ справедливы оценки теоремы 3. Это утверждение опирается на оценку (2.9) и неравенство

$$\|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]\| \leq \|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]\| + \|\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]\|,$$

4. Полученные результаты позволяют сформулировать два алгоритма расчета регулярной компоненты $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$: *асимптотический* (определение решения Ψ^{reg} "упрощенной" системы (4.3), (4.4) по явным формулам (4.5)) и *итерационный* (решение полной задачи (3.2),(4.2)). Оба алгоритма являются грубосеточными и обладают хорошей точностью (см. оценки теорем 2 и 3). Благодаря последнему качеству полученные с помощью обоих алгоритмов решения неотрицательны и не содержат ложных экстремумов (осцилляций). В том же время область применимости асимптотического алгоритма ($\varepsilon = O(\Delta)$) значительно шире области применимости итерационного алгоритма (условия (4.24)). Кроме того, асимптотический алгоритм более экономичен: в нем не используется итерационный процесс по столкновениям.

Таблица 1

Схема	Асимптотический алгоритм		Итерационный алгоритм	
	(1)	(2)	(1)	(2)
LM	$\varepsilon \Delta^{2-\nu}$	$\Delta^2 + \varepsilon$	$\varepsilon \Delta^{2-\nu} + \varepsilon^2 / \Delta$	$(\Delta + \varepsilon / \Delta)^2$
LD	$\varepsilon \Delta^{2-\nu}$	$\Delta^2 + \varepsilon \Delta$	$\varepsilon \Delta^{2-\nu} + \varepsilon^2$	$(\Delta + \varepsilon)^2$
SM	$\varepsilon \Delta^{1-\nu}$	$\Delta + \varepsilon$	$\varepsilon \Delta^{1-\nu} + \varepsilon^2 / \Delta$	$\Delta + \varepsilon + \varepsilon^2 / \Delta$
DD	ε	$\Delta^2 + \varepsilon$	ε	$\Delta^2 + \varepsilon / \Delta$

Для наиболее употребительных LM-, LD-, SM- и DD –схем на равномерной ($\delta = 0$) или почти равномерной ($\delta = O(\Delta^2)$) сетке в табл. 1 приведены оценки погрешностей определения асимптотическим и итерационным алгоритмами следующих функционалов функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$: пространственных моментов – графа (1) и значений на гранях ячеек – графа (2).

Анализ представленных данных позволяет заключить, что наилучшие теоретические оценки имеют алгоритмы, опирающиеся на LD-схему. Этот результат согласуется с установившимся мнением о преимуществах LD-схемы в практических расчетах с большими оптическими шагами.

5. НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Расчетные алгоритмы для отыскания полного решения рассматриваемых нами консервативных схем с одним и двумя пространственными моментами и их обобщение на криволинейные и неоднородные геометрии реализованы в программных комплексах РОЗ-6.5 (см.[15]) и КАСКАД (см.[16]) и широко используются в различных задачах о переносе излучения. Анализ расчетных результатов в задачах с плоской геометрией с исходными краевыми условиями, выполненных по LM-, LD-, SM- и DD –схемам, приводит к следующим выводам.

Вывод 1. Решение системы сеточных уравнений при малых оптических шагах оказывается близким к решению точной задачи с оценками погрешности, соответствующими теоретическим результатам из [2], [9], [10].

Вывод 2. При больших оптических шагах в рассматриваемых здесь задачах для однородного слоя с регулярным внутренним источником сеточные решения близки к точному внутри слоя. У граничных поверхностей возникают “*переходные слои*” (см. [1], [8]) с осцилляциями и большими отклонениями $\Psi_{m,j+1/2}$ от соответствующих точных значений (моменты ${}^0\Psi_{m,j}$, как правило, передаются лучше). Размеры переходных слоев τ_{zp} зависят от оптических шагов, т.е. от величины $\sigma\Delta / \varepsilon$, и могут значительно превышать размеры естественных пограничных слоев исходной задачи. При $\sigma\Delta \gg \varepsilon$ переходные слои могут занимать всю расчетную область.

Вывод 3. Грубосеточные LD-, SM-решения слабее зависят от граничных условий, чем LM- и DD-решения, и величина τ_{zp} решений LM- и DD-схем значительно превышает величину τ_{zp} решений LD-, SM-схем.

Вывод 4. Применение адаптивных алгоритмов коррекции из [2], [17] в LM-, LD-, DD-схемах лишь незначительно уменьшает амплитуду нефизических осцилляций расчетных результатов.

Использование предложенных нами асимптотического и итерационного алгоритмов позволяет с высокой точностью рассчитывать регулярную компоненту $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ первого асимптотического приближения к точному решению. Из анализа расчетных результатов вытекают следующие заключения:

1) точность расчета функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ при уменьшении шага Δ для фиксированного ε возрастает, примерно соответствуя установленным оценкам;

2) точность расчета функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ при переходе к более высоким приближениям метода дискретных ординат (т.е. при уменьшении $\mu_M = \min |\mu_m|$) для фиксированных ε и Δ не меняется;

3) для LD-, SM-схем и в целом для LM-схемы точности обоих алгоритмов одинаковы, тогда как для DD-схемы итерационный алгоритм точнее асимптотического;

4) нулевые моменты регулярных компонент рассчитываются точнее, чем их значения на гранях.

Для иллюстрации этих выводов приведем некоторые результаты расчетов задачи (1.1)-(1.6), (1.9), (2.1)-(2.4) при

$$Z = 1, \quad \sigma = 1, \quad \sigma_s = 0.5, \quad Q(z) = \exp(z), \quad B_m|_{m>0} = \mu_m, \quad B_m|_{m<0} = \mu_m^2. \quad (5.1)$$

Пусть параметр ε принимает значения $\varepsilon = \varepsilon_1 = 0.04$, $\varepsilon = \varepsilon_2 = 0.02$, $\varepsilon = \varepsilon_3 = 0.01$. Будем использовать гауссову квадратуру (1.1) порядка $2M=4$ со следующими узлами и весами:

$$\begin{aligned} \mu_{\pm 1} &= \pm 0.861136, & \mu_{\pm 2} &= \pm 0.33998, \\ w_{\pm 1} &= \pm 0.347855, & w_{\pm 2} &= \pm 0.652145. \end{aligned}$$

Регулярная компонента первого асимптотического приближения к решению задачи (5.1) определяется равенством

$$\tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = 2 \exp(z)(1 - \varepsilon \mu_m). \quad (5.2a)$$

Ее усредненные по угловой переменной значения имеют вид

$$\tilde{\Phi}^{reg}(z) = \hat{S}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] = 2 \exp(z). \quad (5.2b)$$

Асимптотические краевые условия (4.2) для задачи (5.1) определяются выражениями

$$B_m^{as} |_{m>0} = 2(1 - \varepsilon\mu_m), \quad B_m^{as} |_{m<0} = 2e(1 - \varepsilon\mu_m), \quad \text{для } LM\text{-схемы},$$

$$B_m^{as} |_{m>0} = 2, \quad B_m^{as} |_{m<0} = 2e, \quad \text{для } DD\text{-схемы},$$

$$B_m^{as} |_{m>0} = 2({}^0[e^z]_L - {}^1[e^z]_L - \varepsilon\mu_m),$$

$$B_m^{as} |_{m<0} = 2({}^0[e^z]_R + {}^1[e^z]_R - e\varepsilon\mu_m) \quad \text{для } LD\text{-схемы},$$

$$B_m^{as} |_{m>0} = 2({}^0[e^z]_L - {}^1[e^z]_L 5/3 - \varepsilon\mu_m),$$

$$B_m^{as} |_{m<0} = 2({}^0[e^z]_R + {}^1[e^z]_R 5/3 - e\varepsilon\mu_m) \quad \text{для } SM\text{-схемы},$$

где ${}^v[e^z]_L, {}^v[e^z]_R$ есть v -й пространственный момент функции $\exp(z)$ в ячейке, примыкающей к левой или правой границе соответственно, $e = \exp(1)$.

За проекцию на сетку точного решения $\Psi_m(z)$ примем величины $\Psi_m(z_{j+1/2})$ и ${}^v[\Psi_m(z)]_j$, полученные LM-схемой на густых равномерных сетках с шагами $\Delta(\varepsilon) = 0.2\varepsilon$.

Грубосеточные расчеты были выполнены на равномерных сетках с шагами $\Delta_1 = 0.5, \Delta_2 = 0.25$ и $\Delta_3 = 0.125$. Наряду с величинами $\Psi_{m,j+1/2}$ и ${}^v\Psi_{mj}$ были вычислены также значения Ψ_{mj} сеточного решения в центрах ячеек z_j по формуле

$$\Psi_{mj} = {}^0\Psi_{mj} + [{}^0\Psi_{mj} - (\Psi_{m,j+1/2} + \Psi_{m,j-1/2}) / 2] / 2,$$

нулевые моменты и значения на гранях и в центрах ячеек усредненного по μ_m сеточного решения

$$\Phi_{j+1/2} = \hat{S}[\Psi_{m,j+1/2}], \quad \Phi_j = \hat{S}[\Psi_{mj}], \quad {}^0\Phi_j = \hat{S}[{}^0\Psi_{mj}].$$

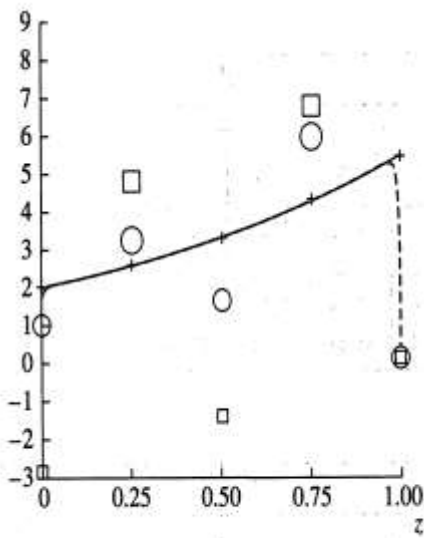
На фиг. 1-4 представлены точное решение $\Psi_{-2}(z)$ (штриховая линия), функция $\tilde{\Psi}_{-2}^{reg}(z)$ (сплошная линия), а также величины $\Psi_{-2,j+1/2}, \Psi_{-2,j}$, полученные итерационным методом (символы +), обычной сеточной схемой (символы \square на фиг. 1,2 и символы \circ на фиг. 3,4) и сеточной схемой с

адаптивным алгоритмом коррекции (символы \bigcirc). При этом величины, относящиеся к граням ячеек, отмечены мелкими, а к центрам ячеек – крупными значками.

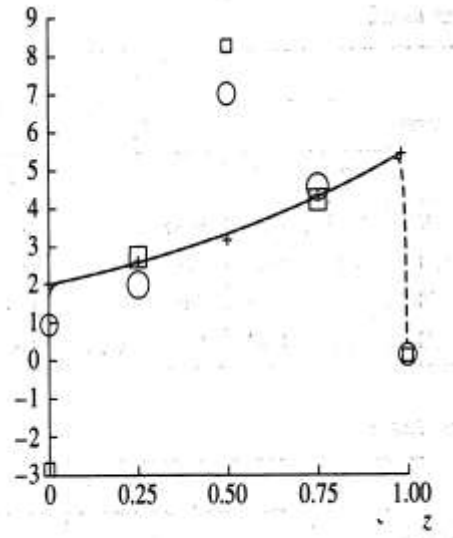
В таб. 2,3 приведены значения относительных погрешностей расчета функций (5.2) обоими алгоритмами:

$${}^0 R(\Psi) = 100 \max_m \max_{1 \leq j \leq J} |{}^0 \Psi_{mj} / {}^0 [\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]_j - 1|,$$

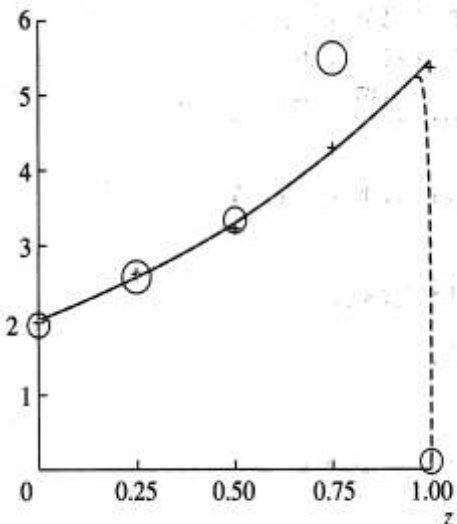
$${}^0 R(\Phi) = 100 \max_{1 \leq j \leq J} |{}^0 \Phi_j / {}^0 [\tilde{\Phi}^{reg}(z)]_j - 1|,$$



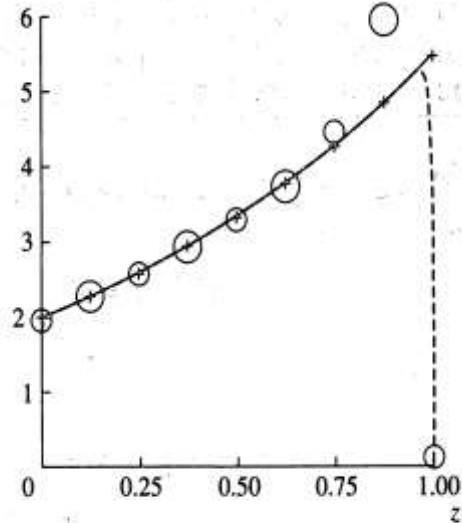
Фиг.1.



Фиг.2.



Фиг.3.



Фиг.4.

$${}^e R(\Psi) = 100 \max_m \max_{0 \leq j \leq J} |\Psi_{m,j+1/2} / \tilde{\Psi}_m^{reg}(z_{j+1/2}) - 1|,$$

$${}^e R(\Phi) = 100 \max_{0 \leq j \leq J} |\Phi_{j+1/2} / \tilde{\Phi}^{reg}(z_{j+1/2}) - 1|.$$

Приведенные в табл. 2, 3 величины при $\varepsilon = 0.01$ и близки к аналогичным значениям, отвечающим $\varepsilon = 0.02$ и $\varepsilon = 0.04$. Столбцы (1) относятся к асимптотическому, а столбцы (2) – к итерационному алгоритму.

Представленные результаты в целом соответствуют сформулированным ранее выводам.

Замечания. 1. Значительные погрешности грубосеточных расчетов с исходными граничными условиями объясняются, как правило, плохим расчетом сингулярных компонент. В рассмотренной задаче “переходные слои” для LD- и DD-схем заполняют всю расчетную область (см. фиг. 1 и 2). В задаче с $\lambda = 0, \mu > 0$ можно получить теоретические оценки погрешности сингулярных компонент для всех рассматриваемых схем. В этом случае в соответствии с (2.7) имеем

$$\Psi_m^{sing}(z) = \exp[-\sigma z / (\mu_m \varepsilon)] \mathcal{B}_m, \quad (5.3)$$

Таблица 2

Схема	${}^0 R(\Phi)$						${}^0 R(\Psi)$					
	Δ_1		Δ_2		Δ_3		Δ_1		Δ_2		Δ_3	
	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)
LM	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
LD	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.01
SM	0.10	0.08	0.09	0.08	0.04	0.04	0.21	0.19	0.12	0.11	0.06	0.07
DD	0.00	0.02	0.00	0.04	0.00	0.05	0.87	0.09	0.87	0.10	0.87	0.13

Таблица 3

Схема	${}^0 R(\Phi)$						${}^0 R(\Psi)$					
	Δ_1		Δ_2		Δ_3		Δ_1		Δ_2		Δ_3	
	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)
LM	0.26	0.29	0.01	0.05	0.07	0.01	0.56	0.60	0.08	0.11	0.21	0.01
LD	2.46	2.49	0.54	0.55	0.12	0.12	2.58	2.58	0.58	0.58	0.14	0.14
SM	2.93	2.87	0.94	0.87	0.52	0.41	24.3	24.3	10.1	10.1	4.90	4.61
DD	6.80	4.04	3.05	0.99	1.44	0.33	18.6	4.97	8.51	1.36	3.95	0.79

где $\mathcal{B}_m = B_m - \Psi_m^{reg}(0)$. Решение задачи (3.2)-(3.4) при $\lambda = 0$, ${}^v F_j \equiv 0$, $\mu > 0$, $\Delta_j \equiv \Delta$ определяется равенствами

$$\Psi_{m,j+1/2}^{sing} = p_m^j \mathcal{B}_m, \quad {}^0\Psi_{m,j}^{sing} = \rho_m^{j-1} (1 - \rho_m) \mathcal{B}_m \varepsilon_m, \quad (5.4)$$

$${}^1\Psi_{m,j}^{sing} = -3\rho_m^{j-1} C(\rho_m) \mathcal{B}_m \varepsilon_m,$$

где

$$\varepsilon_m = |\mu_m| / \varepsilon(\Delta\sigma) \asymp \varepsilon / \Delta, \quad C(\rho_m) = 1 + \rho_m - 2\varepsilon_m(1 - \rho_m),$$

$$\rho_m|_{DD} = (2\varepsilon_m - 1) / (2\varepsilon_m + 1), \quad (5.5)$$

$$\rho_m|_{LD,WLD} = [6q\varepsilon_m^2 - (3q-1)\varepsilon_m] / [6q\varepsilon_m^2 + (3q+1)\varepsilon_m + 1],$$

$$\rho_m|_{LM,WLM} = [6(1+p)\varepsilon_m^2 - 2(1+2p)\varepsilon_m + p] / [6(1+p)\varepsilon_m^2 + 2(2+p)\varepsilon_m + 1].$$

