

УДК 519.642.2

RDSA-МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ

А. Д. Гаджиев, И. А. Кондаков, А. А. Шестаков
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Предлагается диффузионно-синтетический метод ускорения итераций, основанный на схеме РОМБ (RDSA-метод). Он применяется для решения уравнения переноса нейтронов в сферически-симметричной и плоской системах.

Введение

В силу интегродифференциального характера уравнения переноса при его численном решении приходится строить итерационный процесс по интегралу столкновений [1, 2]. Метод простых итераций в задачах распространения нейтронов в односкоростном приближении с отношением $c = \beta/\alpha$, близким к единице, сходится очень медленно. Поэтому необходимо ускорение этих итераций. С другой стороны, в диффузионном приближении задача решается безытерационно. Отсюда возникает идея использования диффузионного приближения для ускорения итераций.

Впервые диффузионный метод ускорения итераций был применен в [3]. В работе [4] В. Я. Гольдиным было предложено использовать нелинейный квазидиффузионный метод ускорения итераций. Далее, в [5] на дифференциальном уровне были исследованы скорости сходимостей итераций с диффузионным ускорением и без него: спектральный радиус для итераций без ускорения оказался равен $spr = c = \beta/\alpha$, а с ускорением $spr < 0,23c$. Таким образом, в своей дифференциальной недискретизированной форме диффузионное ускорение дает существенный эффект в задачах с $c \approx 1$.

Однако впоследствии выяснилось, что диффузионное ускорение в той форме, в которой оно было реализовано, сходится при малых размерах сетки h и может расходиться при росте h . Эту ситуацию проанализировал У. Рид в работе [6]. Он исследовал DD-схему для уравнения переноса и схему с центральной разностью для диффузии. Комбинируя аналитические и численные результаты, Рид установил следующее:

- DD-схема без ускорения имеет $spr = c$ для любых h и, таким образом, сходится всегда;
- для DD-схемы с диффузионно-синтетическим ускорением итерации сходятся при малых h , но метод имеет спектральный радиус, зависящий от h в виде ограничения снизу: $spr \geq \frac{c}{\frac{4}{3h^2} + 1 - c}$. Отсюда при $h > h^* = \frac{2}{[3(2c - 1)]^{1/2}}$ получается $spr > 1$, что означа-

ет расходимость итераций.

Проблема получения диффузионно-синтетического метода ускорения, который бы сходился при всех h , была решена Р. Алкоффом [7, 8] для DD-схемы на прямоугольных сетках. Он установил, что разностная схема для диффузионного ускорения должна быть согласована со схемой для кинетического уравнения. Для таких схем Алкофф получил $spr < c$ независимо от h , уточненные оценки [9] впоследствии дали результат $spr \leq 0,23c$, который совпадает с результатом для непрерывного случая. Следует отметить, что идея согласованности еще раньше была сформулирована в [10] В. Е. Трощевым и применена к методу ускорения итераций для одномерной сферической геометрии.

Дж. Морел [11] показал, что в задачах с анизотропией ускоряющее уравнение целесообразнее брать в форме P_1 -приближения, которое при ускорении позволяет подправлять одновременно ток и поток частиц. Даже в задачах с очень сильной анизотропией этот метод оказался весьма эффективным в противоположность диффузионно-синтетическому методу Алкоффа, в котором при ускорении подправляется только нулевой момент.

Э. Ларсен [12, 13] развил идеи Алкоффа и Морела и сформулировал формализованную многошаговую процедуру построения диффузионно-синтетического метода ускорения итераций для плоской системы и различных методов переноса (WDD-схема, LD-схема, LC-схема). Многошаговая процедура Ларсена включает в себя:

- 1) P_1 -проектирование разностных уравнений для уравнения переноса;
- 2) P_1 -проектирование соотношений связи для уравнения переноса;
- 3) P_1 -проектирование граничных условий;
- 4) переход к P_1 -уравнениям относительно поправок;
- 5) преобразование полученных уравнений к виду с центральными разностями и решение полученных уравнений.

Многошаговую процедуру Ларсена формально можно применять к уравнению переноса для любых геометрий и схем. Однако для многомерных криволинейных геометрий получаемая осредненная система P_1 -уравнений оказывается очень сложной и выполнение шага 5 становится проблематичным. В частности, не удается преобразовать P_1 -уравнения к виду с центральными разностями для их последующего решения.

В данной работе предлагается диффузионно-синтетический метод ускорения итераций, основанный на схеме РОМБ (RDSA-метод). Он согласован с разностным методом решения уравнения переноса. Для согласования используется многошаговая процедура Ларсена, но из-за использования схемы РОМБ сама процедура упрощается. На шаге 5 не требуется перехода к трехточечному виду, поскольку полученная система P_1 -уравнений решается непосредственно. Метод обобщается на многомерные криволинейные геометрии, что является важным достоинством нового подхода.

1. Постановка задачи

Рассматривается система одномерных многогрупповых уравнений переноса нейтронов [14, 15]:

$$\frac{\xi}{v_g} \frac{\partial N_g}{\partial t} + \frac{\mu}{r^\eta} \frac{\partial}{\partial r} (r^\eta N_g) + \frac{\eta}{2r} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^2) N_g] + \alpha_g N_g = \sum_{g'=1}^G \frac{\beta_{g'g}}{2} \int_{-1}^1 N_{g'} d\mu + \frac{f_g}{2} = Q_g(r), \quad (1)$$

$$g = 1, 2, \dots, G,$$

где t — время; r — пространственная переменная; μ — косинус угла между направлением полета нейтронов и осью r ; v_g — скорость нейтронов группы g ; $N_g(r, \mu)$ — функция распределения нейтронов группы g ; $\alpha_g(r)$ — коэффициент поглощения нейтронов; $\beta_{g'g}(r)$ — коэффициент размножения нейтронов с учетом переходов нейтронов между группами g и g' ; $f_g(r, t)$ — заданный независимый источник; $\xi = 0$ в стационарном случае, $\xi = 1$ — в нестационарном; $\eta = 0$ в плоской геометрии, $\eta = 2$ — в сферически-симметричной.

Система (1) решается в прямоугольнике $D = \{0 \leq r \leq R, -1 \leq \mu \leq 1\}$ с граничными условиями

$$N_g(R, \mu, t) = \varphi_g(\mu, t) \quad \text{для} \quad \mu \leq 0.$$

Отметим, что из самой системы (1) можно получить два следствия: уравнение при $\mu = -1$

$$\frac{\xi}{v_g} \frac{\partial N_g(r, -1)}{\partial t} - \frac{\partial N_g(r, -1)}{\partial r} + \alpha_g N_g(r, -1) = Q_g$$

и условие при $r = 0$

$$\frac{\partial N_g(0, \mu)}{\partial \mu} = 0. \quad (2)$$

Обычно вместо (2) в качестве граничного условия при $r = 0$, $\mu > 0$ берется

$$N_g(0, \mu) = N_g(0, -\mu).$$

Начальное условие:

$$N_g(r, \mu, t) \Big|_{t=t^0} = N_g^0(r, \mu).$$

2. Разностная аппроксимация

Систему (1) будем аппроксимировать, используя DS_n -метод с искусственной диссипацией (схему DDAD) [16]:

