

УДК 519.642.2

ВДЭ-МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ

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

Работа посвящена одной из реализаций метода выделения диагонального элемента (ВДЭ-метода) для ускорения итераций по интегралу столкновений при решении одномерного уравнения переноса нейтронов.

Введение

Важным вопросом при решении уравнения переноса нейтронов является ускорение итераций по интегралу столкновений. Если использовать метод простой итерации или итерации Зейделя, то получается медленно сходящийся процесс. Еще в 1907 г. Шмидтом [1] был предложен метод, основанный на определении главной части ошибки, допущенной на простой итерации. Этот метод, названный методом поправок, получил в дальнейшем широкое применение. Ошибка, допущенная на простой итерации, вычислялась приближенно каким-либо более простым методом. А новый, чередующийся итерационный процесс сходиллся быстрее метода простой итерации.

Одной из реализаций этой идеи является метод выделения диагональных элементов (ВДЭ-метод) [2, 3]. ВДЭ-метод является более простым, чем RDSA-метод [4]. В нем при ускорении подправляются только нулевые моменты функции распределения нейтронов на основе поправочной системы уравнений. Соответственно этому достичь параметров ускорения RDSA-метода не удастся. Но привлекает простота ВДЭ-метода и достаточная его эффективность в сравнении с простой итерацией. Он легко распараллеливается. ВДЭ-метод ускорения может применяться как самостоятельно, так и в сочетании с RDSA-методом. В последнем случае ВДЭ-метод будет применяться для ускорения итераций при решении системы поправочных уравнений.

Эффективность ВДЭ-метода для задач переноса излучения в диффузионном приближении показана в [5]. В ВДЭ-методе ошибку, допущенную на простой итерации, предлагается вычислять, используя способ выделения из уравнения переноса на искомой итерации функции в центрах ячеек. Если обсчитывать ячейку разностной сетки независимо от соседних интервалов, то величины на границах, получаемые от соседних ячеек, можно брать с предыдущей итерации. Это позволяет построить поправочную систему обыкновенных уравнений, которая легко разрешима.

1. Описание ВДЭ-метода ускорения итераций

Рассматривается система одномерных многогрупповых уравнений переноса нейтронов:

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

где t — время; r — пространственная переменная; μ — косинус угла между направлением полета нейтронов Ω 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; $\xi = \begin{cases} 0 & \text{— стационарный случай;} \\ 1 & \text{— нестационарный случай;} \end{cases} \quad \eta = \begin{cases} 0 & \text{— плоская геометрия;} \\ 2 & \text{— сферически-симметричная геометрия.} \end{cases}$

Данная система решается в прямоугольнике $D = \{0 \leq r \leq R; -1 \leq \mu \leq 1\}$ с граничными условиями $N_g(R, \mu, t) = \varphi_g(\mu, t)$ для $\mu \leq 0$. В качестве граничного условия при $r = 0, \mu > 0$ берется $N_g(0, \mu) = N_g(0, -\mu)$. Начальное условие: $N_g(r, \mu, t)|_{t=t^0} = N_g^0(r, \mu)$.

Рассмотрим систему разностных уравнений переноса DDAD-схемы [3]:

$$\left(\frac{p^n}{v_g \Delta t} + \alpha_g\right) N_g + \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi_g\right) = Q_g + p^n \frac{1}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho}\right)^n \rho, \quad g = 1, 2, \dots, G. \quad (1)$$

Здесь, как обычно, дробные индексы опущены. Так, например, $N_g = (N_g)_{m, i+1/2}^{n+1/2}$; $Q_g = (Q_g)_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \beta_{g',g} S N_{g', i+1/2}^{n+1/2} + \frac{f_{g, i+1/2}^{n+1/2}}{2}$; $S N_g^{n+1/2} = \sum_{m=1}^M (N_g)_{m, i+1/2}^{n+1/2} \omega_m$ (ω_m — вес квадратуры по угловой переменной $m = 1, \dots, M$; n — индекс по времени; i — индекс по пространству).