Оценим порядок аппроксимации при $\varepsilon_m \rightarrow 0$ функциями (5.4) проекций на сетку функции (5.3):

$$\Psi_m^{sing}(z_{j+1/2}) = \theta_m^j \mathcal{B}_m, \quad {}^0[\Psi_m^{sing}(z)]_j = \theta_m^{j-1} (1 - \theta_m) \varepsilon_m \mathcal{B}_m,$$

$${}^1[\Psi_m^{sing}(z)]_j = -3\theta_m^{j-1} C(\theta_m) \varepsilon_m \mathcal{B}_m, \quad \theta_m = \exp(-1/\varepsilon_m).$$

Сравнивая эти соотношения с выражениями (5.4), (5.5), находим

$$\mathcal{G}_{m,j+1/2} = \Psi_m^{sing}(z_{j+1/2}) - \Psi_{m,j+1/2}^{sing} \asymp -\Psi_{m,j+1/2}^{sing} = -p_m^j \mathcal{B}_m,$$

$${}^0\mathcal{G}_{m,j} = {}^0[\Psi_m^{sing}(z)]_j - {}^0\Psi_{mj}^{sing} \asymp -{}^0\Psi_{mj}^{sing} = -\mathcal{B}_m(1 - \rho_m)\rho_m^{j-1}\varepsilon_m,$$

$${}^1[\Psi_m^{sing}(z)]_j - {}^1\Psi_{mj}^{sing} \asymp -{}^1\Psi_{mj}^{sing} = 3\rho_m^{j-1} C(\rho_m) \mathcal{B}_m \varepsilon_m = O(\mathcal{B}_m)(1 - \rho_m)\rho_m^{j-1}\varepsilon_m,$$

где $\rho_m = p - (2p^2 + 8p + 3q - 1)\varepsilon_m + O(\varepsilon_m^2)$ при $\varepsilon_m \rightarrow 0$

Выпишем величины $\mathcal{G}_{m,j+1/2}$ и ${}^0\mathcal{G}_{m,j}$ LM-,LD-,SM-,DD-схем:

$$\mathcal{G}_{m,j+1/2}|_{LM} \asymp -\mathcal{B}_m(1 - \varepsilon_m)^j, \quad {}^0\mathcal{G}_{m,j}|_{LM} \asymp -\mathcal{B}_m\varepsilon_m^2(1 - \varepsilon_m)^{j-1},$$

$$\mathcal{G}_{m,j+1/2}|_{LD} \asymp -\mathcal{B}_m(-\varepsilon_m)^j, \quad {}^0\mathcal{G}_{m,j}|_{LD} \asymp \mathcal{B}_m(-\varepsilon_m)^j(1 + \varepsilon_m),$$

$$\mathcal{G}_{m,j+1/2}|_{SM} \asymp -\mathcal{B}_m \varepsilon_m^{2j}, \quad {}^0\mathcal{G}_{m,j}|_{SM} \asymp -\mathcal{B}_m \varepsilon_m^{2j-1}(1 - \varepsilon_m^2),$$

$$\mathcal{G}_{m,j+1/2}|_{DD} \asymp -\mathcal{B}_m (\varepsilon_m - 1)^j, \quad {}^0\mathcal{G}_{m,j}|_{DD} \asymp -\mathcal{B}_m (\varepsilon_m - 1)^{j-1} \varepsilon_m.$$

Эти соотношения объясняют указанные в выводах 2 и 3 характерные особенности рассматриваемых схем.

2. Приведенные в таблицах данные позволяют заключить, что при сгущении пространственной сетки полученные асимптотическими алгоритмами решения достигают стабилизации в следующем порядке: LM,LD,DD,SM, хотя, согласно оценкам теоремы 2, LM-,LD- и DD-схемы имеют одинаковый порядок точности по Δ при $\varepsilon = 0$. Однако из соотношений (4.12),(4.14) и (4.7) следуют более аккуратные формулы для величины $E_{m,j+1/2}^0$ главного в разложении по ε слагаемого в погрешностях $\mathbf{E}^{reg} = \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]$ (см.(4.6)):

$$E_{m,j+1/2}^0|_{LM} = \sum_{i=1}^j Q'''(z_{i+1/2}) \Delta^3 / [60\sigma(1 - \lambda)] + O(\Delta^3),$$

$$E_{m,j+1/2}^0|_{LD} = Q'''(z_{i+1/2}) \Delta^2 / [12\sigma(1 - \lambda)] + O(\Delta^3),$$

$$E_{m,j+1/2}^0|_{DD} = \sum_{i=1}^j (-1)^{j-i} Q'''(z_{i+1/2}) \Delta^2 / [6\sigma(1 - \lambda)] + O(\Delta^3).$$

Порядок погрешности по Δ для разных схем одинаков, но числовые множители оказываются различными, и в задачах с $Q(z) = \exp(z)$ при $\Delta \rightarrow 0$, справедливы $\|{}^e\mathbf{E}^0\|_{DD} > \|{}^e\mathbf{E}^0\|_{LD} > \|{}^e\mathbf{E}^0\|_{LM}$.

3. Расчеты по итерационному алгоритму проводились и в тех случаях, когда условия (4.24) теоремы 3 не были выполнены. Результаты показывают, что в этих случаях итерационный алгоритм также обладает хорошей точностью.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в настоящей работе подход к использованию грубосеточных схем в расчетах регулярной компоненты решения уравнения переноса опирается на введение асимптотических краевых условий. Для вывода этих условий привлекается метод пограничных слоев сингулярной теории возмущений. Малым параметром является величина ε , обратная оптической толщине слоя.

Введены понятия регулярных и сингулярных сеточных функций и для класса широко используемых консервативных схем метода пространственных моментов (2-го–4-го порядков при малых оптических шагах $\Delta/\varepsilon < 1$) с асимптотическими граничными условиями при $\Delta/\varepsilon \geq 1$ построены упрощенные уравнения, определяющие регулярное приближение к сеточному решению. На основе сравнения с регулярной компонентой асимптотического приближения к решению точной задачи установлены

оценки точности регулярных сеточных приближений в зависимости от параметров схем. Также показано, что регулярное сеточное приближение может быть получено прямым решением полной системы грубосеточных уравнений с асимптотическими граничными условиями. Точность расчетных результатов в методических задачах отвечает установленным теоретическим оценкам.

Полученные результаты служат обоснованием грубосеточных (как по пространственной, так и по угловой переменной) расчетов регулярных компонент решений. Эти результаты легко обобщаемы на задачи с анизотропными внутренними источниками и рассеянием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Badruzzaman A.* Nodal method in transport theory // *Advances Nucl. Sci. and Technol.* Chap. 1. New York: Plenum Press, 1990. 21-92.
2. *Germogenova T. A., Shwetsov A. V., Voloschenko A. M.* Adaptive positive nodal method for transport equation // *Thansp. Theor. and Statist. Phys.* 1994. V.23. №7. P. 923-970.
3. *Hennart J. P., Del Valle E.* A generalized nodal finite element formalism for discrete ordinates equations in slab geometry. Part 1: Theory in the continuous moment case. Part 2: Theory in the discontinuous moment case // *Thansp. Theor. and Statist. Phys.* 1995. V.24. №4. P. 268-282.
4. *Васильева А.Б., Бутузов В.Ф.* Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973.
5. *Васильева А.Б., Бутузов В.Ф.* Сингулярно возмущенные уравнения в критических случаях. М: Изд-во МГУ, 1978.
6. *Латышев В.Н., Тупчиев В.А.* Асимптотическое разложение решения уравнения переноса в случае малой средней длины свободного пробега // *Дифференц. ур-ния.* 1983. Т. 19. №11. С. 1922-1927.
7. *Гермогенова Т.А.* Регулярные компоненты асимптотических приближений к решениям уравнения переноса в оптически плотных средах // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1997. Т. 37 №4. С. 464-484.
8. *Germogenova T. A.* Discrete transport model eigenfunctions // *Nucl. Sci. Engng.* 1996. V. 124. № 1. P 63-71.
9. *Гермогенова Т.А.* Метод пространственных моментов в задаче о переносе излучения в слое: Препринт №39. М.: ИПМатем. РАН, 1997.
10. *Басс Л.П., Волощенко А.М., Гермогенова Т.А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМатем. АН СССР, 1986.
11. *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии. М.: Изд-во иностр. лит., 1953.
12. *Кейз К., Цвайфель П.* Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972.
13. *Гермогенова Т.А.* Локальные свойства решений уравнения переноса излучения. М.: Наука, 1986.
14. *Germogenova T. A.* Asymptotic approximations to transport equation solution in optically thick domains//*Transp. Theor. and Statist. Phys.* 1998. V.27.№5-7. P.523-546.

15. *Averin A.V., Voloschenko A.M., Kondratenko E.P., Dubinin A.A.* The ROZ-6.4. One-dimensional discrete ordinates neutrons, gamma-rays, and charged particles transport code//Proc. Internat. Top. Meeting Advances Math. Comput. and Reactor Phys. Pittsburgh, USA, April 28-May 2. 1991. V.5.P.30.3.5-1-30.3.5-4.

16. *Волощенко А.М., Швецов А.В.* КАСКАД-1.5 - программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения в двумерных геометриях // Тр. VII Рос. конф. Защита от ионизирующих излучений ядерно-техн. установок. Обнинск, 22-24 сентября. 1998. С.49-51.

17. *Voloschenko A.M.* Geometrical interpretation of family of weighted nodal schemes and adaptive positive approximations for transport equation // Proc. Joint Internat. Conf. Math. Meth. and Supercomput. Nucl. Applic. Saratoga Springs, USA, Oct. 5-9. 1997. V.2.P.1517-1526.

ГРУБОСЕТОЧНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА
ИЗЛУЧЕНИЯ. ЗАДАЧИ СО СЛАБЫМ ПОГЛОЩЕНИЕМ[†]

© 2001 г. Т. А. Гермогенова, О. В. Николаева
(125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМатем. РАН)

ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.
2001, том 41, №5, с. 732-755

Поступила в редакцию 21.07.95г.
Переработанный вариант 27.10.2000г.

Сингулярная теория возмущений для критических случаев используется в построении и анализе грубосеточных аппроксимаций уравнения переноса в оптически плотных слоях при слабом поглощении. В качестве исходных рассматриваются известные консервативные схемы (2-го – 4-го порядков на густых сетках). Для определения регулярной компоненты первого асимптотического приближения к решению точной задачи предложены грубосеточные уравнения и асимптотические краевые условия. Эта компонента с высокой точностью аппроксимирует решение вне пограничных слоев. Установлены теоретические оценки точности аппроксимации в зависимости от параметров схемы, хорошо согласующиеся с результатами методических расчетов.

ВВЕДЕНИЕ

В качестве приближения к решению уравнения переноса в оптически плотной области со слабым поглощением и гладким внутренним источником традиционно используется диффузионное приближение. Диффузионное уравнение в таких задачах оказывается предельным для уравнения переноса при $\varepsilon \rightarrow 0$, где ε – величина, обратная характерному размеру области в средних длинах свободного пробега [1], и одним из важных и общепризнанных критериев в оценках качества разрабатываемых грубосеточных алгоритмов решения уравнения переноса является существование при $\varepsilon \rightarrow 0$ “диффузионного предела” соответствующих сеточных уравнений [2].

В анализе таких алгоритмов могут быть использованы результаты теории асимптотических приближений к решениям уравнения переноса для оптически плотных областей [3], [4]. Построение подобных приближений для сеточных аналогов уравнения переноса послужило основой исследования представительного класса схем в случае существенного поглощения, когда альbedo однократного рассеяния λ заметно меньше единицы [5].

[†] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 98-01-00958).

Задачи со слабым поглощением ($\lambda \approx 1$) оказываются более сложными: спектры точной задачи и соответствующей системы сеточных уравнений содержат как мягкую, так и жесткую компоненты (“критический случай”, см. [6]). Регулярные (медленно меняющиеся) компоненты в точной задаче определяются системой диффузионных уравнений и рекуррентных соотношений [3], [4]. Важную роль играют асимптотические краевые условия для диффузионных уравнений, обеспечивающие корректный учет регулярных элементарных решений.

В настоящей работе рассматриваются ключевые в анализе грубосеточных схем моноэнергетические краевые задачи для плоского слоя $(0, Z)$, дискретизованные по угловой переменной [7]:

$$\hat{T}[\Psi_m(z)] \equiv \mu_m d\Psi_m/dz + \Sigma_t \Psi_m(z) - \Sigma_s \hat{S}[\Psi_m(z)] = F(z), \quad (1)$$

$$\Psi_m(0) = B_m, \quad \Psi_{-m}(Z) = B_{-m} \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (2)$$

Функции $\Psi_m(z)$ отвечают интенсивности излучения в точке $z \in (0, Z)$ в направлениях, составляющих угол $\arccos \mu_m$ с осью z . Внутренний источник $F(z)$ и индикатриса рассеяния считаются изотропными:

$$\hat{S}[\Psi_m(z)] = \frac{1}{2} \sum_{m=-M}^M \Psi_m(z) w_m,$$

величины μ_m и w_m – узлы и веса гауссовой квадратурной формулы порядка $2M \geq 4$.

Развиваемые здесь грубосеточные алгоритмы расчета регулярных компонент, так же как в [5], опираются на консервативные схемы метода пространственных моментов (2-го–4-го порядков точности на густых сетках). Регулярное грубосеточное решение предоставляется разложением по степеням параметра ε . Исследование близости уравнений, определяющих коэффициенты этих разложений, к соответствующим уравнениям точной задачи (1), (2) позволяет оценить точность получаемых грубосеточных решений.

В разд. 1 строится первое асимптотическое приближение к решению точной задачи, а в разд. 2 формулируется сеточная краевая задача, отвечающая рассматриваемым схемам. В разд. 3 строится упрощенная система уравнений с асимптотическими краевыми условиями, определяющая регулярное приближение к решению этой задачи. Важным моментом является преобразование упрощенной системы к комбинации уравнений, аппроксимирующих диффузионное уравнение, с системой простых рекуррентных соотношений, что позволяет установить ее однозначную разрешимость. В разд. 4 получены оценки близости построенных регулярных сеточных приближений к регулярной компоненте первого асимптотического приближения для решения точной задачи и тем самым – к точному решению этой задачи, а также оценивается порядок малости невязок сеточных

уравнений на регулярных сеточных приближениях. Разд. 5 посвящен анализу точности численного решения полной сеточной системы разд. 2 при асимптотических краевых условиях традиционным методом итераций по столкновениям. Результаты методических расчетов приведены в разд. 6.

Настоящая работа является продолжением работы [5]. Мы не приводим здесь подробного описания общих свойств исходной задачи, ограничиваясь необходимым минимумом повторений. Далее ссылки на формулы работы [5] начинаются с символа I.

1. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

1. Так же как в [5], малый параметр ε вводится соотношением $\varepsilon = 1/\tau^*$ при $\tau^* = \sum_t Z$. Считается, что коэффициенты исходного уравнения переноса (1) удовлетворяют условиям

$$\Sigma_t = \sigma/\varepsilon, \quad \Sigma_s = \sigma_s/\varepsilon, \quad 0 < \sigma_s < \sigma, \quad \sigma \asymp 1, \quad Z \asymp 1 \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0 \quad (1.1a)$$

Кроме того, будем предполагать, что в средах со слабым поглощением альbedo однократного рассеяния $\lambda = \Sigma_s/\Sigma_t$ подчиняется условиям

$$0 < \lambda < 1, \quad 1 - \lambda = \sigma_a O(\varepsilon^2/\sigma), \quad 0 < \sigma_a/\sigma = O(1) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 1, \quad (1.16)$$

...

а квадратура удовлетворяет требованиям

$$M \asymp 1 \quad \forall m: w_m \asymp 1, \quad |\mu_m| \asymp 1 \quad (1.1b)$$

Так же как в задачах с непрерывной угловой переменной μ (см. [3]), для решения задачи (1), (2) в условиях (1.1) доказываем оценку

$$\bar{\Psi} = \sup_{m,z} |\Psi_m(z)| \asymp (\sup_z |F(z)|/\varepsilon + \max_m |B_m|) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.2)$$

Внутренний источник излучения $F(z)$ и граничные источники ($B_m|_{m>0} = \Psi_m(0)$ и $B_m|_{m<0} = \Psi_m(Z)$) нормируются так, чтобы при $\varepsilon \rightarrow 0$ для решения $\Psi_m(Z)$ задачи (1), (2) была справедлива оценка $\Psi \asymp 1$. В соответствии с (1.2) положим

$$F(z) = \varepsilon Q(z) \quad (1.3)$$

при

$$\max[\bar{B}, \bar{Q}] \asymp 1, \quad \bar{B} = \max_m |B_m| = O(1), \quad \bar{Q} = \sup_z |Q(z)| = O(1). \quad (1.4)$$

Так же как в [5], функцию $\Psi_m(z) \in C^1[0, Z]$ будем называть *регулярной*, если выполнено соотношение

$$d\Psi_m/dz = O(1) \sup_z |\Psi_m(z)| \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0 \quad \forall m.$$

Функции, не обладающие этим свойством, будем считать *сингулярными*. Элементарные решения уравнения переноса определяются формулами

$$\Phi_m^i(z) = \exp(-k_i \Sigma_t z) \varphi_{im}, \quad \Phi_m^{-1}(z) = \exp[-k_i \Sigma_t (Z - z)] \varphi_{-im}, \quad (1.5)$$

где $i = 1, 2, \dots, M$, k_i – собственные значения, $k_{-i} = -k_i$, $\varphi_{\pm im} = 1/(1 - k_{\pm i} \mu_m)$ – собственные функции характеристического уравнения

$$(1 - k_i \mu_m) \varphi_{im} = \lambda \hat{S}[\varphi_{im}]. \quad (1.6)$$

Так как

$$\sup_z |d\Phi_m^i(z)/dz| / \sup_z |\Phi_m^i(z)| = |k_i \sigma / \varepsilon|,$$

а из (I.1.10) и (1.1) следуют оценки

$$k_1 \asymp \sqrt{1 - \lambda} = O(\varepsilon), \quad k_i|_{i>1} \asymp 1 / \mu_i \asymp 1 \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad (1.7)$$

то среди функции (1.5) только $\Phi_m^{\pm 1}(z)$ являются регулярными.