$$\begin{aligned} \frac{\xi}{\tau v_g} (N_g^{n+1} - N_g^n) + \text{div}_h (\vec{\Omega} \psi_g)^{n+1/2} + \alpha_g N_g^{n+1/2} &= Q_g^{n+1/2}; \\ N_g^{n+1/2} = \psi_g^{n+1/2} + \delta_g h \text{div}_h (\vec{\Omega} \psi_g^{n+1/2}) - h \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \text{div}_h (\vec{\Omega} S \psi_{g'}^{n+1/2}). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tau = \tau^n = t^{n+1} - t^n; \quad N_g = N_{g,m,i+1/2} &= \frac{1}{\omega_m \Delta V_i} \int_{r_i}^{r_{i+1}} r^\eta \partial r \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} N_g d\mu, \quad \Delta V_i = \frac{1}{\eta+1} (r_{i+1}^{\eta+1} - r_i^{\eta+1}); \\ \text{div}_h (\vec{\Omega} N_g) &= \mu_m \frac{r_{i+1}^\eta N_{g,m,i+1} - r_i^\eta N_{g,m,i}}{\Delta V_i} + \frac{\eta}{2} \frac{c_i}{\Delta V_i} \frac{a_{m+1/2} N_{g,m+1/2,i+1/2} - a_{m-1/2} N_{g,m-1/2,i+1/2}}{\omega_m}, \\ c_i &= r_{i+1}^\eta - r_i^\eta; \\ Q_g^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} S N_{g'}^{n+1/2} + \frac{f_g^{n+1/2}}{2}, \quad S N_{g'}^{n+1/2} = \sum_{m=1}^M (N_g)_{m,i+1/2}^{n+1/2} \omega_m, \quad f_{g,i+1/2} = \frac{1}{\Delta V_i} \int_{r_i}^{r_{i+1}} r^\eta f_g \partial r; \end{aligned}$$

$\psi_g^{n+1/2}$ — вспомогательная диссипативная функция (причины ее появления подробно описаны в [16]); ω_m — веса квадратурных формул; $\delta_g, \theta_{g'g} \geq 0$ — весовые параметры искусственной диссипации; $h = h_i = r_{i+1} - r_i$ — линейный размер ячейки; индексы n, i, m, g описывают разностную сетку с шагами $r^n, \Delta V_i, \Delta \mu_m, \Delta v_g$ соответственно по временной, пространственной, угловой и энергетической переменным.

В направлении времени t применим соотношения связи с весом

$$N_g^{n+1/2} = \gamma_g N_g^{n+1} + (1 - \gamma_g) N_g^n, \quad \gamma_g \in \left[\frac{1}{2}, 1 \right],$$

откуда

$$N_g^{n+1} = p_g N_g^{n+1/2} - (p_g - 1) N_g^n, \quad p_g = \frac{1}{\gamma_g}. \quad (4)$$

Подставляя (4) в первое уравнение системы (3), имеем

$$q_g N_g^{n+1/2} + \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \psi_g)^{n+1/2} = \frac{\xi p_g}{\tau v_g} N_g^n + Q_g^{n+1/2}, \quad (5)$$

где $q_g = \frac{\xi p_g}{\tau v_g} + \alpha_g$.

Подставляя в (5) второе уравнение системы (3), получаем

$$q_g \psi_g^{n+1/2} + (1 + q_g \delta_g h) \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \psi_g^{n+1/2}) = \frac{\xi p_g}{\tau v_g} N_g^n + Q_g^{n+1/2} + q_g h \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} S \psi_{g'}^{n+1/2}), \quad (6)$$

$$i = 0, 1, \dots, I-1; \quad m = 0, 1, \dots, M; \quad g = 1, 2, \dots, G.$$

Полученное уравнение относительно $\psi_g^{n+1/2}$ будем решать DS_n -методом. Соотношения связи по пространственным переменным имеют вид

$$\psi = \psi_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\psi_i + \psi_{i+1}); \quad \psi = \psi_m = \frac{1}{2} (\psi_{m-1/2} + \psi_{m+1/2}). \quad (7)$$

Для выбора δ , θ используются следующие формулы:

- 1) аналог St-схемы (DSt-схема): $\delta_g = \frac{1}{2}$; $\theta_{g'g} = 0$;
- 2) DD-схема: $\delta_g = 0$; $\theta_{g'g} = 0$;
- 3) аналог CM-схемы: $\delta_g = \frac{\alpha_g h}{12}$; $\theta_{g'g} = 0$. Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В3;
- 4) аналог SC-схемы: $\delta_g = \frac{1}{2} \frac{1 + e^{-\alpha_g h}}{1 - e^{-\alpha_g h}} - \frac{1}{\alpha_g h}$; $\theta_{g'g} = 0$. Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В4;
- 5) аналог LM-схемы: $\delta_g = \frac{\alpha_g h}{12}$; $\theta_{g'g} = \frac{\beta_{g'g} h}{24} = \frac{\delta_g \beta_{g'g}}{2 \alpha_g}$. Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В5;
- 6) аналог LC-схемы: $\delta_g = \frac{1}{2} \frac{1 + e^{-\alpha_g h}}{1 - e^{-\alpha_g h}} - \frac{1}{\alpha_g h}$; $\theta_{g'g} = \frac{\beta_{g'g}}{2 \alpha_g} \delta_g$. Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В6;
- 7) $\delta_g = \frac{\alpha_g h}{8}$; $\theta_{g'g} = \frac{\beta_{g'g} h}{16} = \frac{\delta_g \beta_{g'g}}{2 \alpha_g}$. Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В7;
- 8) $\delta_g = \frac{\alpha_g h}{4}$; $\theta_{g'g} = \frac{\delta_g}{2}$; $\theta_{g'g} = 0$ при $g' \neq g$ (P_1 -согласованная схема). Условное обозначение этой схемы в численных расчетах — В8.

DSt-схема имеет первый порядок точности, а все остальные схемы — второй порядок. Что касается CM, SC, LM и LC-схем, то для общего случая они сложны и их нельзя задавать с помощью одних лишь параметров δ , θ . Можно говорить об аналогии схемы DDAD с этими схемами вдоль характеристической линии при указанном выборе параметров δ , θ .

После нахождения $\psi_{g'}^{n+1/2}$ в центрах ячеек и на гранях можем определить $N_g^{n+1/2}$ в центрах ячеек из второго уравнения (3) либо из уравнения (5).

Дополним разностные уравнения начальными и граничными условиями:

$$(N_g)_{i+1/2,m}^n \Big|_{n=0} = (N_g)_{i+1/2,m}^0;$$

$$(\psi_g)_{I,m}^{n+1/2} = (\psi_g)_m^{n+1/2}, \quad m = 0, 1, \dots, \frac{M}{2}; \quad (8)$$

$$(\psi_g)_{0,m}^{n+1/2} = (\psi_g)_{0,M-m+1}^{n+1/2}, \quad m = \frac{M}{2} + 1, \dots, M. \quad (9)$$

На границе для функции ψ предполагается $\psi_g = N_g$.

Поскольку система уравнений является интегродифференциальной, то для решения уравнения (6) будем применять метод итераций по интегралу столкновений:

$$q_g \psi_g^{\nu+1/2} + (1 + q_g \delta_g h) \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} \psi_g^{\nu+1/2}) = (F_g^\nu)_{i+1/2,m};$$

$$(F_g^\nu)_{i+1/2,m} = \frac{\xi P_g}{\tau \nu_g} (N_g^n)_{i+1/2,m} + (QQ_g^\nu)_{i+1/2} + (R_g^\nu)_{i+1/2} + \frac{1}{2} (f_g)_{i+1/2};$$

$$(QQ_g^\nu)_{i+1/2} = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} (SN_{g'}^\nu)^{\nu+1/2} + \frac{1}{2} \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} U_{g'}^\nu;$$

$$\operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} S \psi_g) = \mu_m \left(\frac{r_{i+1}^\eta (S \psi_g)_{i+1} - r_i^\eta (S \psi_g)_i}{\Delta V_i} - \frac{\eta}{2} \frac{C_i}{\Delta V_i} (S \psi_g)_{i+1/2} \right);$$

$$(R_g^\nu)_{i+1/2} = q_g h \sum_{g'=1}^{g-1} \theta_{g'g} \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} S \psi_{g'}^{\nu+1/2}) + q_g h \sum_{g'=g}^G \theta_{g'g} \operatorname{div}_h (\tilde{\Omega} S \psi_{g'}^\nu);$$

$$i = 0, 1, \dots, I-1; \quad m = 0, 1, \dots, M; \quad g = 1, 2, \dots, G;$$

ν — итерационный индекс. $(SN_{g'}^\nu)^{\nu+1/2}$, $(S \psi_{g'}^\nu)^{\nu+1/2}$ вычислены на основе решения кинетического уравнения для предыдущих групп ($g' = 1, 2, \dots, g-1$); $U_{g'}^\nu$, $(S \psi_{g'}^\nu)^\nu$ вычислены на основе RDSA-метода.