Диссипативная функция распределения Ψ_g связана с функцией N_g по формуле

$$N_g = \Psi_g + \delta_g \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi_g\right) - \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}\right), \quad (2)$$

где

$$\operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi_g^{n+1/2}\right) \equiv \mu_m \frac{r_{i+1}^\eta (\Psi_g)_{m, i+1}^{n+1/2} - r_i^\eta (\Psi_g)_{m, i}^{n+1/2}}{\Delta V_i} + \frac{\eta}{2} \frac{c_i}{\Delta V_i} \frac{a_{m+1/2} (\Psi_g)_{m+1/2, i+1/2}^{n+1/2} - a_{m-1/2} (\Psi_g)_{m-1/2, i+1/2}^{n+1/2}}{\omega_m};$$

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

Δx — линейный размер ячейки, определяемый ниже; $\delta_g, \theta_{g'g}$ — коэффициенты, определяющие искусственную диссипацию.

Поскольку система уравнений (1) является интегродифференциальной, то по интегралу столкновений строим итерационный процесс. Итерации будем проводить в два этапа.

На первом этапе (этап простой итерации) система уравнений (1) решается с известной правой частью Q_g^ν (ν — итерационный индекс по интегралу столкновений):

$$q_g N_g^{\nu+1/2} + \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi_g^{\nu+1/2}\right) = Q_g^\nu + p^n \frac{1}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho}\right)^n \rho, \quad q_g = \frac{p^n}{v_g \Delta t} + \alpha_g. \quad (3)$$

Выделим в $\operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi\right)^{\nu+1/2}$ известные значения Ψ на освещенных гранях. Тогда выражение для $\operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi\right)^{\nu+1/2}$ можно записать в виде

$$\operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi\right)^{\nu+1/2} = \frac{1}{\Delta V} a \Psi^{\nu+1/2} - \frac{1}{\Delta V} \sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2}, \quad (4)$$

где $\Psi^{\nu+1/2}$ — значение Ψ в центре ячейки; $\Psi_l^{\nu+1/2}$ — известные значения Ψ на освещенных гранях; $a = 2 \frac{\Delta V_i}{\Delta x_s}$,

$$\Delta x_s = \begin{cases} \Delta r & \text{на линии } \mu = \mu_0 = -1; \\ \frac{\Delta V_i}{-\mu_m r_i^\eta + \frac{\eta}{2} c_i \frac{a_{m+1/2}}{\omega_m}} = \frac{\Delta V_i}{-\mu_m r_{i+1}^\eta + \frac{\eta}{2} c_i \frac{a_{m-1/2}}{\omega_m}} & \text{при } \mu_m \leq 0; \\ \frac{\Delta V_i}{\mu_m r_{i+1}^\eta + \frac{\eta}{2} c_i \frac{a_{m+1/2}}{\omega_m}} = \frac{\Delta V_i}{\mu_m r_i^\eta + \frac{\eta}{2} c_i \frac{a_{m-1/2}}{\omega_m}} & \text{при } \mu_m > 0. \end{cases}$$

Значения коэффициентов b для дальнейших выкладок не важны.

ВДЭ-метод ускорения итераций с использованием коэффициентов квазидиффузионного типа. Подставляя выражение (4) в уравнение (3) и суммируя по всем направлениям, получаем

$$\begin{aligned} q_g SN_g^{\nu+1/2} + \frac{1}{\Delta V} \left(\sum_{m=1}^M \left(a \Psi_g^{\nu+1/2} \right)_{m-1/2} \Delta \mu_{m-1} \right) - \frac{1}{\Delta V} \left(\sum_{m=1}^M \left(\sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right)_{g, m-1/2} \Delta \mu_{m-1} \right) = \\ = SQ_g^\nu + \frac{p^n \rho}{v_g \Delta t} \left(\frac{SN_g}{\rho} \right)^n. \end{aligned} \quad (5)$$

Введем в рассмотрение положительный коэффициент квазидиффузионного типа [3]:

$$d_g^{\nu+1/2} = \begin{cases} \frac{\frac{1}{\Delta V} \sum_{m=1}^M \left(a \Psi_g^{\nu+1/2} \right)_{m-1/2} \Delta \mu_{m-1}}{SN_g^{\nu+1/2}} & \text{при } SN_g^{\nu+1/2} \neq 0; \\ 0 & \text{при } SN_g^{\nu+1/2} = 0. \end{cases}$$

Поскольку коэффициент представляет собой дробно-линейный функционал, то следует ожидать слабое изменение этого коэффициента на итерациях.