Решение задачи (1),(2) без внутреннего источника ($F(z) \equiv 0$), равное сумме элементарных решений (1.5), представим в виде

$$\Psi_m(z) = \Psi_m^{reg}(z) + \Psi_m^{sing}(z),$$

где

$$\Psi_m^{reg}(z) = b_1 \Phi_m^1(z) + b_{-1} \Phi_m^{-1}(z), \quad (1.8)$$

$$\Psi_m^{sing}(z) = \sum_{i=2}^M [b_i \Phi_m^i(z) + b_{-i} \Phi_m^{-i}(z)], \quad (1.9)$$

а коэффициенты b_i определяются формулами

$$b_i = \sum_{m=-M}^M \mu_m \Psi_m(z) \varphi_{im} w_m / N_i, \quad z = 0 \text{ для } i > 0, \quad z = Z \text{ для } i < 0, \quad (1.10)$$

вследствие ортогональности функций φ_{im} (см.(I.1.14)):

$$\sum_m \mu_m \varphi_{im} \varphi_{jm} w_m = \delta_{ij} / N_i. \quad (1.11)$$

В Приложении 1 (п.1) доказаны оценки

$$\varphi_{\pm 1m} \asymp 1, \quad \varphi_{im}|_{i \neq \pm 1} = O(1), \quad 1/N_i = O(1/|k_i|) \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0 \quad (1.12)$$

$$b_{\pm 1} = \bar{B}O(1/k_1), \quad b_i|_{i \neq \pm 1} = \bar{B}O(1). \quad (1.13)$$

Поэтому из (1.5),(1.7) и (1.9) следует соотношение

$$\Psi_m^{sing}(z) = O(\exp(-\sigma z/\varepsilon) + \exp[-\sigma(Z-z)/\varepsilon]) \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.14)$$

Введем величины

$$b_{\pm 1}^0 = (B^{\pm} - \alpha B^{\mp}) / (1 - \alpha^2), \quad B^{\pm} = \sum_{m>0} B_{\pm m} W_m w_m, \quad (1.15)$$

где

$$\alpha = K \exp(-k_1 \Sigma_i Z), \quad K = \sum_{m>0} \varphi_{-1m} W_m w_m;$$

усредняющая функция W_m определена в Приложении 1, п.2. Для нее справедливы соотношения

$$0 < W_m = O(1), \quad \sum_{m>0} \varphi_{im} W_m w_m = \delta_{i1} \quad \text{при } i > 0 \quad (1.16)$$

и доказана

Лемма 1. Пусть $\Psi_m^{as}(z) = b_1^0 \Phi_m^1(z) + b_{-1}^0 \Phi_m^{-1}(z)$. Тогда в условиях (1.1) справедлива оценка

$$\Psi_m^{reg}(z) - \Psi_m^{as}(z) = O(\exp(-\sigma Z / \varepsilon)) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.17)$$

Следствие 1. Пусть функции $\Psi_m(z)$ является решением задачи (1), (2) при $F(z) \equiv 0$ и выполнено условие

$$\sum_{m>0} \Psi_m(0) W_m w_m = \sum_{m>0} \Psi_{-m}(Z) W_m w_m = 0.$$

Тогда в предложениях (1.1) имеем

$$\Psi_m^{as}(z) \equiv 0, \quad \Psi_m(z) = O(\exp(-\sigma z / \varepsilon) + \exp[-\sigma(Z - z) / \varepsilon]) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

2. Под асимптотическим приближением порядка n к решению задачи (1), (2) понимается функция $\overset{n}{\Psi}_m(z)$, удовлетворяющая условию

$$\overset{n}{\Psi}_m(z) - \Psi_m(z) = O(\varepsilon^{n+1})$$

равномерно на $[0, Z]$ для всех $m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M$. Построим первое асимптотическое приближение в задачах с источником $F(z) \equiv 0$.

Теорема 1. Пусть $d^l Q(z) / dz^l = O(1)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ для $l = 0, 1, 2$, выполнены условия (1.1), (1.3), (1.4) и

$$\tilde{\Psi}_m(z) = \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) + \tilde{\Psi}_m^{sing}(z) \quad \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = \varphi^0(z) + 3\mu_m \varepsilon \varphi^1(z), \quad (1.18)$$

где

$$\varphi^1(z) = -\frac{1}{3\sigma} \frac{d}{dz} \varphi^0(z), \quad (1.19)$$

функция $\varphi^0(z)$ – решение диффузионной задачи

$$-\frac{1}{3\sigma} d^2 \varphi^0 / dz^2 + \sigma_a \varphi^0(z) = Q(z), \quad (1.20)$$

$$\varphi^0(0) = k \frac{\varepsilon}{\sigma} \frac{d}{dz} \varphi^0(0) + B^+ / W^0, \quad \varphi^0(Z) = -k \frac{\varepsilon}{\sigma} \frac{d}{dz} \varphi^0(Z) + B^- / W^0, \quad (1.21)$$

$k = W^1 / W^0$, $W^k = \sum_{m>0} W_m w_m \mu_m^k$, а функция $\tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ есть решение задачи

$$\hat{T} \tilde{\Psi}_m^{sing}(z) = 0, \quad (1.22a)$$

$$\tilde{\Psi}_m^{sing}(0) |_{m>0} = B_m - \tilde{\Psi}_m^{reg}(0), \quad \tilde{\Psi}_m^{sing}(Z) |_{m<0} = B_m - \tilde{\Psi}_m^{reg}(Z). \quad (1.22b)$$

Тогда функция $\tilde{\Psi}_m(z)$ равномерно на $(0, Z)$ удовлетворяет оценке

$$\tilde{\Psi}_m(z) - \Psi_m(z) = O(\varepsilon^2) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0 \quad \forall m, \quad (1.23)$$

т.е является первым асимптотическим приближением к решению задачи (1), (2).

Доказательство теоремы опирается на следующее утверждение.

Лемма 2. Пусть выполнены условия теоремы 1 и

$$\Psi_m^a(z) = \varphi^0(z) + 3\varphi^1(z)\mu_m\varepsilon + 5\varphi^2(z)P_{2m}\varepsilon^2 + 7\varphi^3(z)\mu_m P_{2m}\varepsilon^3, \quad (1.24)$$

где $P_{2m} = (3\mu_m^2 - 1) / 2$, функции $\varphi^0(z)$ и $\varphi^1(z)$ подчиняются уравнениям (1.19), (1.20),

$$\varphi^2(z) = -\frac{2}{5\sigma} \frac{d}{dz} \varphi^1(z), \quad \varphi^3(z) = -\frac{5}{7\sigma} \frac{d}{dz} \varphi^2(z). \quad (1.25)$$

Тогда для невязки уравнения (1) на функции $\Psi_m^a(z)$ справедлива оценка

$$\hat{\Delta}[\Psi_m^a(z)] \equiv \hat{T}[\Psi_m^a(z)] - \varepsilon Q(z) = O(\varepsilon^3) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1.26)$$

Действительно, величину $\hat{\Delta}[\Psi_m^a(z)]$ можно представить разложением по степеням ε , $\hat{\Delta}[\Psi_m^a(z)] = \sum_{k=0}^3 d_m^k(z) \varepsilon^k$, где

$$d_m^0(z) = \mu_m \left[\frac{d}{dz} \varphi^0(z) + 3\sigma \varphi^1(z) \right], \quad (1.27a)$$

$$d_m^1(z) = \frac{d}{dz} \varphi^1(z) + \sigma_a \varphi^0(z) - Q(z) + P_{2m} [5\sigma \varphi^2(z) + 2 \frac{d}{dz} \varphi^1(z)], \quad (1.27б)$$

$$d_m^2(z) = \mu_m P_{2m} \left[5 \frac{d}{dz} \varphi^2(z) + 7\sigma \varphi^3(z) \right], \quad (1.27в)$$

$$d_m^3(z) = 7\mu_m P_{2m} \frac{d}{dz} \varphi^3(z). \quad (1.27г)$$

Опираясь на оценки величин $d^l Q(z) / dz^l$ и предположения (1.1) из известных результатов теории диффузионных уравнений на отрезке для решения задачи (1.20), (1.21) получаем оценки $d^l \varphi^0(z) / dz^l = O(1)$, $0 \leq l \leq 4$, и, следовательно,

$$\varphi^k(z) = O(1), \quad \frac{d}{dz} \varphi^k(z) = O(1) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad 0 \leq k \leq 3. \quad (1.28)$$

Подставив в (1.27) выражения (1.20), (1.19) и (1.25), найдем

$$d_m^k \equiv 0 \quad \text{при } k = 0, 1, 2, \quad d_m^3(z) = 7\mu_m P_{2m} \frac{d}{dz} \varphi^3(z).$$

Отсюда и из (1.28) следует оценка (1.26). Лемма 2 доказана.

Далее, из (1.18), (1.24) и (1.28) вытекает оценка

$$\Psi_m^a(z) - \Psi_m^{reg}(z) = O(\varepsilon^2) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad (1.29)$$

а из соотношений (1.22a) и (1.26) следует, что разность $E_m(z) = \Psi_m(z) - [\Psi_m^a(z) + \tilde{\Psi}_m^{sing}(z)]$ удовлетворяет уравнению

$$\hat{T}[E_m(z)] = -\hat{\Delta}[\Psi_m^a(z)] = O(\varepsilon^3). \quad (1.30a)$$

Краевые условия для этого уравнения находим, используя краевые условия (2) и (1.22б), а также оценку (1.29):

$$E_m(0)|_{m>0} = O(\varepsilon^2), \quad E_m(Z)|_{m<0} = O(\varepsilon^2). \quad (1.306)$$

Неравенство (1.2) приводит к оценке решения задачи (1.30): $E_m(z) = O(\varepsilon^2)$. Используя эту оценку и оценку (1.29) в вытекающем из (1.18) соотношении $\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m(z) = E_m(z) + \Psi_m^a(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$, получаем искомую оценку (1.23). Теорема доказана.

Следствие 1. Функция $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ – регулярная, функция $\tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ – сингулярная. При $\varepsilon \rightarrow 0$ справедливы оценки

$$\sup_{m,z} |\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)| \asymp \max[\bar{Q}, \bar{B}] \asymp 1, \quad (1.31)$$

$$\tilde{\Psi}_m^{sing}(z) = O(\exp(-\sigma z / \varepsilon) + \exp[-\sigma(Z - z) / \varepsilon]), \quad (1.32)$$

$$\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z) = O(\varepsilon^2 + \exp(-\sigma z / \varepsilon) + \exp[-\sigma(Z - z) / \varepsilon]). \quad (1.33)$$

Оценка (1.31) следует из определения $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$, соответствующей оценки решения диффузионной задачи (1.20), (1.21) и оценок (1.28) для $\varphi^1(z)$. Поскольку для $\tilde{\Psi}_m^{sing}(z)$ – решения задачи (1.22) выполнены условия следствия 1, справедлива оценка (1.32). Оценку (1.33) получаем из (1.23) и (1.32).

Формулы, аналогичные (1.18)–(1.21), в теории точного уравнения переноса (без дискретизации по μ) определяют известное P_1 -приближение (см. [1],[3]), для которого при изотропном рассеянии

$$W(\mu) = [1 + O(\varepsilon)](\mu + 3\mu^2/2) + O(\varepsilon^2) \pm 1\%, \quad W^0 = 1 + O(\varepsilon),$$

$k = 0.7104 + O(\varepsilon)$ – известный параметр (экстраполированная длина). В приближении дискретных ординат эти величины передаются с погрешностью, обусловленной неточностью используемой квадратурной формулы. Введение функций W_m , построенных для данной квадратурной формулы (см. Приложение 1, п. 2), обеспечивает выполнение условий ортогональности (1.16) и при краевых условиях (1.21) – включение в $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ медленно убывающей с удалением от граничных поверхностей компоненты решения вида (1.8).

2. КОНСЕРВАТИВНЫЕ СЕТОЧНЫЕ СХЕМЫ

1. Рассмотрим консервативные схемы LM, WLM, LD, WLD, SM и DD метода пространственных моментов, расчетными величинами которых являются значения сеточного решения $\Psi_{m,j+1/2}$ в узлах сетки $z_{j+1/2}$ и моменты ${}^0\Psi_{mj}$ и ${}^1\Psi_{mj}$ сеточного решения в ячейках $(z_{j-1/2}, z_{j+1/2})$, соответствующие моментам решения точной задачи

$${}^\nu[\Psi_m(z)]_j = (2\nu + 1) \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \Psi_m(z) p_{\nu,j}(z) dz / \Delta_j, \quad \nu = 0, 1. \quad (2.1)$$

Здесь $p_{0j}(z) = 1$, $p_{1j}(z) = 2(z - z_j)/\Delta_j$, $z_j = z_{j-1/2} + \Delta_j/2$.

Используются следующие векторные обозначения сеточных функций:

$${}^v\Psi = \{ {}^v\Psi_{mj} : m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M, j = 1, 2, \dots, J \}, \quad v = 0, 1,$$

$${}^e\Psi = \{ \Psi_{m,j+1/2} : m = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M, j = 1, 2, \dots, J \}, \quad \Psi = \{ {}^0\Psi, {}^1\Psi, {}^e\Psi \}.$$

Проекция на рассматриваемую сетку непрерывной на $[0, Z]$ функции $\varphi(z)$ (т.е. величины $\varphi(z_{j+1/2})$ и ${}^v[\varphi(z)]_j$) определяется операторами проектирования, как в [5]:

$${}^v\varphi = {}^v\hat{P}[\varphi(z)], \quad {}^e\varphi = {}^e\hat{P}[\varphi(z)], \quad \varphi = \hat{P}[\varphi(z)] = \{ {}^0\varphi, {}^1\varphi, {}^e\varphi \}.$$

Задача (I.3.2) для функции Ψ содержит уравнения баланса

$${}^1\hat{T}_{mj}[\Psi] \equiv \mu_m {}^v\hat{t}_{mj}[\Psi] + \sum_t {}^v\Psi_{mj} - \sum_s \hat{S}[{}^v\Psi_{mj}] = {}^vF_j, \quad (2.2a)$$

где

$$\hat{S}[{}^v\Psi_{mj}] = \sum_{m=-M}^M w_m {}^v\Psi_{mj} / 2, \quad {}^vF_j = {}^v[F(z)]_j,$$

а операторы ${}^v\hat{t}_{mj}$ аппроксимируют оператор d/dz (см. (I.3.2)):

$${}^0\hat{t}_{mj}[\Psi] = [\Psi_{m,j+1/2} - \Psi_{m,j-1/2}] / \Delta_j, \quad (2.2б)$$

$${}^1\hat{t}_{mj}[\Psi] = 3[\Psi_{m,j+1/2} + \Psi_{m,j-1/2} - 2{}^0\Psi_{mj}] / \Delta_j. \quad (2.2в)$$

В задачу входят также граничные условия

$$\Psi_{m,1/2} = B_m \text{ при } m > 0, \quad \Psi_{m,J+1/2} = B_m \text{ при } m < 0 \quad (2.2г)$$

и аппроксимационные соотношения, которые представим в виде

$$\hat{A}_{mj}[\Psi] = {}^0\hat{\alpha}_{mj}[\Psi] + s^1\hat{\alpha}_{mj}[\Psi] = 0. \quad (2.2д)$$

Здесь

$${}^0\hat{\alpha}_{mj}[\Psi] = (1-p)[(\Psi_{m,j+1/2} + \Psi_{m,j-1/2}) / 2 - {}^0\Psi_{mj}],$$

$${}^1\hat{\alpha}_{mj}[\Psi] = (1+p)(\Psi_{m,j+1/2} - \Psi_{m,j-1/2}) / 2 - (p+q){}^1\Psi_{mj}, \quad s = \text{sign}(m).$$

Весовые параметры p и q принадлежат следующему множеству:

$$\{ \{0 \leq p \leq 1, q = 1\} \cup \{p = 0, 1/3 \leq q < 1\} \cup \{p = -1, q = 1\} \}. \quad (2.2е)$$

Основным схемам DD и LM отвечают значения $q = -p = 1$ и $p = q = 1$ соответственно, а в W-схемах

$$p \in (0, 1) \quad q = 1 \text{ (WLM-схемы)}, \quad p = 0, \quad q = 1 \text{ (LD-схема)},$$

$$p = 0, \quad q \in (1/3, 1) \text{ (WLD-схемы)}, \quad p = 0, \quad q = 1/3 \text{ (SM-схема)}.$$

В соответствии с (1.3) положим, что

$${}^{\nu}F_j = {}^{\nu}Q_j \varepsilon, \quad {}^{\nu}Q_j = {}^{\nu}[Q(z)]_j. \quad (2.2\text{ж})$$

В DD-схеме используются лишь нулевые пространственные моменты, $\nu = 0$.

2. Будем рассматривать грубосеточные (при $\sum_t \Delta_j = \sigma \Delta_j / \varepsilon \leq 1$) варианты этих схем. Как в [5], *регулярными* будем называть сеточные функции, изменения которых на каждом шаге ограничены для всех допустимых значений m, j :

$${}^{\nu}\hat{t}_{mj}[\Psi] = O(1) \|\Psi\| \quad \text{при} \quad \nu = 0, 1, \quad \Delta \rightarrow 0, \quad \varepsilon = O(\Delta). \quad (2.3)$$

Здесь и далее под нормой вектора понимается максимум модулей его компонент. Функции, не удовлетворяющие условиям (2.3), называются *сингулярными*. Грубосеточные приближения могут удовлетворительно описывать лишь регулярную компоненту решения точной задачи.