Таким образом, итерации по интегралу столкновений представляют собой симбиоз итераций двух типов:

- 1) межгрупповых итераций Зейделя;
- 2) внешних межгрупповых итераций ν , ускоряемых на основе RDSA-метода.

Метод ускорения итераций подробно изложен в следующем разделе.

3. Диффузионно-синтетический метод ускорения итераций на основе схемы РОМБ (RDSA-метод)

Для согласования кинетического и диффузионного уравнений применим многошаговую процедуру Ларсена.

P_1 -проектирование разностных уравнений переноса. Введем в рассмотрение разностные операторы S_0 , S_1 :

$$S_0(N) = \sum_{m=1}^M N_m \omega_m; \quad S_1(N) = \sum_{m=1}^M \mu_m N_m \omega_m.$$

Для сокращения записи будем применять обозначения

$$S_0(N) = \Phi^0; \quad S_1(N) = \Phi^1; \quad S_0(\psi) = H^0; \quad S_1(\psi) = H^1.$$

Применим операторы S_0, S_1 к системе уравнений (3) с итерационным индексом $\nu + 1/2$:

$$\begin{aligned} \frac{\xi}{\tau\nu_g} \left(\left(\Phi_g^0 \right)^{\nu+1/2} - (\Phi_g^0)^n \right) + \frac{r_{i+1}^\eta (H_g^1)_{i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (H_g^1)_i^{\nu+1/2}}{\Delta V_i} + \alpha_g (\Phi_g^0)^{\nu+1/2} &= S_0 (Q_g^\nu) \equiv \\ &\equiv \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} (\Phi_{g'}^0)^{\nu+1/2} + \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} u_{g'}^\nu + f_g; \\ \frac{\xi}{\tau\nu_g} \left(\left(\Phi_g^1 \right)^{\nu+1/2} - (\Phi_g^1)^n \right) + \frac{1}{3} \frac{r_{i+1}^\eta (H_g^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (H_g^0)_i^{\nu+1/2}}{\Delta V_i} - \frac{1}{3} \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} (H_g^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} + \\ + \alpha_g (\Phi_g^1)^{\nu+1/2} &= (R_g^1)^{\nu+1/2}; \end{aligned} \quad (10)$$

$g = 1, 2, \dots, G$,

где

$$\begin{aligned} (R_g^1)^{\nu+1/2} &= -\frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \sum_m \left[\mu_m (a_{m+1/2} \psi_{g,m+1/2}^{\nu+1/2} - a_{m-1/2} \psi_{g,m-1/2}^{\nu+1/2}) + \frac{1}{3} \psi_{g,m}^{\nu+1/2} \omega_m \right] - \\ &- \frac{1}{\Delta V_i} \sum_m \left(\mu_m^2 - \frac{1}{3} \right) (r_{i+1}^\eta (\psi_g)_{m,i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (\psi_g)_{m,i}^{\nu+1/2}) \omega_m. \end{aligned}$$

Если справедливо P_1 -приближение $N = \frac{1}{2} \Phi^0 + \frac{3}{2} \mu \Phi^1$, $\psi = \frac{1}{2} H^0 + \frac{3}{2} \mu H^1$, то

$$\begin{aligned} R^1 &= -\frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \left[\frac{\Phi^0}{2} \sum_m \mu_m (a_{m+1/2} - a_{m-1/2}) + \frac{3}{2} \Phi^1 \sum_m \mu_m (a_{m+1/2} \mu_{m+1/2} - a_{m-1/2} \mu_{m-1/2}) + \frac{2}{3} \Phi^0 \right] - \\ &- \frac{1}{2 \Delta V_i} \sum_m \left(\mu_m^2 - \frac{1}{3} \right) \omega_m (r_{i+1}^\eta - r_i^\eta) - \frac{3 \Phi^1}{2 \Delta V_i} (r_{i+1}^\eta - r_i^\eta) \sum_m \left(\mu_m^2 - \frac{1}{3} \right) \mu_m \omega_m = \\ &= \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \frac{\Phi^0}{2} \sum_m \mu_m^2 \omega_m + \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \frac{3}{2} \Phi^1 \sum_m \mu_m^3 \omega_m - \\ &- \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \frac{3}{2} \Phi^1 \sum_m \mu_m \frac{a_{m+1/2} + a_{m-1/2}}{2} (\mu_{m+1/2} - \mu_{m-1/2}) - \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} \frac{\Phi^0}{3} = 0. \end{aligned}$$

При сходимости итераций ν будут справедливы те же уравнения (10), но с опущенным итерационным индексом. Это показывает, что диффузионные уравнения для ускорения итераций ν нужно брать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\xi}{\tau\nu_g} (u_g^{\nu+1} - u_g^n) + \frac{r_{i+1}^\eta (S_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (S_g)_i^{\nu+1}}{\Delta V_i} + (\alpha_g - \beta_{gg}^s) u_g^{\nu+1} &= \\ = \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} u_{g'}^{\nu+1} + (\beta_{gg} - \beta_{gg}^s) u_g^{\nu+1} + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} u_{g'}^{\nu+1} + f_g; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\frac{\xi}{\tau\nu_g} (s_g^{\nu+1} - s_g^n) + \frac{1}{3} \frac{r_{i+1}^\eta (U_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (U_g)_i^{\nu+1}}{\Delta V_i} - \frac{1}{3} \frac{\eta c_i}{2 \Delta V_i} (U_g)_{i+1/2}^{\nu+1} + \alpha_g s_g^{\nu+1} = (R_g^1)^{\nu+1/2},$$

где $u_g^n = (\Phi_g^0)^n$; $s_g^n = (\Phi_g^1)^n$; $g = 1, 2, \dots, G$.

Величины U_g, S_g представляют собой диссипативные функции, их связь с u_g, s_g рассмотрена ниже. β_{gg}^s выбираются из условия $\alpha_g - \beta_{gg}^s \geq 0$, что дает

$$\beta_{gg}^s = \begin{cases} \beta_{gg}, & \text{если } \alpha_g - \beta_{gg} \geq 0; \\ \alpha_g, & \text{если } \alpha_g - \beta_{gg} < 0. \end{cases}$$

P_1 -проектирование соотношений связи. Для замыкания системы уравнений (11) нужны соотношения связи в направлении t , формулы связи диссипативных величин U, S с их недиссипативными аналогами u, s , а также граничные условия. Все это необходимо получить из соответствующих соотношений для кинетического уравнения.