Запишем систему уравнений (5) в виде

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2} \right) SN_g^{\nu+1/2} = \frac{1}{\Delta V} \left(\sum_{m=1}^M \left(\sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right)_{g, m-1/2} \Delta \mu_{m-1} \right) + SQ_g^\nu + \frac{p^n \rho}{v_g \Delta t} \left(\frac{SN_g}{\rho} \right)^n. \quad (6)$$

По аналогии с системой уравнений (6) выпишем для второго (ускоряющего) этапа систему уравнений относительно $SN_g^{\nu+1}$:

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2} \right) SN_g^{\nu+1} = \frac{1}{\Delta V} \left(\sum_{m=1}^M \left(\sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right)_{g, m-1/2} \Delta \mu_{m-1} \right) + SQ_g^{\nu+1} + \frac{p^n \rho}{v_g \Delta t} \left(\frac{SN_g}{\rho} \right)^n. \quad (7)$$

Заметим, что в системе уравнений (7) коэффициент d и слагаемые при коэффициентах b имеют тот же индекс $\nu + 1/2$, что и в системе (6), а верхний индекс $\nu + 1$ приписан величинам SN_g , SQ_g .

Вычитая из системы (7) систему (6), получаем систему для поправок:

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2} \right) \Delta SN_g^{\nu+1} = SQ_g^{\nu+1} - SQ_g^\nu,$$

где

$$\begin{aligned} SQ_g^{\nu+1} - SQ_g^\nu &= SQ_g^{\nu+1} - SQ_g^{\nu+1/2} + SQ_g^{\nu+1/2} - SQ_g^\nu = \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1} + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1/2}; \\ \Delta SN_g^{\nu+1} &= SN_g^{\nu+1} - SN_g^{\nu+1/2}; \quad \Delta SN_g^{\nu+1/2} = SN_g^{\nu+1/2} - SN_g^\nu. \end{aligned}$$

Таким образом, в процессе расчета кинетических групп для системы поправочных уравнений, которую можно записать в виде

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2}\right) \Delta SN_g^{\nu+1} = \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1} + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1/2}, \quad (8)$$

получаем величины $d_g^{\nu+1/2}$, $\Delta SN_g^{\nu+1/2}$. В одногрупповом случае из системы (8) получаем явную формулу для вычисления поправок $\Delta SN_g^{\nu+1}$:

$$\Delta SN_g^{\nu+1} = \frac{\beta}{q^{\nu+1/2} + d^{\nu+1/2} - \beta} \Delta SN_g^{\nu+1/2}. \quad (9)$$

Систему (8) решаем прямым методом обращения многогрупповой матрицы или методом Зейделя (с итерационным индексом k):

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2} - \beta_{gg}\right) \Delta SN_g^{k+1} = \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{k+1} + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^k + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1/2}. \quad (10)$$

Основным недостатком этого варианта ВДЭ-метода ускорения итераций является появление отрицательных значений $d_g^{\nu+1/2}$ из-за возможных осцилляций решения кинетического уравнения и плохая сходимость итераций в стационарных задачах при $q_g^{\nu+1/2} = \alpha_g^{\nu+1/2} \approx \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g}$. Так, например, в стационарных одногрупповых задачах при $\alpha = \beta$ сходимость определяется коэффициентом β/d (см. уравнение (9)), который неограниченно возрастает с ростом β или при $d \rightarrow 0$. В этом случае систему (8) можно решать методом Якоби:

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2}\right) \Delta SN_g^{\nu+1} = \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1/2} \quad (11)$$

или методом типа Зейделя:

$$\left(q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2}\right) \Delta SN_g^{k+1} = \sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{k+1} + \sum_{g'=g}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^k + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta SN_{g'}^{\nu+1/2}. \quad (12)$$