Поэтому, как в [5], рассмотрим два грубосеточных алгоритма расчета регулярной компоненты первого асимптотического приближения $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$. Оба алгоритма опираются на грубосеточные варианты схем (2.2) при *асимптотических краевых условиях*, отвечающих граничным значениям регулярной компоненты $\tilde{\Psi}_m^{reg}(0)$ и $\tilde{\Psi}_m^{reg}(Z)$:

$$B_m|_{m>0} = B_m^{as}, \quad B_m|_{m<0} = B_m^{as}. \quad (2.4)$$

В асимптотическом алгоритме строится регулярное сеточное приближение Ψ^{reg} к решению задачи (2.2), (2.4). В итерационном алгоритме находится решение Ψ полной сеточной системы (2.2), (2.4) традиционным методом итераций по столкновениям.

3. ПОСТРОЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

1. Регулярное приближение Ψ^{reg} к решению сеточной системы (2.2) – аналог функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ – будем искать в виде

$${}^{\nu}\Psi_{mj}^{reg} = {}^{\nu}\phi_j^0 + 3\mu_m {}^{\nu}\phi_j^1 \varepsilon, \quad \Psi_{m,j+1/2}^{reg} = \phi_{j+1/2}^0 + 3\mu_m \phi_{j+1/2}^1 \varepsilon, \quad (3.1)$$

и пусть

$$\phi^k = \{ {}^{\nu}\phi_j^k : \nu = 0, 1, j = 1, 2, \dots, J, \phi_{j+1/2}^k : j = 0, 1, \dots, J \} \quad \text{при} \quad k = 0, 1.$$

Компоненты ${}^{\nu}\phi_j^k, \phi_{j+1/2}^k$ определим из условий малости невязок уравнений (2.2а) и (2.2д) на этой функции:

$${}^{\nu}\hat{\Delta}_{mj}[\Psi^{reg}] = {}^{\nu}\hat{T}_{mj}[\Psi^{reg}] - \varepsilon {}^{\nu}Q_j = {}^{\nu}d_{mj}^0 + {}^{\nu}d_{mj}^1 \varepsilon, \quad \nu = 0, 1, \quad (3.2а)$$

$$\hat{A}_{mj}[\Psi^{reg}] = {}^A d_{mj}^0 + {}^A d_{mj}^1 \varepsilon. \quad (3.2б)$$

Далее в обозначениях операторов индекс m будет опускать, если компоненты функций от m не зависят.

Лемма 3. Пусть сеточные функции ϕ^k удовлетворяют уравнениям

$${}^{\nu}\hat{t}_j[\phi^0] + 3\sigma{}^{\nu}\phi_j^1 = 0, \quad (3.3a)$$

$${}^{\nu}\hat{t}_j[\phi^1] = {}^{\nu}Q_j + \sigma_a{}^{\nu}\phi_j^0, \quad (3.3b)$$

где операторы ${}^{\nu}\hat{t}_j$ определяются равенствами (3.3б, в). Тогда для коэффициентов ${}^{\nu}d_{mj}^k$ разложения по степеням ε невязок (3.2а) при всех допустимых значениях ν, m и j справедливы соотношения

$${}^{\nu}d_{mj}^0 = 0, \quad {}^{\nu}d_{mj}^1 = 2P_{2m}{}^{\nu}\hat{t}_j[\phi^1].$$

Для доказательства достаточно заметить, что величины ${}^{\nu}d_{mj}^k$ является сеточным аналогом выражений (1.27а,б) при $\varphi^2(z) \equiv 0$ с соответствующими заменами $\varphi^k(z)$ на ${}^{\nu}\phi_j^k$ и $\frac{d}{dz}\varphi^k(z)$ на ${}^{\nu}\hat{t}_j[\phi^k]$.

Чтобы обеспечить малость невязки (3.2б) аппроксимационных соотношений (2.2д) на функции Ψ^{reg} , воспользуемся представлением

$${}^A d_{mj}^0 = {}^0\hat{\alpha}_j[\phi^0] + s^1\hat{\alpha}_j[\phi^0], \quad {}^A d_{mj}^1 = 3\mu_m({}^0\hat{\alpha}_j[\phi^1] + s^1\hat{\alpha}_j[\phi^1]).$$

В основных схемах из выполнения условий $\hat{A}_{mj}[\Psi^{reg}] = 0$ при всех допустимых m и j следуют равенства ${}^A d_{mj}^k = 0$ для $k = 0, 1$, т.е.

$${}^0\phi_j^k = (\phi_{j+1/2}^k + \phi_{j-1/2}^k)/2, \quad \text{в DD-схеме,} \quad (3.4a)$$

$${}^1\phi_j^k = (\phi_{j+1/2}^k - \phi_{j-1/2}^k)/2, \quad \text{в LM-схеме.} \quad (3.4b)$$

В W-схемах ограничимся более слабыми условиями:

$${}^0\hat{\alpha}_j[\phi^k] \equiv (1-p)[(\phi_{j+1/2}^k + \phi_{j-1/2}^k)/2 - {}^0\phi_j^k] = 0, \quad k = 0, 1, \quad (3.4в)$$

$${}^1\hat{\alpha}_j[\phi^0] \equiv (1+p)[(\phi_{j+1/2}^0 + \phi_{j-1/2}^0)/2 - (p+q){}^1\phi_j^0] = 0. \quad (3.4г)$$

Они обеспечивают выполнения соотношений ${}^A d_{mj}^0 = 0$.

Система уравнений (3.3), (3.4) позволяет определить все компоненты сеточных функций ϕ^0 и ϕ^1 при задании соответствующих краевых условий. Чтобы убедиться в этом, воспользуемся известным для DD-схемы приемом из [2], позволяющим привести систему (3.3), (3.4) к эквивалентной форме, которая содержит дискретный аналог диффузионного уравнения (1.20).

2. С этой целью LM- и W-схемах домножим соотношения (3.3б) на Δ_j при $\nu = 0$ и на $\Delta_j/3$ при $\nu = 1$, сумму и разность полученных равенств запишем в виде

$$2(\phi_{j+1/2}^1 - {}^0\phi_j^1) = X_j^+, \quad 2({}^0\phi_j^1 - \phi_{j-1/2}^1) = X_j^-, \quad (3.5)$$

где

$$X_j^\pm = X_j^\pm[{}^0\phi^0, {}^1\phi^0, {}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}] = \Delta_j[{}^0Q_j \pm {}^1Q_j/3 - \sigma_a({}^0\phi_j^0 \pm {}^1\phi_j^0/3)]. \quad (3.6)$$

Заменив индекс j во втором из уравнений (3.5) на $j+1$, сложим его с первым и воспользуемся вытекающими из уравнения (3.3а) соотношениями ${}^0\phi_i^1 = -{}^0\hat{t}_i[\phi^0]/(3\sigma)$ при $i = j, i = j+1$. Разделив полученный результат на $\Delta_j + \Delta_{j+1}$, придем к дискретному аналогу уравнения (1.20):

$$\hat{D}_j^{ex}[\phi^0] \equiv -\hat{D}_j[{}^e\phi^0]/(3\sigma) + \sigma_a \hat{V}_j^{ex}[{}^0\phi^0, {}^1\phi^0] - \hat{V}_j^{ex}[{}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}] = 0 \quad (3.7а)$$

где

$$\hat{D}_j[{}^e\phi^0] \equiv 2({}^0\hat{t}_{j+1}[{}^e\phi^0] - {}^0\hat{t}_j[{}^e\phi^0])/(\Delta_{j+1} + \Delta_j), \quad (3.7б)$$

$$\hat{V}_j^{ex}[{}^0\phi^0, {}^1\phi^0] \equiv [\Delta_{j+1}({}^0\phi_{j+1} - {}^1\phi_{j+1}/3) + \Delta_j({}^0\phi_j - {}^1\phi_j/3)]/(\Delta_{j+1} + \Delta_j) \quad (3.7в)$$

При выводе соотношений (3.5) и уравнения (3.7а) используются лишь уравнения (3.3а) и (3.3б), представляющие собой точные интегральные соотношения в каждой j -й ячейке, - нулевой и первый моменты уравнения (1.19) и диффузионного уравнения (1.20), записанного в форме

$$d/dz \varphi^1(z) + \sigma_a \varphi^0(z) - Q(z) = 0.$$

Следовательно, сеточная функция $\varphi^0 = \hat{P}[\varphi^0(z)]$, построенная по точному решению уравнения диффузии, удовлетворяет уравнению

$$\hat{D}_j^{ex}[\varphi^0] = 0, \quad (3.8а)$$

а функции $\varphi^0, \nu \varphi^k = \nu \hat{P}[\varphi^k(z)]$ и ${}^e\varphi^1 = {}^e\hat{P}[\varphi^1(z)]$ подчиняются вытекающим из (3.3а) и (3.5) соотношениям

$$\nu[\varphi^1(z)]_j = -\nu \hat{t}_j^1[\varphi^0], \quad (3.8б)$$

$$\varphi^1(z_{j+1/2}) = {}^0[\varphi^1(z)]_j + X_j^+[{}^0\varphi^0, {}^1\varphi^0, {}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}]/2, \quad (3.8в)$$

$$\varphi^1(z_{1/2}) = {}^0[\varphi^1(z)]_1 + X_1^-[{}^0\varphi^0, {}^1\varphi^0, {}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}]/2. \quad (3.8г)$$

Для отыскания функции ${}^e\phi^0$ помимо уравнений (3.7) используются аппроксимационные соотношения (3.4), позволяющие выразить моменты ${}^v\phi_j^0$ через значения $\phi_{j\pm 1/2}^0$. Так, в LM-схеме равенства

$${}^1\phi_j^0 = {}^1\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0] \equiv \Delta_j(\phi_{j+1/2}^0 - \phi_{j-1/2}^0) / 2 \quad (3.9a)$$

отвечают условиям (3.4б) при $k=0$, а из (3.4б) при $k=1$ и (3.3б) при $v=0$ следует соотношение

$${}^1\phi_j^1 = (\phi_{j+1/2}^1 - \phi_{j-1/2}^1) / 2 = \Delta_j {}^0\hat{t}_j[{}^e\phi^1] / 2 = \Delta_j ({}^0Q_j - \sigma_a {}^0\phi_j^0) / 2.$$

Подставив полученное выражение в уравнение (3.3а) при $v=1$, найдем

$${}^0\phi_j^0 = {}^0\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv (\phi_{j+1/2}^0 + \phi_{j-1/2}^0 + \sigma {}^0Q_j \Delta_j^2 / 2) / (2 + \sigma \sigma_a \Delta_j^2 / 2). \quad (3.9б)$$

В W-схемах из (3.4в) при $k=0$ и (3.4г) получаем

$${}^0\phi_j^0 = {}^0\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv (\phi_{j+1/2}^1 + \phi_{j-1/2}^1) / 2, \quad {}^1\phi_j^0 = v {}^1\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0], \quad (3.9в)$$

где $v=(l+p)/(q+p)$. Последнее равенство совпадает с (3.9а), если $v=1$, т.е. $q=1$. Используя определения (3.9) в LM- и W-схемах, уравнение для определения ${}^e\phi^0$ приводим к виду

$$\hat{D}_j^{LM,W}[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv -\hat{D}_j[{}^e\phi^0] / (3\sigma) + \sigma_a \hat{V}_j^{LM,W}[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}] - \hat{V}_j^{ex}[{}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}] = 0, \quad (3.10)$$

где

$$\hat{V}_j^{LM,W}[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv \hat{V}_j^{ex}[{}^0\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0, \mathbf{Q}], {}^1\hat{\Phi}_j^0[{}^e\phi^0]].$$

В DD-схеме, складывая уравнения (3.3б) (при $v=0$) для j -й и $(j+1)$ -й ячеек, получаем соотношения

$$\phi_{j+3/2}^1 + \phi_{j+1/2}^1 - (\phi_{j+1/2}^1 + \phi_{j-1/2}^1) = (\hat{V}_j^{ex}[{}^0\mathbf{Q}, \mathbf{0}] - \sigma_a \hat{V}_j^{ex}[{}^e\phi^0, \mathbf{0}])(\Delta_{j+1} + \Delta_j). \quad (3.11)$$

Здесь и далее $\mathbf{0}$ – вектор с нулевыми компонентами. Из (3.4б) вытекают следующие аппроксимационные соотношения для DD-схемы:

$${}^0\phi_j^k = {}^0\hat{\Phi}_j^k[{}^e\phi^k, \mathbf{Q}] \equiv (\phi_{j+1/2}^k + \phi_{j-1/2}^k) / 2. \quad (3.9г)$$

Полагая здесь $k=1$ и используя уравнения (3.3а), из (3.11) получаем уравнение (3.7а), в котором векторы ${}^1\phi^0$ и ${}^1\mathbf{Q}$ заменены векторами с нулевыми компонентами $\mathbf{0}$. Функция ϕ^0 , отвечающая точному решению исходного уравнения (1.20), вообще говоря, не удовлетворяет этому уравнению. Соотношение (3.9г) при $k=0$ позволяет исключить моменты ${}^0\phi_j^0$

и представить дискретный аналог диффузионного уравнения (1.20) для DD-схемы в виде

$$\hat{D}_j^{DD}[\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv -\hat{D}_j[\phi^0] / (3\sigma) + \sigma_a \hat{V}_j^{DD}[\phi^0, \mathbf{Q}] - \hat{V}_j^{ex}[\mathbf{Q}, \mathbf{0}] = 0, \quad (3.12)$$

где $\hat{V}_j^{DD}[\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv \hat{V}_j^{ex}[\mathbf{0}, \hat{\Phi}^0[\phi^0, \mathbf{Q}], \mathbf{0}]$.

3. Чтобы найти компоненты ${}^v\phi_j^1$ векторов ${}^v\phi^1$, воспользуемся соотношениями, следующими из точных уравнений (3.3а) и определений операторов ${}^v\hat{\Phi}_j^k$:

$${}^0\phi_j^1 = {}^0\hat{\Phi}_j^1[\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv -{}^0t_j[\phi^0] / (3\sigma), \quad (3.13а)$$

$${}^1\phi_j^1 \Big|_{LM,W} = {}^1\hat{\Phi}_j^1[\phi^0, \mathbf{Q}] = -{}^1t_j[\phi^0, {}^0\hat{\Phi}_j^0[\phi^0, \mathbf{Q}]]. \quad (3.13б)$$

Наконец, величины $\phi_{j+1/2}^1$ и $\phi_{1/2}^1$ получаем, опираясь на вытекающие из (3.5) равенства

$$\phi_{j+1/2}^1 = {}^0\phi_j^1 + X_j^+ / 2, \quad 1 \leq j \leq J, \quad \phi_{1/2}^1 = {}^0\phi_1^1 + X_1^- / 2.$$

Следовательно, для всех схем

$$\begin{aligned} \phi_{j+1/2}^1 &= {}^0\hat{\Phi}_{j+1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv {}^0\hat{\Phi}_j^1[\phi^0, \mathbf{Q}] - \\ &- \frac{1}{2} X_j^+ [{}^0\hat{\Phi}^0[\phi^0, \mathbf{Q}], {}^1\hat{\Phi}^0[\phi^0], {}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}]. \end{aligned} \quad (3.13в)$$

$$\phi_{1/2}^1 = \hat{\Phi}_{1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}] \equiv {}^0\hat{\Phi}_1^1[\phi^0, \mathbf{Q}] - \frac{1}{2} X_1^- [{}^0\hat{\Phi}^0[\phi^0, \mathbf{Q}], {}^1\hat{\Phi}^0[\phi^0], {}^0\mathbf{Q}, {}^1\mathbf{Q}]. \quad (3.13г)$$

4. Чтобы получить краевые условия для систем (3.10) и (3.12), запишем условия (1.21) в виде

$$\varphi^0(0) = B^+ / W^0 - 3\kappa\varphi^1(0)\varepsilon, \quad \varphi^0(Z) = B^- / W^0 - 3\kappa\varphi^1(Z)\varepsilon \quad (3.14)$$

и заменим в них величины $\varphi^0(0)$ и $\varphi^0(Z)$ на $\phi_{1/2}^0$ и $\phi_{J+1/2}^0$, а величины $\varphi^1(0)$ и $\varphi^1(Z)$ – на $\phi_{1/2}^1 = \hat{\Phi}_{1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}]$ и $\phi_{J+1/2}^1 = \hat{\Phi}_{j+1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}]$:

$$\phi_{1/2}^0 = B^+ / W^0 - 3\kappa\hat{\Phi}_{1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}]\varepsilon, \quad (3.15а)$$

$$\phi_{J+1/2}^0 = B^- / W^0 + 3\kappa\hat{\Phi}_{J+1/2}^1[\phi^0, \mathbf{Q}]\varepsilon, \quad (3.15б)$$

Ниже в Приложении 2 доказано, что сеточные уравнения (3.10) или (3.12) при краевых условиях (3.15) однозначно определяют величины $\phi_{j+1/2}^0$ при следующих ограничениях:

$$\sigma\Delta_j \geq \varepsilon, \quad \sqrt{3\sigma\sigma_a} \Delta < 1, \quad \Delta_j \asymp \Delta = \max \Delta_j. \quad (3.16)$$

Первое условие здесь – это условие грубой сетки. Второе условие обеспечивает аппроксимацию диффузионного уравнения (1.20) системой уравнения (3.10) или (3.12). Третье условие есть условие квазиравномерности сетки.