Соотношения связи в направлении n будем получать из (4). Поскольку при расчете данной группы g параметр p_g^n может быть скорректирован в любой ячейке с индексами $m, i + 1/2$, то следует считать, что p_g^n зависит от этих индексов. Представим p_g^n в виде

$$p_g^n = (p_g^n)^0 + (p_g^n)^1, \quad (12)$$

где $(p_g^n)^0 = \frac{1}{2} S_0 (p_g^n) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M (p_g^n)_{i+1/2,m} \omega_m$. Поскольку пересчеты p_g^n будут происходить в малом числе точек, то следует ожидать малости $(p_g^n)^1$; если нет пересчетов, то $(p_g^n)^1 = 0$. Кроме того, как видно из (12), нулевой момент $S_0 (p_g^n)^1$ равен нулю. С учетом (12) запишем (4) в виде

$$N_g^{n+1} = (p_g^n)^0 N_g^{n+1/2} + (1 - (p_g^n)^0) N_g^n + (p_g^n)^1 (N_g^{n+1/2} - N_g^n). \quad (13)$$

Применяя к (13) операторы S_0, S_1 , получаем

$$\begin{aligned} (\Phi_g^0)^{n+1} &= (p_g^n)^0 (\Phi_g^0)^{n+1/2} + (1 - (p_g^n)^0) (\Phi_g^0)^n + S_0 (p_g^n)^0 (N_g^{n+1/2} - N_g^n); \\ (\Phi_g^1)^{n+1} &= (p_g^n)^0 (\Phi_g^1)^{n+1/2} + (1 - (p_g^n)^0) (\Phi_g^1)^n + S_1 (p_g^n)^0 (N_g^{n+1/2} - N_g^n). \end{aligned} \quad (14)$$

Эти соотношения выведены из формулы (4), относящейся к кинетическому уравнению. Они дополняют систему уравнений (10).

Соотношения связи для диффузионных уравнений (11) выводятся по аналогии с (14) и имеют вид

$$\begin{aligned} u_g^{n+1} &= (p_g^n)^0 u_g^{n+1/2} + (1 - (p_g^n)^0) u_g^n + S_0 (p_g^n)^1 (N_g^{n+1/2} - N_g^n); \\ s_g^{n+1} &= (p_g^n)^0 s_g^{n+1/2} + (1 - (p_g^n)^0) s_g^n + S_1 (p_g^n)^1 (N_g^{n+1/2} - N_g^n). \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь выражения с операторами S_0, S_1 представляют собой корректирующие добавки на кинетичность, они вычисляются на основе решения кинетического уравнения.

Формулы связи диссипативных величин U_g, S_g с их недиссипативными аналогами u_g, s_g будем получать из второго уравнения (3). Сначала представим параметры $\delta_g, \theta_{g'g}$ в виде

$$(\delta_g h \mu)_{i+1/2,m} = (\delta_g^0 h^0)_{i+1/2} \mu_m + (\delta_g^1 h)_{i+1/2,m}; \quad (\theta_{g'g} h \mu)_{i+1/2,m} = (\theta_{g'g}^0 h^0)_{i+1/2} \mu_m + (\theta_{g'g}^1 h)_{i+1/2,m},$$

где

$$(\delta_g^0 h^0)_{i+1/2} = \frac{3}{2} S_1 (\delta_g h \mu); \quad (\theta_{g'g}^0 h^0)_{i+1/2} = \frac{3}{2} S_1 (\theta_{g'g} h \mu); \quad h^0 = \Delta r; \quad h = \Delta x_s.$$

Применяя ко второму уравнению (3) операторы S_0, S_1 , получаем

$$\begin{aligned}
 (\Phi_g^0)^{\nu+1,2} &= (H_g^0)^{\nu+1/2} + (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} \frac{1}{\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (H_g^1)_{i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (H_g^1)_i^{\nu+1/2} \right) + \\
 &+ S_0 \left(\left(\frac{\delta_g^1 h}{\mu_m} \right)^{\nu+1/2} \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g \right)^{\nu+1/2} \right); \\
 (\Phi_g^1)^{\nu+1/2} &= (H_g^1)^{\nu+1/2} + (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} \frac{1}{3\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (H_g^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (H_g^0)_i^{\nu+1/2} - \frac{\eta}{2} c_i (H_g^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} \right) - \\
 &- \frac{2}{3\Delta V_i} \left[\sum_{g'=1}^{g-1} \left(\theta_{g'g}^0 h^0 \right)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta (H_{g'}^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - r_i^\eta (H_{g'}^0)_i^{\nu+1/2} - \frac{\eta}{2} c_i (H_{g'}^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} \right) + \right. \\
 &+ \left. \sum_{g'=g}^G \left(\theta_{g'g}^0 h^0 \right)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta (H_{g'}^0)_{i+1}^\nu - r_i^\eta (H_{g'}^0)_i^\nu - \frac{\eta}{2} c_i (H_{g'}^0)_{i+1/2}^\nu \right) \right] + \\
 &+ S_1 \left((\delta_g^1 h)^{\nu+1/2} \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g \right)^{\nu+1/2} \right) - (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} (R_g^1)^{\nu+1/2} - \\
 &- S_1 \left(\sum_{g'=1}^G \theta_{g'g}^1 h \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} S \psi_{g'} \right)^{\nu+1/2} \right). \tag{16}
 \end{aligned}$$

Здесь корректирующие добавки представлены выражениями

$$S_0 \left(\left(\frac{\delta_g^1 h}{\mu_m} \right) \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g \right) \right), S_1 \left((\delta_g^1 h)^{\nu+1/2} \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g \right)^{\nu+1/2} \right), S_1 \left(\sum_{g'=1}^G \theta_{g'g}^1 h \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} S \psi_{g'} \right)^{\nu+1/2} \right), \delta_g^0 h^0 R_g^1.$$

Их малость обеспечивается малостью $\delta_g^1 h$, $\theta_{g'g}^1 h$, $\delta_g^0 h^0$. Кроме того, в P_1 -приближении $R_g^1 = 0$.

На основе (16) уже несложно получить соотношения, связывающие диссипативные U , S с u , s для диффузионных уравнений:

$$\begin{aligned}
 u_g^{\nu+1} &= U_g^{\nu+1} + (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} \frac{1}{\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (S_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (S_g)_i^{\nu+1} \right) + S_0 \left(\left(\frac{\delta_g^1 h}{\mu_m} \right) \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g^{\nu+1/2} \right) \right); \\
 s_g^{\nu+1} &= S_g^{\nu+1} + \frac{(\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} - 2(\theta_{gg}^0 h^0)^{\nu+1/2}}{3\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta U_{g,i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta U_{g,i}^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i U_{g,i+1/2}^{\nu+1} \right) - \\
 &- \frac{2}{3\Delta V_i} \left[\sum_{g'=1}^{g-1} \left(\theta_{g'g}^0 h^0 \right)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta U_{g',i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta U_{g',i}^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i U_{g',i+1/2}^{\nu+1} \right) + \right. \\
 &+ \left. \sum_{g'=g+1}^G \left(\theta_{g'g}^0 h^0 \right)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta H_{g',i+1}^{0\nu+1/2} - r_i^\eta H_{g',i}^{0\nu+1/2} - \frac{\eta}{2} c_i H_{g',i+1/2}^{0\nu+1/2} \right) \right] + \\
 &+ S_1 \left((\delta_g^1 h)^{\nu+1/2} \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} \psi_g \right)^{\nu+1/2} \right) - \\
 &- S_1 \left(\sum_{g'=1}^G \left(\frac{\theta_{g'g}^1 h}{\mu_m} \right)^{\nu+1/2} \operatorname{div}_h \left(\tilde{\Omega} S \psi_{g'} \right)^{\nu+1/2} \right) - (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} (R_g^1)^{\nu+1/2}. \tag{17}
 \end{aligned}$$

Соотношения связи по пространственным переменным для диссипативных величин H^0 , H^1 получим на основании формул (7), применив к ним операторы S_0 , S_1 :

$$(H_g^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} = \frac{1}{2} \left((H_g^0)_{i+1}^{\nu+1/2} + (H_g^0)_i^{\nu+1/2} \right); \quad (H_g^1)_{i+1/2}^{\nu+1/2} = \frac{1}{2} \left((H_g^1)_{i+1}^{\nu+1/2} + (H_g^1)_i^{\nu+1/2} \right). \tag{18}$$

Это дает для диффузионных уравнений соотношения

$$(U_g)_{i+1/2}^{\nu+1} = \frac{1}{2} \left((U_g)_{i+1}^{\nu+1} + (U_g)_i^{\nu+1} \right); \quad (S_g)_{i+1/2}^{\nu+1} = \frac{1}{2} \left((S_g)_{i+1}^{\nu+1} + (S_g)_i^{\nu+1} \right). \quad (19)$$

P_1 -проектирование граничных условий. Теперь, используя граничные условия (8), (9), получим граничные условия для диффузионных уравнений.