В отличие от формул (10) в выражении (12) ΔSN_g для искомой группы в правой части берутся с предыдущей итерации k , т. е. коэффициент перехода с итерации на итерацию имеет вид

$$\frac{\beta_{g'g}}{q_g^{\nu+1/2} + d_g^{\nu+1/2}} \leq 1.$$

ВДЭ-метод ускорения итераций без использования коэффициента квазидиффузионного типа. Подставляя выражение (2) в уравнение (3), получаем уравнение относительно функции Ψ :

$$q_g \Psi_g^{\nu+1/2} + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi_g^{\nu+1/2} \right) = Q_g^\nu + \frac{p^n}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho} \right)^n \rho + q_g \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}^{\nu+1/2} \right).$$

Подставляя в это уравнение выражение (4), получаем

$$\begin{aligned} \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right] \Psi_g^{\nu+1/2} &= Q_g^\nu + \frac{p^n}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho} \right)^n \rho + \\ &+ q_g \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}^{\nu+1/2} \right) + \frac{1 + q_g \delta_g \Delta x}{\Delta V} \sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_i < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2}. \end{aligned}$$

Выражая из этого уравнения $\Psi_g^{\nu+1/2}$ и подставляя его в выражение (4), получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi \right)^{\nu+1/2} &= \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left[\frac{a}{\Delta V} \left(Q_g^\nu + \frac{p^n}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho} \right)^n \rho + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + q_g \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}^{\nu+1/2} \right) \right) + \frac{q_g}{\Delta V} \sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_l < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right]. \end{aligned}$$

Подставляя новое выражение $\operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} \Psi \right)^{\nu+1/2}$ в уравнение (3), получаем

$$\begin{aligned} N_g^{\nu+1/2} + \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left(\frac{a}{\Delta V} \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}^{\nu+1/2} \right) + \frac{1}{\Delta V} \sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_l < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right) &= \\ = \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left(1 + \delta_g \Delta x \frac{a}{\Delta V} \right) \left(Q_g^\nu + \frac{p^n}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho} \right)^n \rho \right). \end{aligned}$$

По аналогии с системой уравнений для первого этапа выпишем для второго (ускоряющего) этапа систему уравнений относительно $N_g^{\nu+1}$:

$$\begin{aligned} N_g^{\nu+1} + \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left(\frac{a}{\Delta V} \sum_{g'=1}^G \theta_{g'g} \Delta x \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega} S \Psi_{g'}^{\nu+1/2} \right) + \frac{1}{\Delta V} \sum_{(\vec{\Omega}, \vec{n})_l < 0} b_l \Psi_l^{\nu+1/2} \right) &= \\ = \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left(1 + \delta_g \Delta x \frac{a}{\Delta V} \right) \left(Q_g^{\nu+1} + \frac{p^n}{v_g \Delta t} \left(\frac{N_g}{\rho} \right)^n \rho \right). \end{aligned}$$

Переходя к поправочной системе, получаем

$$\Delta N_g^{\nu+1} = \left[q_g + (1 + q_g \delta_g \Delta x) \frac{a}{\Delta V} \right]^{-1} \left(1 + \delta_g \Delta x \frac{a}{\Delta V} \right) (Q_g^{\nu+1} - Q_g^\nu).$$

При суммировании поправочной системы по всем направлениям получаем систему уравнений без коэффициента квазидиффузионного типа, которую можно записать в виде

$$\Delta S N_g^{\nu+1} = e_g^{\nu+1/2} \left(\sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta S N_{g'}^{\nu+1} + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta S N_{g'}^{\nu+1/2} \right), \quad (13)$$

где

$$e_g = \frac{1}{2q_g} \sum_{m=1}^M \frac{(1 + 2\delta_g)_{m-1/2}}{\left(1 + 2\delta_g + \frac{2}{q_g \Delta x} \right)_{m-1/2}} \Delta \mu_{m-1}; \quad (14)$$

$$\Delta S N_g^{\nu+1} = S N_g^{\nu+1} - S N_g^{\nu+1/2}, \quad \Delta S N_g^{\nu+1/2} = S N_g^{\nu+1/2} - S N_g^\nu.$$

Заметим, что коэффициент e_g (14) не зависит от решения на итерациях, а определяется только параметрами разностной сетки τ , Δx , параметром среды α и параметром схемы δ . От параметра схемы θ скорость ВДЭ-метода не зависит.