Соотношения (3.9) и (3.13) позволяют однозначно определить величины ${}^v\phi_j^0, {}^v\phi_j^1$ и ${}^v\phi_{j+1/2}^1$. Поэтому задача (3.9), (3.10), (3.12), (3.13), (3.15) и, следовательно, исходная сеточная задача (3.3), (3.4), (3.15) однозначно разрешимы.

4. ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ АСИМПТОТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

1. Погрешности $\mathbf{E}r^{reg} = \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] - \Psi^{reg}$ представим в виде

$${}^vEr_{mj}^{reg} = {}^vE_j^0 + 3\mu_m {}^vE_j^1\varepsilon, \quad Er_{m,j+1/2}^{reg} = E_{j+1/2}^0 + 3\mu_m {}^vE_{j+1/2}^1\varepsilon, \quad (4.1)$$

где ${}^vE_j^k = {}^v[\varphi^k(z)]_j - {}^v\varphi_j^k, E_{j+1/2}^k = \varphi^k(z_{j+1/2}) - \varphi_{j+1/2}^k$.

Уравнения для погрешности ${}^e\mathbf{E}^0$ следует из (3.10), (3.12):

$$\hat{D}_j[{}^e\mathbf{E}^0] + \sigma_a \hat{V}_j^{LM,W}[{}^e\mathbf{E}^0, \mathbf{0}] = \eta_{j+1/2}^0 \text{ в LM-, W-схемах.} \quad (4.2a)$$

$$\hat{D}_j[{}^e\mathbf{E}^0] + \sigma_a \hat{V}_j^{DD}[{}^e\mathbf{E}^0, \mathbf{0}] = \eta_{j+1/2}^0 \text{ в DD-схеме,} \quad (4.2b)$$

где

$$\eta_{j+1/2}^0 \Big|_{LM,W} = \hat{D}_j^{LM,W}[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}], \quad \eta_{j+1/2}^0 \Big|_{DD} = \hat{D}_j^{DD}[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}], \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad (4.3)$$

$\varphi^0 = \hat{P}[\varphi^0(z)]$ – проекция на сетку решения диффузионной задачи (1.20), (1.21). Краевые условия для уравнения (4.2) получаем из краевых условий (3.14), (3.15):

$$E_{1/2}^0 + 3\sigma\kappa\hat{\Phi}_{1/2}^1[{}^e\mathbf{E}^0, \mathbf{0}] = \eta_{1/2}^0, \quad (4.4a)$$

$$E_{J+1/2}^0 - 3\sigma\kappa\hat{\Phi}_{J+1/2}^1[{}^e\mathbf{E}^0, \mathbf{0}] = \eta_{J+1/2}^0, \quad (4.4b)$$

где

$$\eta_{1/2}^0 = \varphi^0(0) - B^+/W^0 + 3\kappa\hat{\Phi}_{1/2}^1[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}]\varepsilon, \quad (4.5a)$$

$$\eta_{J+1/2}^0 = \varphi^0(Z) - B^-/W^0 - 3\kappa\hat{\Phi}_{J+1/2}^1[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}]\varepsilon. \quad (4.5b)$$

Система (4.2), (4.4) представима в трехточечной форме (П.9), (П.11) при $G_j \equiv \eta_{j+1/2}^0, B_L = \eta_{1/2}^0, B_R = \eta_{J+1/2}^0$ (см. Приложение 2) и для ее решения справедлива оценка (П.16):

$${}^e \mathbf{E}^0 = \max_{0 \leq j \leq J} |\eta_{j+1/2}^0|. \quad (4.6)$$

Оценки погрешностей ${}^v E_j^k, E_{j+1/2}^1$ прямо следуют из уравнений (3.9), (3.13):

$${}^v E_j^k = {}^v \hat{\Phi}_j^k [{}^e \mathbf{E}^0, \mathbf{0}] + {}^v \eta_j^k, \quad E_{j+1/2}^1 = \hat{\Phi}_{j+1/2}^k [{}^e \mathbf{E}^0, \mathbf{0}] + \eta_{j+1/2}^1, \quad (4.7)$$

где

$${}^v \eta_j^k = {}^v [\varphi^k(z)]_j - {}^v \hat{\Phi}_j^k [{}^e \varphi^0, \mathbf{Q}], \quad (4.8)$$

$$\eta_{j+1/2}^1 = \varphi^1(z_{j+1/2}) - \hat{\Phi}_{j+1/2}^1 [{}^e \varphi^0, \mathbf{Q}]. \quad (4.9)$$

Таким образом, задача сводится к оценке величин $\eta_{j+1/2}^1, {}^v \eta_j^k$ — невязки уравнений (3.9), (3.10), (3.12), (3.13), (3.15) на решении диффузионной задачи (1.20), (1.21).

2. Воспользуемся обозначениями $\delta_j = \Delta_{j+1} - \Delta_j, \delta = \max |\delta_j|$,

$$\varphi_{j+1/2}^{(l)} = d^l \varphi^{(0)}(z) / dz^l \Big|_{z=z_{j+1/2}}, \quad \varphi_j^{(l)} = d^l \varphi^{(0)}(z) / dz^l \Big|_{z=z_j}$$

и аналогичными обозначениями для функции $Q(z)$ и ее производных.

Лемма 4. Пусть $Q(z) \in C^4[0, Z]$ и $d^l Q(z) / dz^l = O(1)$ для $0 \leq l \leq 4$.

Тогда для невязок ${}^v \eta_j^k$ справедливы следующие оценки:

$${}^0 \eta_j^0 \Big|_{LM} = \Delta_j^4 \varphi_j^{(4)} / 720 + O(\Delta_j^6), \quad (4.10a)$$

$${}^0 \eta_j^0 \Big|_{DD,W} = -\Delta_j^2 \varphi_j^{(2)} / 12 - \Delta_j^4 \varphi_j^{(4)} / 480 + O(\Delta_j^6), \quad (4.10б)$$

$${}^1 \eta_j^0 \Big|_{LM,W} = \Delta_j \varphi_j^{(1)} (1 - \nu) / 2 + \Delta_j^3 \varphi_j^{(3)} (3 - 5\nu) / 240 + O(\Delta_j^5), \quad (4.10в)$$

$${}^0 \eta_j^1 = 0, \quad {}^1 \eta_j^1 \Big|_{LM,W} = 2 {}^0 \eta_j^0 / (\sigma \Delta_j). \quad (4.11)$$

Оценки (4.10) опираются на использование в выражениях (4.8) при $k = 0$ определений (3.9) и оценок

$${}^0 [\varphi(z)]_j = \varphi_j^{(0)} + \varphi_j^{(2)} \Delta_j^2 / 24 + \varphi_j^{(4)} \Delta_j^4 / 1920 + O(\Delta_j^6),$$

$${}^1 [\varphi(z)]_j = \varphi_j^{(1)} \Delta_j / 2 + \varphi_j^{(3)} \Delta_j^3 / 80 + O(\Delta_j^5),$$

полученных разложением подынтегральных равенств в выражениях (2.1) для ${}^v [\varphi(z)]_j$ в ряд Тейлора в точке $z = z_j$.

Используя в выражении (4.8) при $k=1$ соотношения (3.8б) и (3.13а,б), находим

$$\begin{aligned} {}^v\eta_j^1 &= -{}^v\Phi_j^1[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}] - {}^v\hat{t}_j[{}^e\varphi^0] / (3\sigma) = \\ &= ({}^v\hat{t}_j[{}^e\varphi^0, {}^0\Phi_j^0[{}^e\varphi^0, \mathbf{Q}]] - {}^v\hat{t}_j[{}^e\varphi^0, {}^0\varphi^0]) / (3\sigma). \end{aligned}$$

Опираясь на это равенство и выражения (2.2б,в), определяющие операторы ${}^v\hat{t}_j$, приходим к (4.11).

Лемма 5. В условиях леммы 4 справедливы следующие оценки: для невязок $\eta_{j+1/2}^0$ при $1 \leq j \leq J-1$

$$\begin{aligned} \eta_{j+1/2}^0 |_{LM} &= -\sigma_a [\varphi_{j+1/2}^{(3)} (\Delta_{j+1/2}^2 + \Delta_j^2) \delta_j + \varphi_{j+1/2}^{(4)} (\Delta_{j+1/2}^5 + \Delta_j^5) / (\Delta_{j+1} + \Delta_j)] / \\ &/ 360 + O(\Delta^5), \end{aligned} \tag{4.12a}$$

$$\begin{aligned} \eta_{j+1/2}^0 |_W &= -\sigma_a \{ \varphi_{j+1/2}^{(1)} \delta_j (v-1) / 6 + \varphi_{j+1/2}^{(2)} \cdot \\ &\cdot (\Delta_{j+1} \delta_j + \Delta_j^2) (2-v) / 12 + \varphi_{j+1/2}^{(3)} (5v-12) \cdot \\ &\cdot (\Delta_{j+1/2}^2 + \Delta_j^2) \delta_j / 180 + \varphi_{j+1/2}^{(4)} (5v-13) \cdot \\ &\cdot \{ (\Delta_{j+1/2}^5 + \Delta_j^5) / (\Delta_{j+1} + \Delta_j) \} / 720 \} + O(\Delta^5), \end{aligned} \tag{4.12б}$$

$$\begin{aligned} \eta_{j+1/2}^0 |_{DD} &= \varphi_{j+1/2}^{(3)} \delta_j / (18\sigma) + [\varphi_{j+1/2}^{(4)} \delta_j / (18\sigma) + \sigma_a \varphi_{j+1/2}^{(2)} / 12] \cdot \\ &\cdot (\Delta_{j+1} \delta_j + \Delta_j^2) + O(\Delta^3); \end{aligned} \tag{4.12в}$$

для невязок $\eta_{1/2}^0$ и $\eta_{J+1/2}^0$

$$\eta_{1/2}^0 = -3\varepsilon k \eta_{1/2}^1, \quad \eta_{J+1/2}^0 = 3\varepsilon k \eta_{J+1/2}^1; \tag{4.13}$$

для невязок $\eta_{j+1/2}^1$ и $0 \leq j \leq J$

$$\eta_{j+1/2}^1 |_{LM} = \sigma_a \Delta_j^4 \varphi_{j+1/2}^{(3)} / 720 + O(\Delta_j^5), \tag{4.14a}$$

$$\eta_{1/2}^1 |_{LM} = \sigma_a \Delta_1^4 \varphi_{1/2}^{(3)} / 720 + O(\Delta_1^5), \tag{4.14б}$$

$$\eta_{j+1/2}^1 |_W = \sigma_a [\varphi_{j+1/2}^{(1)} \Delta_j^2 (v-1) / 12 + \varphi_{j+1/2}^{(2)} \Delta_j^3 (2-v) / 24] + O(\Delta_j^4), \tag{4.14в}$$

$$\eta_{1/2}^1 |_W = \sigma_a [\varphi_{1/2}^{(1)} \Delta_1^2 (v-1) / 12 + \varphi_{1/2}^{(2)} \Delta_1^3 (2-v) / 24] + O(\Delta_1^4), \tag{4.14г}$$

$$\eta_{j+1/2}^1 |_{DD} = -\varphi_{j+1/2}^{(3)} \Delta_j^2 / (36\sigma) + O(\Delta_j^3), \tag{4.14д}$$

$$\eta_{1/2}^1 |_{DD} = -\varphi_{1/2}^{(3)} \Delta_1^2 / (36\sigma) + O(\Delta_1^3). \tag{4.14е}$$

Доказательство. Подставляя в (4.3) выражения (3.8а), (3.7а), (3.10) и (3.12), находим соотношения

$$\begin{aligned} \eta_{j+1/2}^0 |_{LM,W} &= -\sigma_a \hat{V}_j^{ex} [{}^0\boldsymbol{\eta}, {}^1\boldsymbol{\eta}] = -\sigma_a [\Delta_{j+1} ({}^0\eta_{j+1}^0 - {}^1\eta_{j+1}^0 / 3) + \\ &+ \Delta_j ({}^0\eta_j^0 - {}^1\eta_j^0 / 3) / (\Delta_{j+1} + \Delta_j), \\ \eta_{j+1/2}^0 |_{DD} &= -\sigma_a \hat{V}_j^{ex} [{}^0\boldsymbol{\eta}^0, {}^1\boldsymbol{\varphi}^0] + \hat{V}_j^{ex} [\mathbf{0}, {}^1\mathbf{Q}] = [-\sigma_a (\Delta_{j+1} {}^0\eta_{j+1}^0 + \Delta_j {}^1\eta_j^0)] + \\ &+ \Delta_{j+1} (-{}^1Q_{j+1} + \sigma_a {}^1[\varphi^0(z)]_{j+1}) / 3 + \Delta_j ({}^1Q_j - \sigma_a {}^1[\varphi^0(z)]_j) / 3 / \\ &/ (\Delta_{j+1} + \Delta_j). \end{aligned}$$

Подставляя в эти равенства оценки (4.10) и переходя от величин $\varphi_j^{(k)}, Q_j^{(k)}$ к величинам $\varphi_{j+1/2}^{(k)}, Q_{j+1/2}^{(k)}$ соответственно с помощью разложений Тейлора, приходим к (4.12).

Соотношения (4.13) получаем, используя в (4.5) крайвые условия (3.14). Подставляя в (4.9) равенства (3.8), (3.13) и (3.6), при $1 \leq j \leq J$ находим

$$\begin{aligned} \eta_{j+1/2}^1 |_{LM,W} &= X_j^+ [{}^0\boldsymbol{\eta}^0, {}^1\boldsymbol{\eta}^0, \mathbf{0}, \mathbf{0}] / 2 = -\sigma_a \Delta_j ({}^0\eta_j^0 - {}^1\eta_j^0 / 3) / 2, \\ \eta_{j+1/2}^1 |_{DD} &= X_j^+ [{}^0\boldsymbol{\eta}^0, {}^1\boldsymbol{\varphi}^0, \mathbf{0}, {}^1\mathbf{Q}] / 2 = \Delta_j [{}^1Q_j / 3 - \\ &- \sigma_a ({}^0\eta_j^0 + {}^1[\varphi^0(z)]_j / 3)] / 2. \end{aligned}$$

Аналогичные результаты справедливы для величины $\eta_{1/2}^1$. Опираясь на эти выражения и оценки (4.10) и переходя от величин $\varphi_j^{(k)}, Q_j^{(k)}$ к величинам $\varphi_{j+1/2}^{(k)}, Q_{j+1/2}^{(k)}$ соответственно с помощью разложений Тейлора, приходим к (4.14).

3. Оценки невязок позволяют получить оценки погрешностей.

Лемма 6. В условиях леммы 4 для погрешностей \mathbf{E}^k справедливы следующие оценки для LM-схемы

$${}^e\mathbf{E}^0 = O(\Delta^2) \sigma_a (\delta + \Delta^2), \quad {}^1\mathbf{E}^0 = O(\Delta^3), \quad {}^k\mathbf{E}^k = O(\Delta^{2-k}) (\sigma_a \delta + \Delta^2);$$

для W-схемы

$${}^e\mathbf{E}^0 = O(1) \sigma_a (1-q) \delta + [p + 2q - 1 + \delta + \Delta^2] \Delta^2, \quad {}^1\mathbf{E}^1 \asymp {}^0\mathbf{E}^0 / \Delta,$$

$${}^0\mathbf{E}^0 = O(1) ((1-q) \sigma_a \delta + \Delta^2), \quad {}^1\mathbf{E}^0 = O(\Delta) (1-q + \sigma_a \Delta + \Delta^2);$$

для DD-схемы

$${}^0\mathbf{E}^0 \asymp {}^e\mathbf{E}^0 = O(1) (\delta + \Delta^2);$$

для всех схем

$${}^e\mathbf{E}^1 \asymp {}^0\mathbf{E}^1 = O(1 / \Delta) {}^e\mathbf{E}^0.$$

Доказательство. Оценки для ${}^e\mathbf{E}^0$ опираются на оценки (4.6), (4.12), (4.13). Подставляя в равенства (4.7) оценки для ${}^e\mathbf{E}^0$ и (4.10), (4.11) и (4.14), переходим к оценкам для ${}^v\mathbf{E}^k, {}^e\mathbf{E}^1$.

Теорема 2. Пусть $Q(z) \in C^4[0, Z]$ и $d^l Q(z) / dz^l = O(1)$ для $0 \leq l \leq 4$. Тогда при $\varepsilon \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0, \sigma\Delta_j \geq \varepsilon$ функция Ψ^{reg} регулярная и для величины $\mathbf{Er}^{reg} = \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] - \Psi^{reg}$ справедливы следующие оценки:

для LM-схемы

$${}^0\mathbf{Er}^{reg} = O(\Delta^2)(\Delta^2 + \sigma_a \delta), \quad {}^1\mathbf{Er}^{reg} = O(\Delta^3),$$

$${}^e\mathbf{Er}^{reg} = O(\Delta^2)\sigma_a(\Delta^2 + \delta);$$

для W-схемы

$${}^0\mathbf{Er}^{reg} = O(1)((1-q)\sigma_a \delta + \Delta^2), \quad {}^1\mathbf{Er}^{reg} = O(\Delta)(1-q + \varepsilon + \sigma_a \Delta + \Delta^2),$$

$${}^e\mathbf{Er}^{reg} = O(1)\sigma_a[(1-q)\delta + (p + 2q - 1 + \delta + \Delta^2)\Delta^2];$$

для DD-схемы

$$\mathbf{Er}^{reg} = O(1)(\Delta^2 + \delta),$$

где $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ - регулярная компонента первого асимптотического приближения к решению задачи (1), (2).