Полный поток частиц группы g через правую границу разбивается на входящие и выходящие потоки:

$$(H_{g,J}^1)^{\nu+1/2} = \sum_{m=1}^M (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m = \sum_{\substack{m=1 \\ \mu_m < 0}}^{M/2-1} (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m + \sum_{\substack{m=M/2 \\ \mu_m > 0}}^M (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m \quad (20)$$

(J – индекс граничной точки).

Входящий поток

$$S_g^- = \sum_{\mu_m < 0} (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m = \sum_{\mu_m < 0} (\varphi_g)_m \mu_m \omega_m$$

есть известная величина (отрицательная).

Выходящий поток, добавляя и вычитая его аналог в P_1 -приближении, приводим к виду

$$\sum_{\mu_m > 0} (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m = \sum_{\mu_m > 0} \left(\frac{1}{2} (H_g^0)_J^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m + \frac{3}{2} (H_g^1)_J^{\nu+1/2} \mu_m^2 \omega_m \right) + (R_1)_g^{\nu+1/2}, \quad (21)$$

где корректирующая добавка $(R_1)_g^{\nu+1/2}$ вычисляется по формуле

$$(R_1)_g^{\nu+1/2} = \sum_{\mu_m > 0} \left((\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} - \frac{1}{2} (H_g^0)_J^{\nu+1/2} - \frac{3}{2} (H_g^1)_J^{\nu+1/2} \mu_m \right) \mu_m \omega_m.$$

В P_1 -приближении $R_1 \equiv 0$.

Учитывая равенства $\sum_{\mu_m > 0} \mu_m \omega_m = \sum_{m=M/2}^M \mu_m \omega_m = \frac{1}{2}$, $\sum_{\mu_m > 0} \mu_m^2 \omega_m = \frac{1}{3}$, формулу (21) можно представить в виде

$$\sum_{\mu_m > 0} (\psi_g)_{J,m}^{\nu+1/2} \mu_m \omega_m = \frac{1}{4} (H_g^0)_J^{\nu+1/2} + \frac{1}{2} (H_g^1)_J^{\nu+1/2} + (R_1)_g^{\nu+1/2}.$$

Подставляя это выражение в (20), получаем граничное условие

$$\frac{1}{2} (H_g^0)_J^{\nu+1/2} - (H_g^1)_J^{\nu+1/2} = -2 \left((S_g^-)_J^{n-1/2} + 2 (R_1)_g^{\nu+1/2} \right). \quad (22)$$

Граничные условия (8), (9) в центре системы при $r = 0$ в терминах H^1 принимают вид

$$(H_g^1)_0^{\nu+1/2} = 0. \quad (23)$$

Для диффузионных уравнений граничные условия (22), (23) принимают вид

$$\frac{1}{2} (U_g)_J^{\nu+1} - (S_g)_J^{\nu+1} = -2 \left((S_g^-)_J^{n-1/2} + (R_g)_g^{\nu+1/2} \right); \quad (24)$$

$$(S_g)_0^{\nu+1} = 0. \quad (25)$$

Теперь система диффузионных уравнений (11) с соотношениями связи (15), (17), (19) и граничными условиями (24), (25) является замкнутой системой. При этом предполагается, что все корректирующие добавки вычислены на основе решения кинетического уравнения на итерации $\nu + 1/2$.

Переход к уравнениям относительно P_1 -поправок. Введем в рассмотрение поправочные функции

$$\begin{aligned}\Delta u_g^{\nu+1} &= u_g^{\nu+1} - (\Phi_g^0)^{\nu+1/2}; & \Delta s_g^{\nu+1} &= s_g^{\nu+1} - (\Phi_g^1)^{\nu+1/2}; \\ \Delta U_g^{\nu+1} &= U_g^{\nu+1} - (H_g^0)^{\nu+1/2}; & \Delta S_g^{\nu+1} &= S_g^{\nu+1} - (H_g^1)^{\nu+1/2}.\end{aligned}\quad (26)$$

Вычитая уравнение (10) из (11), получаем

$$\begin{aligned}\frac{\xi}{\tau v_g} (\Delta u_g^{\nu+1}) + \frac{1}{\Delta V_i} (r_{i+1}^\eta (\Delta S_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta S_g)_i^{\nu+1}) + (\alpha_g - \beta_{g'g}^s) \Delta u_g^{\nu+1} = \\ = \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^{\nu+1} + (\beta_{gg} - \beta_{gg}^s) \Delta u_g^{\nu+1} + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^{\nu+1} - \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} (u_{g'}^\nu - (\Phi_{g'}^0)^{\nu+1/2}); \\ \frac{\xi}{\tau v_g} (\Delta s_g^{\nu+1}) + \frac{1}{3\Delta V_i} (r_{i+1}^\eta (\Delta U_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta U_g)_i^{\nu+1}) - \frac{1}{3} \frac{\eta}{2} \frac{c_i}{\Delta V_i} (\Delta U_g)_{i+1/2}^{\nu+1} + \alpha_g \Delta s_g^{\nu+1} = 0; \\ g = 1, 2, \dots, G; \quad i = 0, 1, \dots, J-1.\end{aligned}\quad (27)$$

Вычитая (14) из (15), имеем

$$(\Delta u_g^{\nu+1}) = \left((p_g^n)^0 \right)^{\nu+1/2} \Delta u_g^{\nu+1}; \quad (\Delta s_g^{\nu+1}) = \left((p_g^\nu)^0 \right)^{\nu+1/2} \Delta s_g^{\nu+1}.\quad (28)$$

Аналогично, на основе уравнений (16), (17) получим соотношения связи для поправок:

$$\begin{aligned}\Delta u_g^{\nu+1} &= \Delta U_g^{\nu+1} + (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} \frac{1}{\Delta V_i} (r_{i+1}^\eta (\Delta S_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta S_g)_i^{\nu+1}); \\ \Delta s_g^{\nu+1} &= \Delta S_g^{\nu+1} + \frac{(\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} - 2(\theta_{gg}^0 h^0)^{\nu+1/2}}{3\Delta V_i} (r_{i+1}^\eta (\Delta U_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta U_g)_i^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i (\Delta U_g)_{g,i+1/2}^{\nu+1}) - \\ &- \frac{2}{3\Delta V_i} \left\{ \sum_{g'=1}^{g-1} (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} (r_{i+1}^\eta (\Delta U_{g'})_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta U_{g'})_i^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i (\Delta U_{g'})_{i+1/2}^{\nu+1}) + \right. \\ &+ \sum_{g'=g}^G (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} [r_{i+1}^\eta ((H_{g'}^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu) - r_i^\eta ((H_{g'}^0)_i^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu) - \\ &\left. - \frac{\eta}{2} c_i ((H_{g'}^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_{i+1/2}^\nu) \right\}.\end{aligned}\quad (29)$$

Здесь $(H_g^0)_i^{\nu+1/2} = \sum_{m=1}^M (\psi_g)_i^{\nu+1/2} \omega_m$ берется с кинетического этапа, а $(H_g^0)^\nu = (U_g)_i^\nu$ — с диффузионного.