Систему (13) решаем прямым методом обращения многогрупповой матрицы или методом Зейделя:

$$\Delta S N_g^{k+1} = \frac{e_g^{\nu+1/2}}{1 - e_g^{\nu+1/2} \beta_{gg}^0} \left(\sum_{g'=1}^{g-1} \beta_{g'g} \Delta S N_{g'}^{k+1} + \sum_{g'=g+1}^G \beta_{g'g} \Delta S N_{g'}^k + \sum_{g'=1}^G \beta_{g'g} \Delta S N_{g'}^{\nu+1/2} \right).$$

В одногрупповом случае получаем явную формулу для вычисления поправок $\Delta SN_g^{\nu+1}$:

$$\Delta SN^{\nu+1} = \frac{e^{\nu+1/2}\beta}{1 - e^{\nu+1/2}\beta} \Delta SN^{\nu+1/2}. \quad (15)$$

Нетрудно показать, что при $\beta \leq q$ выполняется неравенство $0 \leq e^{\nu+1/2}\beta < 1$ и в формуле (15) знаменатель всегда больше нуля.

2. Оценка скорости сходимости ВДЭ-метода ускорения итераций в одногрупповом случае для одномерной плоской геометрии

Для одногруппового случая плоской стационарной задачи

$$\mu \frac{\partial N}{\partial r} + \alpha N = \frac{\beta}{2} SN + \frac{f}{2} \quad (16)$$

разностные уравнения (3) имеют вид

$$\begin{aligned} \mu \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta r_i} + \alpha_{i+1/2} N_{i+1/2} &= Q_{i+1/2}, \\ N_{i+1/2} &= \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_i}{2} + \delta \Delta x \mu \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta r_i} - \theta \Delta x \mu \frac{(S\Psi)_{i+1} - (S\Psi)_i}{\Delta r_i}, \end{aligned} \quad (17)$$

где в данном частном случае

$$\begin{aligned} \Delta x &= \frac{\Delta r}{|\mu_m|}; \quad \Psi_{i+1/2} = \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_i}{2}; \quad Q_{i+1/2} = \frac{\beta_{i+1/2}}{2} (SN)_{i+1/2} + \frac{f_{i+1/2}}{2}; \\ \operatorname{div}_h(\vec{\Omega}\Psi) &= \mu \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta r_i} = 2 \frac{\Psi_{i+1/2} - \Psi_s}{\Delta x_i} = 2|\mu| \frac{\Psi_{i+1/2} - \Psi_s}{\Delta r_i}, \quad \Psi_s = \begin{cases} \Psi_i & \text{при } \mu > 0; \\ \Psi_{i+1} & \text{при } \mu < 0; \end{cases} \\ N_{i+1/2} &= 0,5 (\Psi_{i+1} + \Psi_i) + \frac{\mu}{|\mu|} \delta \Delta \Psi_i - \frac{\mu}{|\mu|} \theta \Delta (S\Psi)_i. \end{aligned}$$

В зависимости от значений параметров δ, θ получаем разные схемы решения уравнения переноса (16):

- 1) $\delta = 0,5; \theta = 0$ — DSt-схема (аналог шаговой схемы, имеющей 1-й порядок точности);
- 2) $\delta = 0; \theta = 0$ — DD-схема (алмазная схема, имеющая 2-й порядок точности);
- 3) $\delta = \frac{\alpha \Delta r}{8|\mu|}; \theta = \frac{\beta \Delta r}{16|\mu|}$ — DDAD-схема (диссипативная схема, имеющая 2-й порядок точности);
- 4) $\delta = \frac{\alpha \Delta x}{12} = \frac{\alpha \Delta r}{12|\mu|}; \theta = \frac{\beta \Delta x}{24} = \frac{\beta \Delta r}{24|\mu|}$ — LM-схема (имеющая 4-й порядок точности).