Оценки погрешностей получаем, подставляя оценки леммы 6 в представление (4.1). Чтобы доказать регулярность Ψ^{reg} , находим оценки (2.3), опираясь на регулярность $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ и оценки теоремы 2:

$${}^v\hat{t}_j[\Psi^{reg}] = {}^v\hat{t}_j[\hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]] - {}^v\hat{t}_j[\mathbf{Er}^{reg}] = O(1).$$

Следствие 3. В условиях теоремы 2 регулярное сеточное приближение Ψ^{reg} аппроксимирует решение $\Psi_m(z)$ задачи (1), (2) с погрешностями

$$\|\Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]\| = \|\mathbf{Er}^{reg}\| + O(\varepsilon^2) + O(1)\|\hat{\mathbf{P}}[\chi_m(z)]\|,$$

где $\chi_m(z) = \exp(-\sigma z / \varepsilon) + \exp[-\sigma(Z - z) / \varepsilon]$, а для величин $\|\mathbf{Er}^{reg}\|$ справедливы оценки теоремы 2.

Таблица 1

Схема	$\ {}^v\mathbf{Er}^{reg}\ $	$\ {}^e\mathbf{Er}^{reg}\ $
LM	$O(\Delta^{4-v})$	$\sigma_a O(\Delta^4)$
LD	$O(\Delta^{2-v})(\varepsilon + \Delta\sigma_a + \Delta^2)^v$	$\sigma_a O(\Delta^2)$
WLD*	$O(\Delta^{2-v})$	$\sigma_a O(\Delta^4)$

SM	$O(\Delta^{2-\nu})$	$\sigma_a O(\Delta^2)$
DD	$O(\Delta^2)$	$O(\Delta^2)$

Это утверждение опирается на оценку (1.33) и неравенство

$$\| \Psi^{reg} - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] \| \leq \| \mathbf{E}r^{reg} \| + \| \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z) - \tilde{\Psi}_m^{reg}(z)] \|.$$

Проведенные исследования являются теоретическим обоснованием асимптотического алгоритма расчета регулярной компоненты $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$. Этот алгоритм опирается на уравнения (3.1), (3.9), (3.10), (3.12), (3.13), (3.15), а его погрешность определяется оценками теоремы 2. Эти оценки на равномерной ($\delta = 0$) сетке для наиболее употребительных LM-, LD-, WLD*- ($q = 1/2, p = 0$), SM- и DD-схем приведены в табл. 1.

Анализ полученных результатов позволяет заключить, что наилучшие теоретические оценки имеет алгоритм, опирающийся на LM-схему, и при уменьшении доли поглощения σ_a погрешности алгоритмов, использующих два пространственных момента, как правило, уменьшаются.

5. ИТЕРАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ

Асимптотические краевые условия (2.4) определим равенствами

$$\Psi_{m,1/2} |_{m>0} = B_m^{as} \equiv \Psi_{m,1/2}^{reg} = \phi_{1/2}^0 + 3\mu_m \phi_{1/2}^1 \varepsilon, \quad (5.1a)$$

$$\Psi_{m,J+1/2} |_{m<0} = B_m^{as} \equiv \Psi_{m,J+1/2}^{reg} = \phi_{J+1/2}^0 + 3\mu_m \phi_{J+1/2}^1 \varepsilon. \quad (5.1b)$$

Теорема 3. Пусть решение Ψ системы сеточных уравнений (2.2), отвечающей LD- и DD-схемам, при асимптотических краевых условиях (5.1) существует и $\Psi = O(1)$, $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ - регулярная компонента первого асимптотического приближения к решению исходной задачи (1), (2), определяемая теоремой 1. Тогда при $\varepsilon \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0, \varepsilon = O(\Delta)$ для величин $\mathbf{E}r = \Psi - \hat{\mathbf{P}}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]$ справедливы оценки

$$\mathbf{E}r = \mathbf{E}r^{reg} + O(1)[(\varepsilon^2 + \zeta) / \Delta + \xi], \quad (5.2)$$

где

$$\zeta = \max_{i,\nu} | {}^\nu \zeta_i |, \quad {}^\nu \zeta_i = {}^\nu t_i [\Psi^2],$$

$${}^\nu \Psi_j^2 = \hat{S} [{}^\nu \Psi_{mj} P_2(\mu_m)], \quad \Psi_{j+1/2}^2 = \hat{S} [\Psi_{m,j+1/2} P_2(\mu_m)],$$

$$\xi = \max_m | \xi_m |, \quad \xi_m |_{m<0} = \Psi_{m,1/2} - B_m^{as}, \quad \xi_m |_{m>0} = \Psi_{m,J+1/2} - B_m^{as},$$

а оценки величин $\mathbf{E}r^{reg}$ получены в теореме 2.

Изложим кратко схему доказательства. Решение задачи (2.2), (5.1) представим разложением по полиномам Лежандра $P_{im} = P_i(\mu_m)$:

$${}^v\Psi_{mj} = {}^v\Psi_j^0 + 3\mu_m {}^v\Psi_j^1 \varepsilon + {}^v r_{mj}, \quad (5.3a)$$

$$\Psi_{m,j+1/2} = \Psi_{j+1/2}^0 + 3\mu_m \Psi_{j+1/2}^1 \varepsilon + r_{m,j+1/2}, \quad (5.3b)$$

где

$$r_{m,j+1/2} = \sum_{i=2}^{2M-1} (2i+1) P_{im} \Psi_{j+1/2}^i, \quad (5.4a)$$

$${}^v r_{m,j} = \sum_{i=2}^{2M-1} (2i+1) P_{im} {}^v \Psi_j^i. \quad (5.4b)$$

Коэффициенты Ψ^k однозначно определяются выражениями

$${}^v \Psi_j^k = \hat{S}[{}^v \Psi_{mj} P_k(\mu_m)], \quad \Psi_{j+1/2}^k = \hat{S}[\Psi_{m,j+1/2} P_k(\mu_m)].$$

Здесь и далее $\nu = 0$ для DD-схемы, $\nu = 0, 1$ для LM-схемы.

Сначала найдем сеточные уравнения для функций Ψ^0, Ψ^1 и оценим погрешности аппроксимации величинами ${}^v \Psi_j^0 + 3\mu_m {}^v \Psi_j^1 \varepsilon, \Psi_{j+1/2}^0 + 3\mu_m \Psi_{j+1/2}^1 \varepsilon$ значений регулярного сеточного приближения ${}^v \Psi_{mj}^{reg}, \Psi_{m,j+1/2}^{reg}$, построенного в разд. 3. Затем получим определяющие остаточный член \mathbf{r} сеточные уравнения и оценим его. Опираясь на оценки \mathbf{r} и оценки теоремы 2, получим (5.2).

1. Вследствие ортогональности $P_i(\mu_m)$ и свойств

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

гауссовой квадратуры справедливы соотношения

$$\hat{S}[\mu_m^2 P_{2m}] = 2 / 15, \quad \hat{S}[\mu_m^k P_{im}] = 0 \quad \text{при} \quad 2 \leq i \leq 2M - 1, \quad 0 \leq k \leq 1. \quad (5.5)$$

Отсюда и из (5.4) следуют равенства

$$\hat{S}[{}^v r_{mj} \mu_m^k] = \hat{S}[r_{m,j+1/2} \mu_m^k] = 0 \quad \text{при} \quad k = 0, 1. \quad (5.6)$$

Вследствие свойств полиномов Лежандра выполнены условия

$$(2k + 1) \mu_m P_{km} = (k + 1) P_{k+1,m} + k P_{k-1,m} \quad \text{при} \quad 1 \leq k \leq 2M - 1.$$

Поэтому величины ${}^v \hat{T}_{mj}[\mathbf{r}]$ представляются разложением по функциям $\mu_m P_{2m}$ и P_{km} при $2 \leq k \leq 2M - 1$ ($P_{2M,m} \equiv 0$, поскольку узлы квадратуры Гаусса порядка $2M$ суть корни полинома $P_{2M}(\mu)$). Отсюда и из (5.5) следуют выражения

$$\hat{S}[{}^v \hat{T}_{mj}[\mathbf{r}]] = 0, \quad (5.7a)$$

$$\hat{S}[\hat{T}_{mj}[r]\mu_m] = 5\hat{S}[\hat{t}_j[\psi^2]\mu_m^2 P_{2m}] = 2^v \hat{t}_j[\psi^2] / 3 = 2^v \xi_j / 3. \quad (5.76)$$

Используя (5.4) в (2.2д), получаем такие равенства: в DD-схеме

$$\hat{A}_{mj}[r] = \sum_{i=2}^{2M-1} (2i+1)P_{im}[(\psi_{j+1/2}^i + \psi_{j-1/2}^i) / 2^{-0} \psi_j^i],$$

в LM-схеме

$$\hat{A}_{mj}[r] = \sum_{i=2}^{2M-1} (2i+1)P_{im}[(\psi_{j+1/2}^i + \psi_{j-1/2}^i) / 2^{-1} \psi_j^i].$$

Следовательно, выполнены условия

$$\hat{S}[\hat{A}_{mj}[r]\mu_m^k] = 0, \quad \text{при } k = 0, 1. \quad (5.7в)$$

2. Поставим (5.3) в уравнение (2.2), найдем выражения

$$\mu_m[\hat{t}_j[\psi^0] + 3\sigma^v \psi_j^1] + [\hat{t}_j[\psi^1] - {}^v Q_j + \sigma_a^v \psi_j^0] \varepsilon + \quad (5.8а)$$

$$+ 2P_{2m} {}^v t_j[\psi^1] \varepsilon + {}^v t \hat{T}_{mj}[r] = 0,$$

$$\hat{A}_{mj}[\Psi] = \hat{A}_j[\psi^0] + 3\mu_m \hat{A}_j[\psi^1] \varepsilon + \hat{A}_{mj}[r] = 0. \quad (5.8б)$$

Домножим (5.8) на w_m и $w_m \mu_m$ и суммируем результат по всем m .

Учитывая (5.5) и (5.7), находим уравнения для функций ψ^0 и ψ^1 :

$${}^v \hat{t}_j[\psi^1] = {}^v Q_j - \sigma_a^v \psi_j^0, \quad {}^v \hat{t}_j[\psi^0] + 3\sigma^v \psi_j^1 = -{}^v \zeta_j, \quad (5.9а)$$

$$\hat{A}_j[\psi^0] = \hat{A}_j[\psi^1] = 0. \quad (5.9б)$$

Выполнив с уравнениями (5.9) те же преобразования, что в разд.3 были выполнены для системы (3.3), (3.4), для LM-схемы находим

$$-\hat{D}_j[{}^e \psi^0] / (3\sigma) + \sigma_a \hat{V}_j^{ex}[{}^0 \psi^0, {}^1 \psi^0] = \hat{V}_j^{ex}[{}^0 \mathbf{Q}, {}^1 \mathbf{Q} - 3^0 \hat{\zeta}],$$

$${}^0 \psi_j^0 = {}^0 \hat{\Phi}_j[{}^e \psi^0, {}^0 \mathbf{Q} + {}^1 \hat{\zeta}, {}^1 \mathbf{Q}], \quad {}^1 \psi_j^0 = {}^1 \hat{\Phi}_j[{}^e \psi^0],$$

$${}^v \psi_j^1 = {}^v \hat{\Phi}_j[{}^e \psi^0, {}^0 \mathbf{Q} + {}^1 \hat{\zeta}, {}^1 \mathbf{Q}] - {}^v \hat{\zeta}_j / 3\sigma,$$

$$\psi_{j+1/2}^1 = \hat{\Phi}_{j+1/2}^1[{}^e \psi^0, {}^0 \mathbf{Q} - {}^0 \hat{\zeta}, {}^1 \mathbf{Q}], \quad \psi_{1/2}^1 = \hat{\Phi}_{1/2}^1[{}^e \psi^0, {}^0 \mathbf{Q} + {}^0 \hat{\zeta}, {}^1 \mathbf{Q}],$$

где ${}^v \hat{\zeta}_j = 2^v \zeta_j / (3\sigma \Delta_j)$, а операторы ${}^v \hat{\Phi}^k, \hat{\Phi}^1$ определяются соотношениями (3.9), (3.13). Следовательно, разности $\mathbf{R}^k = \psi^k - \phi^k$ удовлетворяют уравнениям

$$-\hat{D}_j[{}^e \mathbf{R}^0] / (3\sigma) + \sigma_a \hat{V}_j^{ex}[{}^0 \mathbf{R}^0, {}^1 \mathbf{R}^0] = \hat{V}_j^{ex}[\mathbf{0}, -3^0 \hat{\zeta}], \quad (5.10)$$

$${}^0 R_j^0 = {}^0 \hat{\Phi}_j[{}^e \mathbf{R}^0, {}^1 \hat{\zeta}, \mathbf{0}], \quad {}^1 R_j^0 = {}^1 \hat{\Phi}_j[{}^e \mathbf{R}^0], \quad (5.11)$$

$${}^v R_j^1 = {}^v \hat{\Phi}_j[{}^e \mathbf{R}^0, {}^1 \hat{\zeta}, \mathbf{0}] - {}^v \hat{\zeta}_j / 3\sigma, \quad (5.12а)$$

$$R_{j+1/2}^1 = \hat{\Phi}_{j+1/2}^1 [{}^e \mathbf{R}^0, -{}^0 \hat{\zeta}, \mathbf{0}], \quad R_{1/2}^1 = \Phi_{1/2}^1 [{}^e \mathbf{R}^0, {}^0 \hat{\zeta}, \mathbf{0}]. \quad (5.12б)$$

Теперь получим краевые условия для системы (5.10), (5.11). Подставляя в краевые условия (5.1) представление (5.3), находим

$$\begin{aligned} \psi_{1/2}^0 + 3\mu_m \psi_{1/2}^1 \varepsilon + r_{m,1/2} &= B_m^{as} = \phi_{1/2}^0 + 3\mu_m \phi_{1/2}^1 \varepsilon \text{ для } m > 0, \\ \psi_{1/2}^0 + 3\mu_m \psi_{1/2}^1 \varepsilon + r_{m,1/2} &= \phi_{1/2}^0 + 3\mu_m \phi_{1/2}^1 \varepsilon + \xi_m \text{ для } m < 0. \end{aligned}$$

Домножим каждое из этих равенств на w_m и суммируем по соответствующим значениям m . Складываем полученные выражения и учитываем (5.6) при $k=0$. Аналогичные действия выполняем для правой границы слоя. В результате имеем краевые условия

$$R_{1/2}^0 = \sum_{n < 0} w_n \xi_n = O(\xi), \quad R_{J+1/2}^0 = \sum_{n > 0} w_n \xi_n = O(\xi). \quad (5.13)$$

Задача (5.10), (5.11), (5.13) может быть записана в трехточечной форме (П.9), (П.11) (см. Приложение 2) при $B_L = O(\xi)$, $B_R = O(\xi)$, $G_j = O(\zeta / \Delta)$, и для ее решения справедлива оценка (П.16):

$${}^e \mathbf{R}^0 = {}^e \psi^0 - {}^e \phi^0 = O(\xi + \zeta / \Delta). \quad (5.14)$$

Величины ${}^v \mathbf{R}^k$, ${}^e \mathbf{R}^1$ однозначно определяются уравнениями (5.11), (5.12). Используя в этих уравнениях оценку (5.14), находим

$${}^v \mathbf{R}^0 = {}^v \psi^0 - {}^v \phi^0 = O(\xi + \zeta / \Delta), \quad \mathbf{R}^1 = \psi^1 - \phi^1 = O(\xi + \zeta / \Delta) / \Delta. \quad (5.15)$$

Принимая во внимание равенства (3.1) и учитывая, что $\varepsilon = O(\Delta)$, из (5.14), (5.15) получаем

$${}^v \Psi_{m,j}^{reg} = {}^v \psi_j^0 + 3\mu_m \psi_j^1 {}^v \psi_j^1 \varepsilon + O(\xi + \zeta / \Delta), \quad (5.16а)$$

$$\Psi_{reg}^{m,j+1/2} = \psi_0^{j+1/2} + 3\mu_m \psi_1^{j+1/2} \varepsilon + O(\xi + \zeta / \Delta). \quad (5.16б)$$

Аналогичные оценки выполнены для DD-схемы.