Соотношения связи по переменной i для поправочных величин ΔU_g , ΔS_g получим из уравнений (18), (19):

$$(\Delta U_g)_{i+1/2}^{\nu+1} = \frac{1}{2} ((\Delta U_g)_{i+1}^{\nu+1} + (\Delta U_g)_i^{\nu+1}); \quad (\Delta S_g)_{i+1/2}^{\nu+1} = \frac{1}{2} ((\Delta S_g)_{i+1}^{\nu+1} + (\Delta S_g)_i^{\nu+1}).\quad (30)$$

Граничные условия для поправок выводим из уравнений (22)–(25):

$$\frac{1}{2} (\Delta U_g)_J^{\nu+1/2} - (\Delta S_g)_J^{\nu+1} = 0; \quad (31)$$

$$(\Delta S_g)_0^{\nu+1} = 0. \quad (32)$$

Решение системы уравнений относительно P_1 -поправок. Теперь рассмотрим решение системы уравнений (26)–(32) относительно поправок. Подставляя (28), (29) в (27), получаем

$$q_g^0 \Delta U_g^{\nu+1} + \left(1 + q_g^0 (\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2}\right) \frac{1}{\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (\Delta S_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta S_g)_i^{\nu+1}\right) = (\Delta F_g^0)_i^{\nu+1};$$

$$q_g^1 \Delta S_g^{\nu+1} + \frac{1 + q_g^1 \left((\delta_g^0 h^0)^{\nu+1/2} - 2(\theta_{gg}^0 h^0)^{\nu+1/2}\right)}{3\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (\Delta U_g)_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta U_g)_i^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i (\Delta U_g)_{g,i+1/2}^{\nu+1}\right) = (\Delta F_g^1)_i^\nu, \quad (33)$$

где

$$q_g^0 = \frac{\xi}{\tau \nu_g} \left((p_g^n)^0\right)^{\nu+1/2} + \alpha_g - \beta_{gg}^s; \quad q_g^1 = \frac{\xi}{\tau \nu_g} \left((p_g^n)^0\right)^{\nu+1/2} + \alpha_g;$$

$$\Delta (F_g^0)^{\nu+1} = \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^{\nu+1} + (\beta_{gg} - \beta_{gg}^s) \Delta u_g^{\nu+1} + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^{\nu+1} - \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} \left(u_{g'}^\nu - (\Phi_{g'}^0)^{\nu+1/2}\right);$$

$$(\Delta F_g^1)_i^\nu = q_g^1 \frac{2}{3\Delta V_i} \left\{ \sum_{g'=1}^{g-1} (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta (\Delta U_{g'})_{i+1}^{\nu+1} - r_i^\eta (\Delta U_{g'})_i^{\nu+1} - \frac{\eta}{2} c_i (\Delta U_{g',i+1/2})^{\nu+1}\right) + \right.$$

$$+ \sum_{g'=g}^G (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left[r_{i+1}^\eta \left((H_{g'}^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu\right) - r_i^\eta \left((H_{g'}^0)_i^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu\right) - \right.$$

$$\left. \left. - \frac{\eta}{2} c_i \left((H_{g'}^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_{i+1/2}^\nu\right)\right] \right\}.$$

Эту систему уравнений будем решать совместно с соотношениями связи (30) и граничными условиями (31), (32). Подставляя (30) в (33) и применяя межгрупповые итерации k зейделевского типа для решения полученной системы, получаем уравнения для определения ΔU_g , ΔS_g :

$$(a_g^0)_i (\Delta U_g)_i^{k+1} + (b_g^0)_i (\Delta U_g)_{i+1}^{k+1} + (c_g^0)_i (\Delta S_g)_i^{k+1} + (d_g^0)_i (\Delta S_g)_{i+1}^{k+1} = (\Delta f_g^0)_{i+1/2}^k; \quad (34)$$

$$(a_g^1)_i (\Delta U_g)_i^{k+1} + (b_g^1)_i (\Delta U_g)_{i+1}^{k+1} + (c_g^1)_i (\Delta S_g)_i^{k+1} + (d_g^1)_i (\Delta S_g)_{i+1}^{k+1} = (\Delta f_g^1)_{i+1/2}^k;$$

$$g = 1, 2, \dots, G; \quad i = 0, 1, \dots, J,$$

где

$$(a_g^0)_i = (b_g^0)_i = (c_g^1)_i = (d_g^1)_i = 1;$$

$$(a_g^1)_i = -2 \left[\frac{1}{q_g^1} + h^0 (\delta_g^0 - 2\theta_{gg}^0) \right] \frac{\frac{\eta}{4} c_i + r_i^\eta}{3\Delta V_i}; \quad (b_g^1)_i = -2 \left[\frac{1}{q_g^1} + h^0 (\delta_g^0 - 2\theta_{gg}^0) \right] \frac{\frac{\eta}{4} c_i - r_{i+1}^\eta}{3\Delta V_i};$$

$$(c_g^0)_i = -2 \left(\frac{1}{q_g^0} + h^0 \delta_g^0 \right) \frac{r_i^\eta}{\Delta V_i}; \quad (d_g^0)_i = 2 \left(\frac{1}{q_g^0} + h^0 \delta_g^0 \right) \frac{r_{i+1}^\eta}{\Delta V_i};$$

$$(\Delta f_g^0)_{i+1/2}^k = \frac{2}{q_g^0} \left[\sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^{k+1} + (\beta_{gg} - \beta_{gg}^s) \Delta u_g^k + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} \Delta u_{g'}^k - \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} \left(u_{g'}^\nu - (\Phi_{g'}^0)^{\nu+1/2}\right) \right];$$

$$\begin{aligned}
 (\Delta f_g^1)_{i+1/2}^k &= \frac{4}{3\Delta V_i} \left\{ \sum_{g'=1}^{g-1} (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left(r_{i+1}^\eta (\Delta U_{g'})_{i+1}^{k+1} - r_i^\eta (\Delta U_{g'})_i^{k+1} - \frac{\eta}{2} c_i (\Delta U_{g'})_{i+1/2}^{k+1} \right) + \right. \\
 &+ \sum_{g'=g}^G (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left[r_{i+1}^\eta \left((H_{g'}^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - (H_g^0)_{i+1}^\nu \right) - r_i^\eta \left((H_{g'}^0)_i^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu \right) - \right. \\
 &\left. \left. - \frac{\eta}{2} c_i \left((H_{g'}^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_{i+1/2}^\nu \right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

При $\nu = 0$ $u_g^\nu = (\Phi_g^0)^n$; $(H_g^0)^\nu = (H_g^0)^n$. При $k = 0$ $\Delta u_g^k = 0$. В стационарном случае при $\nu = 0$ $u_g^\nu = (\Phi_g^0)^{\nu+1/2}$.

При использовании соотношений связи в виде (18), (19) для Δf_g^1 получаем более простое выражение:

$$\begin{aligned}
 (\Delta f_g^1)_{i+1/2}^k &= \frac{2(r_{i+1}^\eta + r_i^\eta)}{3\Delta V_i} \left\{ \sum_{g'=1}^{g-1} (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left((\Delta U_{g'})_{i+1}^{k+1} - (\Delta U_{g'})_i^{k+1} \right) + \right. \\
 &\left. + \sum_{g'=g}^G (\theta_{g'g}^0 h^0)^{\nu+1/2} \left[\left((H_{g'}^0)_{i+1}^{\nu+1/2} - (H_g^0)_{i+1}^\nu \right) - \left((H_{g'}^0)_i^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)_i^\nu \right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Система уравнений (34) решается методом потоковой прогонки [17] с граничными условиями (31), (32), в которых индекс $\nu + 1$ заменен на $k + 1$.