Подставляя $N_{i+1/2}$ из второго уравнения системы (17) в первое, получаем

$$\Psi_{i+1/2} = \frac{2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} \Psi_s + \frac{\frac{1}{\alpha}}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} Q_{i+1/2} + \frac{\theta \frac{\mu}{|\mu|}}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} \Delta (S\Psi)_i. \quad (18)$$

Подставляя $\Psi_{i+1/2}$ из уравнения (18) в $\operatorname{div}_h(\vec{\Omega}\Psi) = 2|\mu| \frac{\Psi_{i+1/2} - \Psi_s}{\Delta r_i}$, а полученное выражение — в первое уравнение системы (17) $N_{i+1/2} = \frac{1}{\alpha_{i+1/2}} \left(Q_{i+1/2} - \operatorname{div}_h(\vec{\Omega}\Psi) \right)$, получаем

$$N_{i+1/2} = \frac{\frac{1 + 2\delta}{\alpha}}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} Q_{i+1/2} + \frac{\frac{2|\mu|}{\alpha \Delta r}}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} \Psi_s - \frac{\frac{2\theta\mu}{\alpha \Delta r}}{1 + 2 \left(\delta + \frac{|\mu|}{\alpha \Delta r} \right)} \Delta (S\Psi)_i. \quad (19)$$

Суммируя $N_{i+1/2}$ из уравнения (19) по μ и составляя поправочное уравнение, получаем явную формулу, аналогичную (13), для вычисления поправок $\Delta SN^{\nu+1}$:

$$\Delta SN^{\nu+1} = \omega_2 \Delta SN^{\nu+1/2}, \quad (20)$$

где $\omega_2 = \frac{\beta_c}{1 - \beta_c}$, $\beta_c = \frac{\beta_g}{2\alpha_g} \sum_{m=1}^M \frac{1 + 2\delta_{g_{m-1/2}}}{1 + 2\delta_{g_{m-1/2}} + \frac{2|\mu_{m-1/2}|}{\alpha_g \Delta r}} \Delta \mu_{m-1}$.

В нестационарном случае $\beta_c = \frac{\beta_g}{2q_g} \sum_{m=1}^M \frac{1 + 2\delta_{g_{m-1/2}}}{1 + 2\delta_{g_{m-1/2}} + \frac{2|\mu_{m-1/2}|}{q_g \Delta r}} \Delta \mu_{m-1}$.

На равномерной сетке с постоянными параметрами α , β коэффициент перехода ω будет постоянным. Тогда на первом этапе для всех ячеек разностной сетки имеем

$$SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu-1/2} = \omega_1 (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}). \quad (21)$$

На втором этапе получаем

$$SN^{\nu+1} - SN^{\nu+1/2} = \omega_2 (SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu}).$$

Для оценки скорости сходимости ВДЭ-метода требуется определить коэффициент перехода ω из условия

$$SN^{\nu+1} - SN^{\nu} = \omega (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}). \quad (22)$$

Если предположить выполнение соотношения

$$SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu} = \omega_3 (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}),$$

где ω_3 — некоторая константа, то получаем

$$SN^{\nu+1} - SN^{\nu+1/2} = \omega_2 \omega_3 (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}); \quad (23)$$

$$SN^{\nu+1} - SN^{\nu} = (SN^{\nu+1} - SN^{\nu+1/2}) + (SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu}) = (\omega_2 \omega_3 + \omega_3) (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}).$$

Отсюда следует, что

$$\omega = \omega_3 (\omega_2 + 1). \quad (24)$$

На предыдущей итерации выполняются соотношения, аналогичные соотношениям (22),

$$SN^{\nu} - SN^{\nu-1} = \omega (SN^{\nu-1} - SN^{\nu-2}), \text{ или } SN^{\nu-1} - SN^{\nu-2} = \frac{1}{\omega} (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}),$$

и соотношения, аналогичные соотношениям (23),

$$SN^{\nu} - SN^{\nu-1/2} = \omega_2 \omega_3 (SN^{\nu-1} - SN^{\nu-2}) = \frac{\omega_2 \omega_3}{\omega} (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}).$$

Из этих уравнений получаем

$$SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu-1/2} = (SN^{\nu+1/2} - SN^{\nu}) + (SN^{\nu} - SN^{\nu-1/2}) = \left(1 + \frac{\omega_2}{\omega}\right) \omega_3 (SN^{\nu} - SN^{\nu-1}).$$