3. Подставляя соотношения (5.9) в уравнение (5.8) и используя равенство (5.6), находим уравнения для остаточного члена Γ :

$$\mu_m {}^v \hat{t}_{mj}[\mathbf{r}] + \sum_t {}^v r_{mj} = {}^v f_{mj}, \quad \hat{A}_{mj}[\mathbf{r}] = 0, \quad (5.17а)$$

$${}^v f_{mj} = -2P_{2m} {}^v \hat{t}_j[\psi^1] \varepsilon + \mu_m {}^v \zeta_j. \quad (5.17б)$$

Из условий теоремы 3 следует, что ${}^v \psi_j^0 = O(1)$. Используя эту оценку, а также уравнения (5.9а), получаем соотношение

$${}^v \hat{t}_j[\psi^1] = {}^v Q_j - \sigma_a {}^v \psi_j^0 = O(1). \text{ Применяя эту оценку к выражению (5.17б)}$$

для ${}^v f_{mj}$, приходим к соотношению

$${}^v f_{mj} = O(\varepsilon + \zeta). \quad (5.18)$$

Краевые условия для уравнения (5.17) получаем из (5.1), (5.3) и (5.16):

$$r_{m,1/2} \Big|_{m>0} = O(\xi + \zeta/\Delta), \quad r_{m,J+1/2} \Big|_{m<0} = O(\xi + \zeta/\Delta). \quad (5.19)$$

Докажем, что выполнены оценки

$$\| \mathbf{r} \| = O(\varepsilon + \zeta) \varepsilon/\Delta + O(\xi + \zeta/\Delta) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0, \Delta \rightarrow 0. \quad (5.20)$$

Пусть $h_{mj} = \sigma \Delta_j / (\mu_m \varepsilon)$ и $m > 0$ (случай $m < 0$ рассматривается аналогичным образом). Опираясь на (2.2б, в, д), переписываем уравнения (5.17) в более удобной форме, опуская индекс m :

для DD-схемы

$$r_{j+1/2} = \rho_j r_{j-1/2} + {}^0 f_j \Delta_j / (d_j \mu), \quad (5.21a)$$

где $\rho_j = (1 - h_j/2)/d_j$, $d_j = 1 + h_j/2$, $|\rho_j| < 1$,

$${}^0 r_j = (r_{j+1/2} + r_{j-1/2})/2; \quad (5.21б)$$

для LM-схемы

$$r_{j+1/2} = \rho_j r_{j-1/2} + ({}^0 f_j + {}^1 f_j h_j/6) \Delta_j / (d_j \mu) \quad (5.22a)$$

где $\rho_j = (1 - h_j/2 + h_j^2/12)/d_j$, $d_j = 1 + h_j/2 + h_j^2/12$, $0 < \rho_j < 1$

$${}^0 r_j = r_{j-1/2}/d_j + [{}^0 f_j (1 + h_j/6) - {}^1 f_j/3] \Delta_j / (2d_j \mu), \quad (5.22б)$$

$${}^1 r_j = (r_{j+1/2} + r_{j-1/2})/2. \quad (5.22в)$$

Пусть

$$\bar{g} = \max_j (|{}^0 f_j| \Delta_j / d_j) / \mu \quad \text{и} \quad \bar{g} = \max_j [(|{}^0 f_j| + |{}^1 f_j| h_j/6) \Delta_j / d_j] / \mu$$

для DD- и LM-схем соответственно. Вследствие (5.18) и (1.1в) справедлива оценка $\bar{g} = O(\varepsilon)(\varepsilon + \zeta)$. Тогда из (5.21a), (5.22a) и (5.19) вытекают неравенства

$$\begin{aligned} |r_{j+1/2}| &\leq |r_{j-1/2}| + \bar{g} \leq |r_{j-3/2}| + 2\bar{g} \leq \dots \leq |r_{1/2}| + j\bar{g} = \\ &|r_{1/2}| + O(1/\Delta) \bar{g} = |r_{1/2}| + (\varepsilon + \zeta) O(\varepsilon/\Delta) = O(\varepsilon + \zeta/\Delta + (\varepsilon + \zeta) \varepsilon/\Delta). \end{aligned}$$

Из этих соотношений получаем аналогичные оценки для моментов ${}^0 r_j$ и ${}^1 r_j$, используя формулы (5.21б) и (5.22б, в). Таким образом, оценка (5.20) доказана.

4. Подставляя в представление (5.3) оценки (5.16) и (5.20) и учитывая условие $\varepsilon = O(\Delta)$ теоремы 3, находим соотношение $\Psi = \Psi^{reg} + O(\xi + (\zeta + \varepsilon^2)/\Delta)$. Отсюда следуют оценки (5.2).

Следствие 4. В условиях теоремы 3 решение Ψ задачи (2.1), (5.1) аппроксимирует решение $\Psi_m(z)$ задачи (1), (2) с погрешностями

$$\|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]\| = \|\mathbf{Er}\| + O(\varepsilon^2) + O(1)[\hat{\mathbf{P}}\chi_m(z)],$$

где $\chi_m(z) = \exp[-\sigma z/\varepsilon] + \exp[-\sigma(Z-z)/\varepsilon]$, а для величин $\|\mathbf{Er}\|$ справедливы оценки теорем 2 и 3.

Это утверждение опирается на оценку (1.33) и неравенство

$$\|\Psi - \hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)]\| \leq \|\mathbf{Er}\| + \|\hat{\mathbf{P}}[\Psi_m(z)] - \Psi_m^{reg}(z)\|.$$

Полученные результаты позволяют в каждом конкретном расчете по итерационному алгоритму оценить близость полученной сеточной функции Ψ к регулярной компоненте $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ через легко вычисляемые функционалы Ψ .

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

1. Построено два грубосеточных алгоритма для определения с хорошей точностью регулярной компоненты $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$. Полученные с их помощью решения неотрицательны и не содержат ложных экстремумов (осцилляций). Оба алгоритма неявные: в асимптотическом алгоритме требуется решить систему сеточных уравнений, аппроксимирующих диффузионную задачу (1.20), (1.21), а в итерационном алгоритме - найти решение задачи (2.2), (2.4). Асимптотический алгоритм более экономичен: для решения аппроксимирующей задачи (1.20), (1.21) системы сеточных уравнений используется метод прогонки, тогда как в итерационном алгоритме используется метод итераций по столкновениям, который в задачах со слабым поглощением сходится крайне медленно. Однако, поскольку искомое решение Ψ является регулярной функцией, эффективны алгоритмы ускорения сходимости в таких задачах.

Анализ расчетных результатов приводит к следующим выводам:

1) точность расчета функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ при уменьшении шага Δ для фиксированного ε , как правило, возрастает, примерно соответствуя установленным оценкам;

2) точность расчета функции $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ при переходе к более высоким приближениям метода дискретных ординат (т.е. при уменьшении $\mu_M = \min |\mu_m|$) для фиксированных ε и Δ не меняется;

3) для LM- и DD-схем точность асимптотического и итерационного алгоритмов примерно одинакова;

4) для LD- и WLD*-схем при расчете нулевых моментов решения итерационный алгоритм несколько точнее асимптотического, а при расчете значений решения на гранях ячеек асимптотический алгоритм существенно точнее итерационного;

5) среди рассмотренных методов наиболее высокой точностью отличаются асимптотический и итерационный алгоритмы LM-схемы. Кроме того, при расчете значений решения на гранях высокоточные результаты дает асимптотический алгоритм WLD*-схемы.

С другой стороны, в грубосеточных расчетах по традиционным сеточным алгоритмам с исходными краевыми условиями, как и в задачах с существенным поглощением [5], как правило, возникают обширные переходные слои, где сеточные решения содержат нефизические осцилляции большой амплитуды, а применение адаптивных алгоритмов коррекции незначительно уменьшает их амплитуду.

2. Для иллюстрации приведем некоторые результаты расчетов задачи (1), (2), (1.1)-(1.2) при

$$Z = 1, \quad \sigma = 1, \quad \sigma_a = 1, \quad Q(z) = \exp(z), \quad (6.1)$$

$$B_m \Big|_{m>0} = \mu_m, \quad B_m \Big|_{m<0} = \mu_m^2 \quad (6.2)$$

для трех значений параметра ε :

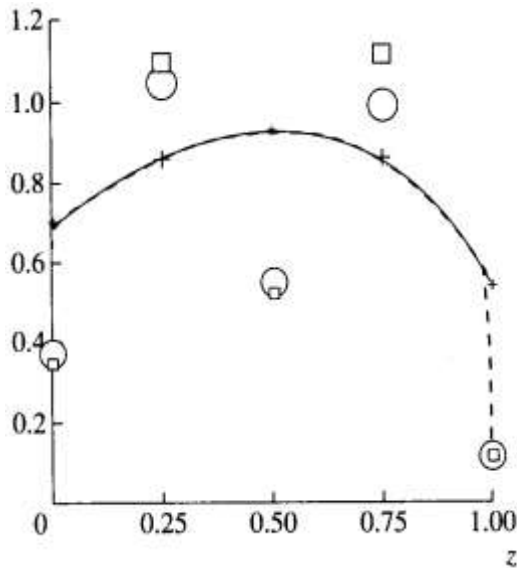
$$\varepsilon_1 = 0.04: \quad \sum_t = 25, \quad \sum_s = 24.96, \quad k_1 = 0.06223, \quad k = 0.6930;$$

$$\varepsilon_2 = 0.02: \quad \sum_t = 50, \quad \sum_s = 49.98, \quad k_1 = 0.03464, \quad k = 0.6928;$$

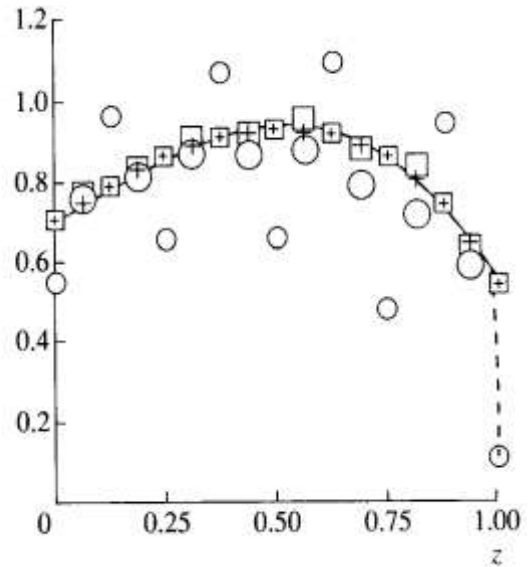
$$\varepsilon_3 = 0.01: \quad \sum_t = 100, \quad \sum_s = 99.99, \quad k_1 = 0.01732, \quad k = 0.6927.$$

Во всех расчетах использовалась квадратура Гаусса $2M = 4$. Грубосеточные расчеты были выполнены на равномерной сетке с шагами $\Delta_1 = 0.5, \Delta_2 = 0.25$ и $\Delta_3 = 0.125$. За проекцию на сетку точного решения

$\Psi_m(z)$ были приняты величины $\Psi_m(z_{j+1/2})$ и ${}^v[\Psi_m(z)]_j$, полученные LM-схемой на равномерной сетке с шагом $\Delta(\varepsilon) = 0.2\varepsilon$.



Фиг.1.



Фиг.2.

Кроме величин $\Psi_{m,j+1/2}$ и ${}^v\Psi_{mj}$ были вычислены значения сеточного решения в центрах ячеек z_j :

$$\Psi_{m,j} = {}^0\Psi_{mj} + [{}^0\Psi_{mj} - (\Psi_{m,j+1/2} + \Psi_{m,j-1/2})/2]/2,$$

а также моменты и значения на гранях усредненного по μ_m сеточного решения ${}^0\Phi_j = \hat{S}[{}^0\Psi_{mj}]$, $\Phi_{j+1/2} = \hat{S}[\Psi_{m,j+1/2}]$.

На фиг.1,2 представлены точное решение $\Psi_{-2}(z)$ (штриховая линия), функция $\tilde{\Psi}_{-2}^{reg}(z)$ (сплошная линия), а также величины $\Psi_{-2,j+1/2}$, $\Psi_{-2,j}$, полученные итерационным методом (символы +), обычной сеточной схемой (символы \square) и сеточной схемой с адаптивным алгоритмом коррекции (символы \circ) для $\varepsilon = 0.01$. Фиг. 1 отвечает LM-схема и шаг $\Delta = 0.5$, а фиг.2 - DD-схема и шаг $\Delta = 0.25$.

Таблица 2

Схе ма	${}^0R(\Phi)$						${}^0R(\Psi)$					
	Δ_1		Δ_2		Δ_3		Δ_1		Δ_2		Δ_3	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
LM	0.14	0.15	0.01	0.03	0.00	0.02	0.14	0.16	0.01	0.04	0.00	0.04
LD	8.86	8.17	3.31	2.85	1.09	0.82	8.97	8.29	3.38	2.93	1.11	0.87
WLD	9.78	9.05	3.54	3.05	1.13	0.82	9.86	9.13	3.60	3.11	1.15	0.87
DD	7.23	7.22	2.95	1.01	1.03	1.01	7.38	7.39	3.04	3.05	1.06	1.08

Таблица 3

Схе ма	${}^e R(\Phi)$						${}^e R(\Psi)$					
	Δ_1		Δ_2		Δ_3		Δ_1		Δ_2		Δ_3	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
LM	0.07	0.08	0.00	0.01	0.00	0.01	0.07	0.09	0.00	0.04	0.00	0.04
LD	1.77	1.73	0.42	0.44	0.11	0.12	1.79	1.92	0.42	0.56	0.11	0.19
WLD	0.14	0.29	0.04	0.13	0.01	0.07	0.30	0.93	0.08	0.47	0.02	0.26
DD	4.76	4.78	1.08	1.08	0.28	0.29	4.89	4.87	1.11	1.13	0.28	0.31

На обеих фигурах величины, относящиеся к граням ячеек, отмечены мелкими значками, а к центрам ячеек - крупными значками.

В табл. 2,3 приведены значения относительных погрешностей:

$${}^0 R(\Psi) = 100 \max_m \max_{1 \leq j \leq J} | {}^0 \Psi_{mj} / {}^0 [\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]_j - 1 |, \quad (6.3a)$$

$${}^0 R(\Phi) = 100 \max_{1 \leq j \leq J} | {}^0 \Phi_j / {}^0 [\tilde{\Phi}^{reg}(z)]_j - 1 |, \quad (6.3б)$$

$${}^e R(\Psi) = 100 \max_m \max_{0 \leq j \leq J} | \Psi_{m,j+1/2} / \tilde{\Psi}_m^{reg}(z_{j+1/2}) - 1 |, \quad (6.3в)$$

$${}^e R(\Phi) = 100 \max_{0 \leq j \leq J} | \Phi_{j+1/2} / \tilde{\Phi}^{reg}(z_{j+1/2}) - 1 | \quad (6.3г)$$

определения регулярных компонент $\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)$ и $\tilde{\Phi}^{reg}(z) = \hat{S}[\tilde{\Psi}_m^{reg}(z)]$ асимптотическими (столбец 1) и итерационными (столбец 2) алгоритмами для $\varepsilon = 0.01$. Они близки к аналогичным значениям, отвечающим $\varepsilon = 0.02$ и $\varepsilon = 0.04$.

Функционалы ζ и ξ , используемые в оценках точности (5.2) представленных на фиг. 1, 2 сеточных решений (итерационный алгоритм), имеют следующие значения: в LM-схеме $\zeta = 0.125E-3$, $\xi = 0.328E-1$, в DD-схеме $\zeta = 0.273E-4$, $\xi = 0.326E-1$.

Представленные результаты в целом соответствуют сформулированным выше выводам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрены вопросы построения и оценки точности эффективных алгоритмов для задач о слоях большой оптической толщины τ^* при слабом поглощении. Построенные алгоритмы опираются на использование грубосеточных (с шагом $\Delta \geq \varepsilon, \varepsilon = 1/\tau^*$) аппроксимаций уравнения переноса для известных схем 2-го – 4-го порядков точности на густых сетках ($\Delta < \varepsilon$) с асимптотическими краевыми условиями.

Для анализа таких аппроксимаций использован метод пограничных слоев сингулярной теории возмущений для критических случаев $\varepsilon \rightarrow 0$. Построены регулярные сеточные приближения к решениям таких задач. Показано, что они аппроксимируют регулярную компоненту первого асимптотического приближения к решению точной задачи. Определение регулярного сеточного приближения сводится к решению устойчивой системы сеточных уравнений, аппроксимирующих (с 1-м – 4-м порядком точности) диффузионное уравнение с краевым условием III рода. Также рассмотрена возможность получения регулярной компоненты решением полной грубосеточной задачи с асимптотическими краевыми условиями.

Проведена серия методических расчетов, подтверждающих, что оба алгоритма расчета регулярных компонент обладают хорошей точностью. При этом расчетные результаты согласуются с теоретическими оценками, найденными для регулярного сеточного приближения.

Предложенный подход к построению грубосеточных схем, допускающий распространение на более сложные задачи для оптически плотных сред (с учетом анизотропии рассеяния и источников, с разрывами свойств среды и источников, с неоднородными геометриями), позволяет в значительной степени упростить расчет регулярной компоненты решения и, в частности, снять трудности, связанные с медленной сходимостью итерационных процессов, использованием густых пространственных и угловых сеток и необходимостью коррекции осциллирующих расчетных результатов.

ПРИЛОЖЕНИЕ I

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ТОЧНОЙ ЗАДАЧИ

1. **Оценки величин $\varphi_{im}, 1/N_i$ и b_i при $\varepsilon \rightarrow 0$.** Оценка величин $\varphi_{\pm im}$ опираются на следующие из (1.7), (1.1) оценки

$$\varphi_{\pm im} = 1 \pm k_1 \mu_m + O(k_1), \quad k_1 = O(\varepsilon) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (\text{П.1})$$

Подставляя это разложение в равенство (1.11), находим

$$N_1 = 4k_1/3 + O(k_1^3) \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (\text{П.2})$$

При $|i| > 1$ воспользуемся представлением

$$\varphi_{im} = \sum_{l=0}^{2M-1} (l+1/2) \varphi_i^{(l)} P_{lm}, \quad \varphi_i^{(l)} = \sum_m \varphi_{im} P_{lm} w_m,$$

где $P_{lm} = P_l(\mu_m)$ – значение полиномов Лежандра, $\varphi_i^{(l)}$ – угловые моменты функции φ_{im} . Они удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$\varphi_i^{(l+1)} = [(2l+1)(1 - \lambda \delta_{l0}) \varphi_i^{(l)} / k_i - l \varphi_i^{(l-1)}] / (l+1), \quad l \geq 0, \quad (\text{П.3})$$

полученным суммированием по m характеристического уравнения (1.6), домноженного на $P_{lm} w_m$. Считается, что $\varphi_i^{(-1)} = 0$, а $\varphi_i^{(0)} = 2/\lambda$ в соответствии с принятой нормировкой функции φ_{im} . Отсюда следует ограниченность величин φ_{im} при всех значениях $|k_i| > 1$, т.е. справедливость оценки (1.12) для φ_{im} при всех $i \neq \pm 1$.