Формулы прямой прогонки:

$$\begin{aligned}
 X_{i+1} &= L_i (X_i \langle cb \rangle_i + Y_i \langle ba \rangle_i); \quad Y_{i+1} = L_i (X_i \langle cd \rangle_i + Y_i \langle da \rangle_i); \\
 Z_{i+1} &= L_i (X_i \langle cf \rangle_i + Y_i \langle fa \rangle_i + Z_i \langle ac \rangle_i); \quad L_i^{-1} = X_i (\langle cb \rangle_i + \langle cd \rangle_i) + Y_i (\langle ba \rangle_i + \langle da \rangle_i), \\
 i &= 0, 1, \dots, I-1; \\
 X_0 &= 0; \quad Y_0 = 1; \quad Z_0 = 0; \quad \langle ab \rangle = a^1 b^0 - a^0 b^1; \quad \langle cb \rangle = c^1 b^0 - c^0 b^1, \dots
 \end{aligned}$$

Формулы обратной прогонки:

$$\begin{aligned}
 \Delta U_i &= L_i Y_{i+1}^{-1} (\langle bd \rangle_i Y_i \Delta U_{i+1} + \langle df \rangle_i Y_i + \langle cd \rangle_i Z_i); \\
 \Delta S_i &= Y_i^{-1} (Z_i - X_i \Delta U_i); \quad i = I-1, \dots, 1, 0; \\
 \Delta U_I &= \frac{Z_I}{X_I + 0,5 Y_I}; \quad \Delta S_I = \frac{0,5 Z_I}{X_I + 0,5 Y_I} = 0,5 \Delta U_I.
 \end{aligned}$$

В результате найдем $(\Delta U_g)_i^{k+1}$, $(\Delta S_g)_i^{k+1}$ ($i = 0, 1, \dots, J$).

Из уравнения (27) находим

$$(\Delta u_g)_{i+1/2}^{k+1} = \frac{1}{q_g^0} \left[-\frac{1}{\Delta V_i} \left(r_{i+1}^\eta (\Delta S_g)_{i+1}^{k+1} - r_i^\eta (\Delta S_g)_i^{k+1} \right) \right] + \frac{1}{2} (\Delta f_g^0)_{i+1/2}^k \Big|_{i=0,1,\dots,J-1}$$

и переходим к счету следующей группы $g + 1$.

После завершения расчета каждой группы проверяем условие сходимости итераций k :

$$\left| \Delta u_g^{k+1} - \Delta u_g^k \right| = \left| u_g^{k+1} - u_g^k \right| < \varepsilon_1 \left| \Delta u_g^{k+1} \right| + \varepsilon_2$$

во всех ячейках и для всех групп. Если сходимости итераций нет, то идем на следующую итерацию (начиная с уравнений (34)). При сходимости итераций k полагаем

$$SN_g^{\nu+1} = u_g^{\nu+1} = (\Phi_g^0)^{\nu+1/2} + \Delta u_g^{k+1}; \quad U_{g,i}^{\nu+1} = (H_g^0)_i^{\nu+1} = (H_g^0)_i^{\nu+1/2} + \Delta U_{g,i}^{k+1};$$

$$U_{g,i+1/2}^{\nu+1} = (S\psi_g)_{i+1/2}^{\nu+1} = (H_g^0)_{i+1/2}^{\nu+1} = (H_g^0)_{i+1/2}^{\nu+1/2} + \Delta U_{g,i+1/2}^{k+1},$$

т. е. завершаем еще одну внешнюю итерацию ν и идем снова на счет кинетического уравнения на новой итерации ν . Так продолжается до сходимости внешних итераций, т. е. до выполнения условия $|(SN_g)_{i+1/2}^{\nu+1/2} - (SN_g)_{i+1/2}^{\nu-1/2}| < \varepsilon_1 |(SN_g)_{i+1/2}^{\nu+1/2}| + \varepsilon_2$ во всех точках $i = 0, 1, \dots, I-1$ и для всех групп $g = 1, 2, \dots, G$, где $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — некоторые константы сходимости.

4. Численные расчеты

Для исследования RDSA-метода были проведены расчеты трех задач.

Задача 1. Эта задача взята из работы Ларсена [12] для исследования DSA-метода ускорения итераций. Плоская система состоит из одной области $0 \leq r \leq 8$ с нулевым источником и коэффициентами α и $\beta = 0,98\alpha$. Геометрия задачи показана на рис. 1.

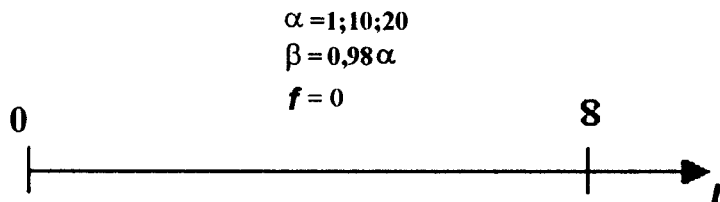


Рис. 1. Геометрия задачи 1

На правой границе области — вакуум, слева — входящий поток $N(0, \mu) = N(0, -\mu) + 1$ для $\mu \geq 0$. Сетка: $\Delta r = 1$ ($I = 8$); $\Delta \mu = 0,5$ ($M = 4$). Константы сходимости итераций: $\varepsilon_1 = 10^{-4}$; $\varepsilon_2 = 10^{-4}$.

Результаты расчетов (число итераций) в сравнении с данными из работы [12] приведены в табл. 1—3. При этом все расчеты с RDSA на основе схемы РОМБ проводились по методу DDAD с выбором параметров $\delta_g, \theta_{g'g}$ по формулам из пп. 1—8 разд. 2. Прочерк в таблицах означает, что данные по указанной схеме отсутствуют.

Таблица 1

Число итераций для расчета задачи 1 при $\alpha = 1$

N	Метод DSA	Разностная схема							
		DD	St	DD+St	LC, B6	LM, B5	DDAD		
							B3	B7	B8
1	Простые итерации (без DSA)	184	156	184	185	184	172	185	186
2	DSA по Алкоффу	4	8	—	—	—	—	—	—
3	DSA по Ларсену	4	4	4	4	4	—	—	—
4	RDSA на основе схемы РОМБ	5	5	6	5	5	5	5	5

Таблица 2

Число итераций для расчета задачи 1 при $\alpha = 10$

N	Метод DSA	Разностная схема							
		DD	St	DD+St	LC, B6	LM, B5	DDAD		
							B3	B7	B8
1	Простые итерации (без DSA)	242	212	215	245	242	192	233	322
2	DSA по Алкоффу	5	Расх.	—	—	—	—	—	—
3	DSA по Ларсену	5	4	Расх.	7	8	—	—	—
4	RDSA на основе схемы ПОМБ	5	4	8	4	4	3	4	4

Таблица 3

Число итераций для расчета задачи 1 при $\alpha = 20$

N	Метод DSA	Разностная схема							
		DD	St	DD+St	LC, B6	LM, B5	DDAD		
							B3	B7	B8
1	Простые итерации (без DSA)	222	200	202	226	234	175	236	702
2	DSA по Алкоффу	4	Расх.	—	—	—	—	—	—
3	DSA по Ларсену	4	5	Расх.	5	7	—	—	—
4	RDSA на основе схемы ПОМБ	4	4	7	4	4	3	3	3

Из табл. 1–3 видна высокая эффективность диффузионно-синтетического метода ускорения итераций. Расходимость DSA-метода по Алкоффу на St-схеме объясняется просто: этот метод согласован с DD-схемой, а с St-схемой не согласован, что и приводит к расходимости. DSA-метод по Ларсену согласован со всеми приведенными схемами, кроме DDAD. Тем не менее на схеме DD+St получена расходимость. Отсюда можно сделать вывод о том, что согласованность в данном случае не является достаточным условием сходимости. Что касается RDSA-метода ускорения итераций, то он сходится во всех случаях.

Задача 2. Эта задача аналогична предыдущей, но система — сферическая. Данные приведены на рис. 2.

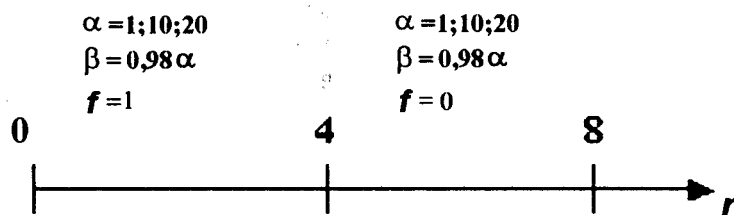


Рис. 2. Данные для задачи 2

Сферическая система разбита на две равные области с единичным источником в первой области и коэффициентами α и $\beta = 0,98\alpha$. На правой границе — вакуум, слева $N(0, \mu) = N(0, -\mu)$ для $\mu \geq 0$. Сетка: $\Delta r = 1$ ($I = 8$); $\Delta \mu = 0,5$ ($M = 4$).