Сравнивая полученное выражение с уравнением (21), получаем что $\omega_1 = \left(1 + \frac{\omega_2}{\omega}\right) \omega_3$, откуда следует $\omega_3 = \frac{\omega \omega_1}{\omega + \omega_2}$. Учитывая соотношение (24), получаем формулу для коэффициента перехода ω через коэффициенты перехода ω_1 , ω_2 для первого и второго этапов:

$$\omega = \omega_1 (1 + \omega_2) - \omega_2. \quad (25)$$

Несложно убедиться, что при любом параметре $\omega_2 \geq 0$ и $\omega_1 \leq 1$ получаем $\omega \leq \omega_1$, т. е. ВДЭ-метод всегда сходится быстрее простой итерации (даже при $\omega_2 \geq 1$).

Спектральным анализом Фурье в работе [6] получено выражение для коэффициента перехода ω_1 на простой итерации:

$$\omega_1 = \frac{\beta}{2\alpha} \sum_{m=1}^M \frac{1}{1 + 2\eta_{m-1/2} \sin \xi} \Delta\mu_{m-1} \leq \frac{\beta}{\alpha},$$

где $\eta_{m-1/2} = \frac{\mu_{m-1/2}}{\alpha h}$; $\xi = \frac{\lambda h}{2}$, $h = \Delta r$, $-\infty < \lambda < \infty$.

Используя коэффициент перехода ω_2 из формулы (20), получаем по формуле (25) $\omega = \frac{\omega_1 - \beta_c}{1 - \beta_c}$.

В случае оптически плотной среды при $\alpha h \rightarrow \infty$ следует, что $\omega_1 \rightarrow \frac{\beta}{\alpha}$, $\beta_c \rightarrow \frac{\beta}{\alpha}$, $\omega \rightarrow 0$. В случае оптически прозрачной среды при $\alpha h \rightarrow 0$ следует, что $\omega_1 \rightarrow 0$, $\beta_c \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$. То есть в предельных случаях скорость сходимости ВДЭ-метода максимальна.

Спектральным анализом Фурье можно получить выражение для коэффициента перехода ω в методе RDSA, рассмотренном в работе [4]:

$$\begin{aligned} \omega &= A\omega_1; & A &= \frac{3\beta h^2 + 8a\theta h (\sin \xi)^2}{3q^0 q^1 h^2 + 4am (\sin \xi)^2}; & q^0 &= \frac{p}{v\tau} + \alpha - \beta; & q^1 &= \frac{p}{v\tau} + \alpha; \\ a &= 1 + q^0 \delta^0 h; & m &= 1 + q^1 h (\delta^0 - 2\theta^0); & \xi &= \frac{\lambda h}{2}; & h &= \Delta r; & -\infty < \lambda < \infty. \end{aligned}$$

В стационарном случае ($p = 0$) оптически плотной среды при $\alpha h \rightarrow \infty$ следует, что $A \rightarrow 0$, $\omega_1 \rightarrow \beta/\alpha$, $\omega \rightarrow 0$. В случае оптически прозрачной среды при $p = 0$, $\alpha h \rightarrow 0$ следует, что $A \rightarrow \frac{3\beta h^2 + 8(1 - \beta h \delta) \theta h (\sin \xi)^2}{4(1 - \beta h \delta) (\sin \xi)^2}$, $\omega_1 \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$.

3. Численные расчеты

Для исследования ВДЭ-метода были проведены методические расчеты.

Задача 1 (Ларсена). Первая модельная задача взята из работы [6].

Плоская система состоит из одной области $0 \leq r \leq 8$ с нулевым источником и коэффициентами α и $\beta = 0,98\alpha$. В задаче варьируется оптическая толщина системы. Геометрия задачи показана на рис. 1.

Правое граничное условие — вакуум; слева — входящий поток $N(0, \mu) = N(0, -\mu) + 1$ для $\mu \geq 0$.