Суммируя по m уравнения (1.6), домноженные на $\varphi_{im} w_m$, имеем

$$k_i N_i = (1 - \lambda)(\varphi_i^{(0)})^2 / 2 + \sum_{l=1}^{2M-1} (l + 1/2)(\varphi_i^{(l)})^2 > 0.$$

Так как $\varphi_i^{(0)} = 2/\lambda$, а $\varphi_i^{(1)} = O(\varepsilon^2)$, $\varphi_i^{(2)} = -1 + O(\varepsilon^2)$ вследствие (П.3), справедливо неравенство $|N_i| > [5/2 + O(\varepsilon^2)]/|k_i|$, из которого следуют оценки (1.12) для N_i при всех $i \neq \pm 1$.

В задачах с $F(z) \equiv 0$, используя в (1.10) оценки (1.2) и (1.12), получаем оценки (1.13) величин b_i .

2. Построим функцию W_m , $m = 1, 2, \dots, M$, ортогональную в R_M -пространстве к функциям φ_{im} при $i > 1$. Пусть

$$\theta_m(z) = [\exp(k_1 \Sigma_t z) \varphi_{-1m} - \exp(-k_1 \Sigma_t z) \varphi_{1m}] / N_1 + \sum_{j \geq 1} C_j \exp(-k_1 \Sigma_t z) \varphi_{jm}, \quad (\text{П.4})$$

где C_j — числовые коэффициенты, является решением краевой задачи $\hat{T}[\theta_m(z)] = 0$ при $z > 0$, $\theta_m(0) = 0$ при $m > 0$ для полубесконечного слоя $[0, \infty)$ и $W_m = \mu_m \theta_{-m}(0)$ при $m > 0$. Поскольку $\theta_m(z) \rightarrow \infty$ при $z \rightarrow \infty$, для достаточно большого z эта функция удовлетворяет краевой задаче (1), (2) при $B_m|_{m>0} = 0$, $B_m|_{m<0} > 0$ и потому $\theta_m(z) > 0 \quad \forall z > 0$ и также $W_m > 0$.

Условия ортогональности следуют из соотношений

$$\sum_{m>0} \varphi_{jm} W_m w_m = \sum_{m=-M}^M \varphi_{jm} W_m \theta_{-m}(0) w_m = \sum_{m=-M}^M \varphi_{jm} \mu_m \varphi_{1m} w_m / N_1 = \delta_{j1}, \quad (\text{П.5})$$

справедливых при $j > 0$ вследствие определения (П.4), равенств $\varphi_{j-m} = \varphi_{-jm}$ и условий ортогональности (1.11).

Коэффициенты C_j в (П.4) — ограниченные величины. При $j > 1$

$$C_j = \sum_{m<0} \varphi_{jm} \mu_m \theta_m(0) w_m / N_j = - \sum_{m>0} \varphi_{1m} (\varphi_{-jm} / \varphi_{1m}) W_m w_m / N_j = O(1)$$

вследствие равенств $\varphi_{j-m} = \varphi_{-jm}$, соотношений (П.5), (1.11) и оценок (1.12).

Коэффициент C_1 представим суммой

$$\sum_{m>0} (\varphi_{1m} - \varphi_{-1m}) W_m w_m / N_1.$$

Используя здесь оценки (П.1) и (П.2), находим $C_1 = (3/2)W^{(1)} + O(k_1^2)$, где

$$W^{(1)} = \sum_{m>0} \mu_m W_m w_m = \sum_{m>0} \varphi_{1m} W_m (\mu_m / \varphi_{1m}) w_m \asymp 1 \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (\text{П.6})$$

Таким образом, все $C_j = O(1)$ и $W_m = O(1)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

3. Для доказательства леммы 1 домножим разложения (1.8), (1.9) на $W_m w_m$ и просуммируем по $m > 0$ при $z = 0$ и по $m < 0$ при $z = Z$. Учитывая граничные условия (2) и условия ортогональности (1.16), получаем следующую систему уравнений для коэффициентов b_i :

$$b_1 + \alpha b_{-1} = B^+ - \beta^+, \quad b_{-1} + \alpha b_1 = B^- - \beta^-, \quad (\text{П.7})$$

где

$$\beta^\pm = \sum_{j>1} b_{\mp j} K_j \exp(-k_j \tau^*), \quad \alpha = K_1 \exp(-k_1 \tau^*),$$

$$K_j = \sum_{m>0} \varphi_{-jm} W_m w_m = O(1), \quad B^\pm = \sum_{m>0} B_{\pm m} W_m w_m.$$

Вследствие оценок (П.1), (П.6), (1.12), (1.13), условий (1.1) и неравенств $0 < \varphi_{-1m} < \varphi_{1m}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ справедливы оценки $K_j \Big|_{j>0} = O(1)$,

$$\beta^\pm = O(1) \exp(-\tau^*), \quad \tau^* = \sum_j Z = O(1/\varepsilon), \quad (\text{П.8a})$$

$$0 < K_1 < \sum_{m>0} \varphi_{1m} W_m w_m = 1, \quad K_1 = 1 - 2k_1 W^{(1)} + O(k_1^3). \quad (\text{П.8б})$$

Поскольку коэффициенты $b_{\pm 1}^0$, определяющие приближение $\Psi_m^{as}(z)$, удовлетворяют системе уравнений (П.7) при $\beta^\pm = 0$, то разности $\mathbb{R}_\pm = b_{\pm 1}^0 - b_{\pm 1}$ являются решениями этой же системы с правыми частями, равными β^\pm , т.е. $\mathbb{R}_\pm = (\beta^\pm - \alpha \beta^\mp) / (1 - \alpha^2)$. Разность $G_m(z) = \Psi_m^{reg}(z) - \Psi_m^{as}(z) = \mathbb{R}_+ \Phi_m^1 + \mathbb{R}_- \Phi_m^{-1}$ удовлетворяет однородному уравнению (1) при краевых значениях $B_m \Big|_{m>0} = G_m(0)$ и $B_m \Big|_{m<0} = G_m(Z)$.

Оценим величину $G_m(0) = g_m^+ \beta^+ + g_m^- \beta^-$, где

$$g_m^+ = [\varphi_{1m} - K_1 \exp(-2k_1 \tau^*) \varphi_{-1m}] / [1 - K_1^2 \exp(-2k_1 \tau^*)],$$

$$g_m^- = -\exp(-k_1 \tau^*) (K_1 \varphi_{1m} - \varphi_{-1m}) / [1 - K_1^2 \exp(-2k_1 \tau^*)].$$

Опираясь на оценки (П.1), (П.8б), приходим к соотношениям

$$|g_m^+| \leq |\varphi_{1m} - K_1 \exp(-2k_1 \tau^*) \varphi_{-1m}| / [1 - \exp(-2k_1 \tau^*)] = 1 + O(1/\tau^*) r(2k_1 \tau^*),$$

$$|g_m^-| \leq |K_1 \varphi_{1m} - \varphi_{-1m}| / [1 - \exp(-2k_1 \tau^*)] = O(1/\tau^*) r(2k_1 \tau^*),$$

где $r(u) = u/(1 - e^{-u})$. Так как $0 < u/(1 - e^{-u}) < e^u \quad \forall u > 0$, то $r(u) = O(1)$ при $0 < u = 2k_1 \tau^* = O(1)$ и $\varepsilon \rightarrow 0$. Отсюда и из (П.8а) следуют оценки $g_m^\pm = O(1)$ и $G_m(0) = O(1) \exp(-\sigma Z / \varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Аналогичным образом оцениваются величины $G_m(Z)$, и, наконец, соотношение (1.2) позволяет убедиться в справедливости леммы 1.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

СВОЙСТВА СЕТОЧНЫХ ДИФФУЗИОННЫХ ЗАДАЧ (3.10), (3.15)

И (3.12), (3.15)

1. Воспользуемся выражениями (3.9) для моментов ${}^v\phi_j^0$ и приведем сеточные уравнения (3.10), (3.12) к традиционной трехточечной форме

$$a_j \phi_{j-1/2} - c_j \phi_{j+1/2} + b_j \phi_{j+3/2} = G_j, \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad (\text{П.9})$$

опустив верхний индекс 0. Здесь введены следующие обозначения:

$$a_j = h_j^- / (\Delta_j + \Delta_{j+1}), \quad b_j = h_{j+1}^- / (\Delta_j + \Delta_{j+1}), \quad (\text{П.10а})$$

$$c_j = (h_j^+ + h_{j+1}^+) / (\Delta_j + \Delta_{j+1}), \quad (\text{П.10б})$$

$$h_j^\pm = [2 + \gamma_j (v/6 \pm H_j)] / (3\sigma \Delta_j), \quad \gamma_j = 3\sigma \sigma_a \Delta_j^2, \quad H_j = 1 / (2 + \delta_{LM} \gamma_j / 6),$$

$$G_j = \hat{V}_j^{ex} [{}^0Q, {}^1Q] - \sigma \sigma_a \delta_{LM} (\Delta_j^3 H_j {}^0Q_j + \Delta_{j+1}^3 H_{j+1} {}^0Q_{j+1}) / [2(\Delta_j + \Delta_{j+1})],$$

$\delta_{LM} = 0$ для DD- и W-схем, $\delta_{LM} = 1$ для LM-схемы, оператор \hat{V}_j^{ex} определяется выражением (3.7в) и $v = (1 + p)/(p + q) \in [1, 3]$ для W- и LM-схем, а в DD-схеме $v=0$ и ${}^1Q_j \equiv 0$.

Подставим далее выражения (3.13) для величин $\phi_{1/2}^1$ и $\phi_{J+1/2}^1$ в краевые условия (3.15) и представим эти условия в следующем виде:

$$\phi_{1/2} = v_1 \phi_{3/2} + B_L, \quad \phi_{J+1/2} = v_J \phi_{J-1/2} + B_R, \quad (\text{П.11})$$

где

$$v_j = u_j^- / (1 + u_j^+) \quad \text{при } j = 1 \text{ и } j = J, \quad (\text{П.12})$$

$$u_j^\pm = \varepsilon k [1 + \gamma_j (v/12 \pm H_j/2)] / (\sigma \Delta_j), \quad (\text{П.12б})$$

$$B_L = [B^+/W^0 + 3\varepsilon\kappa(\Delta_1({}^0Q_1 - {}^1Q_1/3)/2 - \chi_1)]/(1 + u_1^+),$$

$$B_R = [B^-/W^0 + 3\varepsilon\kappa(\Delta_J({}^0Q_J - {}^1Q_J/3)/2 - \chi_J)]/(1 + u_J^+)$$

при $\chi_j = \delta_{LM} \sigma \sigma_a H_j {}^0Q_j \Delta_j^3/4$ для $j=1$ и $j=J$.

2. Докажем, что для сеточной задачи (П.9), (П.11) в предположениях (3.16) выполнены условия

$$0 < a_j, \quad 0 < b_j, \quad 0 < c_j, \quad 0 < v_j < 3/5, \quad c_j - a_j - b_j > 0. \quad (\text{П.13})$$

Положительность величин a_j, b_j, c_j, v_j следует из положительности величин h_j^\pm, u_j^\pm , опирающейся на определения (П.10), (П.12). Остальные оценки (П.13) вытекают из соотношений

$$\begin{aligned} c_j - a_j - b_j &= (h_j^+ - h_j^- + h_{j+1}^+ - h_{j+1}^-)/(\Delta_j + \Delta_{j+1}) = \\ &= 2\sigma_a(\Delta_j H_j + \Delta_{j+1} H_{j+1})/(\Delta_j + \Delta_{j+1}) > 0 \end{aligned}$$

$$1/(1 - v_j) = (1 + u_j^+)/ (1 + u_j^+ - u_j^-) = \quad (\text{П.14})$$

$$\begin{aligned} [1 + \omega_j + \omega_j \gamma_j (H_j/2 + v/12)] / (1 + \omega_j \gamma_j H_j) < \\ < 1 + \omega_j + \omega_j \gamma_j (H_j/2 + v/12) < 5/2 \end{aligned}$$

при $\omega_j = \varepsilon k / (\sigma \Delta_j) \leq \kappa < 1, \quad v \leq 3, \quad H_j \leq 1/2$.

Условия (П.13) означают, что для сеточной системы (П.9), (П.11) справедлив принцип максимума (см. [8]). Поэтому она однозначно разрешима и решение удовлетворяет оценке

$$\| \phi^e \| \leq \| G \| / \min_i (c_i - a_i - b_i) + \max[|B_L| / (1 - v_1), |B_R| / (1 - v_J)].$$

Используя здесь (П.13), (П.14), находим

$$\| \phi^e \| = [\| G \| / \sigma_a + \max(|B_L|, |B_R|)] O(1). \quad (\text{П.15})$$

3. Эта оценка, однако, слишком завышена, если σ_a мало. Получим более сильную оценку

$$\| \phi^0 \| = [\| G \| + \max(|B_L|, |B_R|)] O(1). \quad (\text{П.16})$$

При $G_j \equiv 0$ оценка (П.16) совпадает с (П.15). В случае $B_L = B_R = 0, G_j \equiv 0$ для вывода оценки (П.16) помимо условий (П.13) используются следующие свойства величин a_j, b_j, c_j :

$$a_{j+1}/b_j = (\Delta_j + \Delta_{j+1}) / (\Delta_{j+1} + \Delta_{j+2}), \quad a_i/b_j \asymp 1, \quad 1/b_j = O(\Delta^2). \quad (\text{П.17})$$

Вспользуемся формулами метода прогонки для задачи (П.9), (П.11):

$$a_{j+1} = b_j / (c_j - a_j \alpha_j), \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad \alpha_1 = v_1,$$

$$\beta_{j+1} = (-G_j - a_j \beta_j) / (c_j - a_j \alpha_j), \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad \beta_1 = 0,$$

$$\phi_{j-1/2} = \alpha_j \phi_{j+1/2} + \beta_j, \quad 1 \leq j \leq J, \quad \phi_{J+1/2} = v_J \beta_J / (1 - \alpha_J v_J).$$

Докажем, что в условиях (П.13) выполнены неравенства

$$|\alpha_j| < 1, \quad c_i - a_i \alpha_i > b_i < 0, \quad 1 - \alpha_j v_j > 2/5. \quad (\text{П.18})$$

Действительно, первая оценка (П.18) выполнена при $j = 1$. Пусть она выполнена для $j = i$. Тогда справедлива вторая оценка (П.18) при $j = i$

$$c_i - a_i \alpha_i \geq c_i - a_i |\alpha_i| > c_i - a_i > b_i > 0$$

и третья оценка (П.18)

$$1 - \alpha_j v_j \geq 1 - |\alpha_j| v_j > 1 - v_j > 2/5.$$

Неравенства (П.18) прежде всего означают, что знаменатели в формулах прогонки не обращаются в ноль. Далее с помощью (П.13), (П.17), (П.18) получим оценку (П.16).

Действительно, используя (П.13), (П.18) в формулах прогонки, находим соотношения

$$\begin{aligned} |\phi_{j+1/2}| &\leq |\beta_j| 3/2, \\ |\phi_{j+1/2}| &\leq |\beta_j| + |\phi_{j-1/2}|, \quad |\beta_{j+1}| \leq [|G_j| + |\beta_j| a_j] / b_j. \end{aligned} \quad (\text{П.19})$$

Опираясь на последние два неравенства, по индукции доказываем следующие оценки:

$$|\phi_{j+1/2}| \leq \sum_{i=1}^j |\beta_i| + |\phi_{j+1/2}|, \quad (\text{П.20})$$

$$|\beta_j| \leq \sum_{i=1}^{j-1} (|G_j| / b_i) \Upsilon_{ij}, \quad \text{где} \quad \Upsilon_{ij} = \prod_{k=i+1}^{j-1} a_k / b_k. \quad (\text{П.21})$$

Из (П.17) и третьего условия (3.16) следует соотношение

$$\Upsilon_{ij} = [(\Delta_{i+1} + \Delta_{i+2}) / (\Delta_{j-1} + \Delta_j)] a_{i+1} / b_{j-1} \approx 1. \quad (\text{П.22})$$

Подставляя в (П.20) оценки (П.19), (П.21), (П.22), приходим к (П.16).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Habetler G., Matkowsky B. Uniform asymptotic expansion in transport theory with small mean free paths and the diffusion approximation // J. Math. Phys. 1975. V.16 № 4-5. P. 846-854.
2. Larsen E.W., Morel J.E. Asymptotic solution in numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes. II//J/ Comput. Phys. 1989. V.83. P.212-236.
3. Гермогенова Т.А. Регулярные компоненты асимптотических приближений к решениям уравнения переноса в оптически плотных средах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. №4. С. 464-484.
4. Germogenova T. A. Asymptotic approximations to transport equation solution in optically thick domains//Transp. Theor. and Statist. Phys. 1998. V.2. №5-7. P.523-546.

5. *Гермогенова Т.А., Николаева О.В.* Грубосеточные аппроксимации уравнения переноса излучения. Задачи с существенным поглощением // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2001. Т, 41. №4. С.620-640.

6. *Васильева А.Б., Бутузов В.Ф.* Сингулярно – возмущенные уравнения в критических случаях. М: Изд-во МГУ, 1978.

7. *Басс Л.П., Волощенко А.М., Гермогенова Т.А.* Метод дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМатем. АН СССР, 1986.

8. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989.

9. *Averin A.V., Voloschenko A.M., Kondratenko E.P., Dubinin A.A.* The ROZ-6.4. One-dimensional discrete ordinates neutrons, gamma-rays, and charged particles transport code//Proc. Internat. Top. Meeting Advances Math. Comput. and Reactor Phys. Pittsburgh, USA, April 28-May 2. 1991. Vol.5.P.30.3.5-1-30.3.5-4.