Результаты расчетов приведены в табл. 4–6. Поскольку в [12] приводятся только расчеты для плоской системы, в таблицах приводятся только результаты расчетов по схеме DDAD. Здесь столб-

цы с $\Delta H = 0$ соответствуют тому, что в соотношениях связи (29) слагаемые $\theta_{g'g}^0 h^0 \left((H_{g'}^0)^{\nu+1/2} - (H_{g'}^0)^\nu \right)$, $g' = g, \dots, G$, в потоковых членах зануляются или иначе — в соотношениях (3) слагаемые $h \sum_{g'=g}^G \theta_{g'g} \operatorname{div}_h (\vec{\Omega} S \psi_{g'})$ на этапе RDSA берутся с тем же итерационным индексом ν , что и на этапе решения кинетического уравнения. Для схем DD, DSt, DD+DSt, DDAD (B3) автоматически $\Delta H \equiv 0$. Столбцы таблиц с h_1 соответствуют тому, что при вычислении параметра $\theta_{g'g}(h)$ вместо линейного размера h используется величина $h_1 = \left(1 - \frac{\mu^2}{2}\right) h$.

Таблица 4

Число итераций для расчета задачи 2 при $\alpha = 1$

N	Метод ускорения	Разностная схема									
		DD	DSt	DD+DSt	DDAD						
					B3	B7, $\Delta H \neq 0$	B8, $\Delta H \neq 0$	B7, $\Delta H = 0$	B8, $\Delta H = 0$	B7, h_1	B8, h_1
1	Простые итерации (без DSA)	111	93	111	106	114	117	111	112	111	112
2	RDSA на основе схемы ПОМБ	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7

Таблица 5

Число итераций для расчета задачи 2 при $\alpha = 10$

N	Метод ускорения	Разностная схема									
		DD	DSt	DD+DSt	DDAD						
					B3	B7, $\Delta H \neq 0$	B8, $\Delta H \neq 0$	B7, $\Delta H = 0$	B8, $\Delta H = 0$	B7, h_1	B8, h_1
1	Простые итерации (без DSA)	255	223	254	213	276	378	236	234	236	234
2	RDSA на основе схемы ПОМБ	4	4	8	4	Расх.	Расх.	7	9	5	5

Таблица 6

Число итераций для расчета задачи 2 при $\alpha = 20$

N	Метод ускорения	Разностная схема									
		DD	DSt	DD+DSt	DDAD						
					B3	B7, $\Delta H \neq 0$	B8, $\Delta H \neq 0$	B7, $\Delta H = 0$	B8, $\Delta H = 0$	B7, h_1	B8, h_1
1	Простые итерации (без DSA)	260	323	Расх.	211	299	371	237	230	237	230
2	RDSA на основе схемы ПОМБ	4	4	Расх.	4	Расх.	Расх.	7	6	5	4

Из табл. 4–6 видно, что на DD+DSt-схеме итерации могут расходиться как для простых итераций, так и для RDSA-метода ускорения. Переключения схем создают тяжелый режим для итераций. Несмотря на выполнение условия согласованности, расходимость наступает и для схем DDAD (B7 и B8) при $\Delta H \neq 0$. RDSA-метод ускорения с $\Delta H = 0$ сходится во всех случаях, эффект ускорения очень высокий.

Задача 3. Для сферической системы $0 \leq r \leq 4$ с нулевым источником ($f = 0$), нулевыми граничными условиями и коэффициентами $\alpha = 1,6628$, $\beta = 2,7983$ задано начальное распределение нейтронов $U^0 = 10^{-6}$.

Методом установления рассчитывается временная постоянная размножения нейтронов $\lambda = \frac{d}{dt} \ln U$. По оси r берется равномерная сетка с шагом $\Delta r = 0,2$ ($I = 20$), по угловой переменной μ — равномерная сетка с шагом $\Delta \mu = 0,1$ ($M = 20$). Константы сходимости итераций по λ : $\varepsilon_1 = 10^{-4}$; $\varepsilon_2 = 10^{-4}$. Число групп $G = 1$, скорость нейтронов $v = 110$. Параметры схемы: $\xi = 1$; $P = 2$; $\tau = 0,001$. Результаты расчетов приведены в табл. 7.

Таблица 7

Результаты расчетов задачи 3

Величина	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	DDAD		
				B3	B7	B8
λ	117,187	115,725	117,291	117,103	117,322	117,207
Число шагов	114	112	114	114	108	114

В данной задаче величина λ может меняться в зависимости от τ и $\varepsilon_{сх}$. Например, при $\tau = 10^{-5}$, $\varepsilon_{сх} = 10^{-5}$ по DD-схеме получено значение $\lambda = 117,737$. Число итераций на последних шагах около 4, а при применении RDSA-метода — около 2.

Заключение

В результате проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Диффузионно-синтетический метод ускорения итераций на основе схемы РОМБ (RDSA-метод) является высокоэффективным методом. Его следует применять в варианте с $\Delta H \equiv 0$. В RDSA-методе согласованность достигается на основе формализованной пятишаговой процедуры.
2. Исследования проведены для одногрупповой модели одномерного уравнения переноса нейтронов. Требуется дальнейшие исследования RDSA-метода на многогрупповой модели.

Список литературы

1. Карлсон Б. Численное решение задачи кинетической теории нейтронов // Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1963. С. 243—258.
2. Reed W. H. New difference schemes for the neutron transport equation // Nucl. Sci. Eng. 1971. Vol. 46, № 2. P. 309—314.
3. Корр Н. J. // Ibid. 1963. Vol. 17. P. 65.
4. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1963. Т. 4. С. 1078—1087.
5. Gelbard E. M., Hageman L. A. The synthetic method as applied to the SN equations // Nucl. Sci. Eng. 1969. Vol. 37. P. 288.
6. Reed W. H. The effectiveness of acceleration techniques for iterative methods in transport // Ibid. 1971. Vol. 45. P. 245.
7. Alcouff R. E. A stable diffusion synthetic acceleration method for neutron transport iterations // Trans. Am. Nucl. Soc. 1976. Vol. 23. P. 203.
8. Alcouff R. E. Diffusion synthetic acceleration methods for the diamond-differenced // Nucl. Sci. Eng. 1977. Vol. 64. P. 344.
9. Gelbard E. M., McCoy D. R., Larsen E. W. Finite difference effects in the synthetic acceleration method // Trans. Am. Nucl. Soc. 1981. Vol. 39. P. 462.

10. Троцкий В. Е. Решение кинетического уравнения и уравнения квазидиффузии по согласованным разностным схемам // Численные методы решения задач математической физики. М.: Наука, 1966. С. 177–185.
11. Morel J. E. A synthetic acceleration method for discrete ordinates calculations with highly anisotropic scattering // Nucl. Sci. Eng. 1982. Vol. 82. P. 34.
12. Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete-ordinates equations. Part I: Theory // Ibid. P. 47.
13. McCoy D. R., Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete-ordinates equations. Part II: Numerical results // Ibid. P. 64.
14. Белл Д., Глестон С. Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1973.
15. Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПН, 1986.
16. Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Писарев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А. Метод дискретных ординат с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для численного решения уравнения переноса нейтронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 13–24.
17. Гаджиев А. Д., Писарев В. Н., Шестаков А. А. Метод расчета двумерных задач теплопроводности на неортогональных сетках // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1982. Т. 22, № 2.

Статья поступила в редакцию 15.09.06.