Задача рассчитывалась на сетке с $\Delta r = 1$ ($I = 8$); $\Delta\mu = 0,5$ ($M = 4$). Константы сходимости итераций: $\varepsilon_1 = 10^{-4}$; $\varepsilon_2 = 10^{-4}$. Число групп $G = 1$, задача стационарная.

Результаты расчетов (число итераций) приведены в табл. 1—4. При этом все расчеты проводились по одномерной программе с выбором параметров δ_g , $\theta_{g'g}$ из разд. 2.

Из табл. 1—3 видно, что ВДЭ-метод с применением коэффициента квазидиффузионного типа ускоряет простую итерацию примерно в 2 раза, однако в оптически плотных средах (табл. 2, 3) для

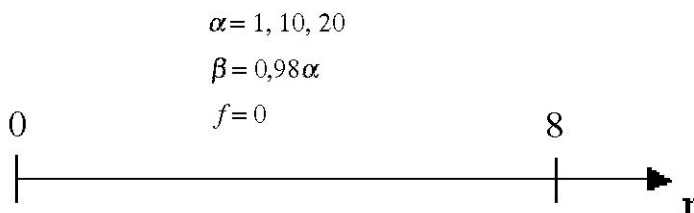


Рис. 1. Геометрия задачи 1

Таблица 1

Число итераций в расчете задачи 1 при $\alpha = 1$

Итерационный метод	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	LM	DDAD	DDAD ($\theta = 0$)
Простая итерация	187	157	187	188	188	169
ВДЭ с коэффициентом d	107	91	107	107	108	97
ВДЭ без коэффициента d	147	60	108	87	82	73

Таблица 2

Число итераций в расчете задачи 1 при $\alpha = 10$

Итерационный метод	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	LM	DDAD	DDAD ($\theta = 0$)
Простая итерация	242	212	215	242	233	185
ВДЭ с коэффициентом d	Расх.*	41	46	97	109	55
ВДЭ без коэффициента d	Расх.	20	33	86	101	10

* Метод расходится.

Таблица 3

Число итераций в расчете задачи 1 при $\alpha = 20$

Итерационный метод	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	LM	DDAD	DDAD ($\theta = 0$)
Простая итерация	222	200	202	234	236	168
ВДЭ с коэффициентом d	Расх.	29	33	135	139	58
ВДЭ без коэффициента d	Расх.	13	20	126	129	5

Таблица 4

Число итераций в расчете задачи 1 при $\alpha = 10$ с применением методов ускорения

Итерационный метод	Разностная схема				
	DD	DSt	DD+DSt	DDAD	LM
ВДЭ с коэф. d ; $\omega = \frac{\beta}{q - \beta + d}$, $-1 \leq \omega \leq 1$	138	122	123	141	135
ВДЭ с коэф. d по Якоби; $\omega = \frac{\beta}{q + d}$	Расх.	129	134	151	145
ВДЭ с коэф. d по Зейделю; $\omega = \frac{\beta}{q + d}$	96	92	134	119	109

DD-схемы расходится из-за возникающих осцилляций. Этого можно избежать, если ввести ограничение на коэффициент перехода с итерации на итерацию (первая строка табл. 4):

$$\omega = \begin{cases} -1 & \text{при } \frac{\beta}{q - \beta + d} < -1; \\ 1 & \text{при } \frac{\beta}{q - \beta + d} > 1; \\ \frac{\beta}{q - \beta + d} & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

К сожалению, это ограничение увеличивает число итераций в остальных схемах почти в 2 раза. Для других схем ВДЭ-метод сходится.

В табл. 4 приведены различные варианты при реализации ускорения по ВДЭ-методу. Во второй и третьей строках табл. 4 приведено число итераций при счете по ВДЭ-методу с применением формул (11), (12). Эти варианты дают примерно такие же результаты, что и ВДЭ-метод с ограничением на коэффициент перехода ω . Поэтому их применение нецелесообразно. Вариант с методом типа Зейделя для поправок дает чуть лучшие показатели за счет введения внутренних итераций. Внутренние итерации доводились до сходимости с константой сходимости 0,01, и их число обычно не превышало 3.

Из табл. 1–3 видно, что ВДЭ-метод дает наилучшие результаты для DSt и DDAD-схем с $\theta = 0$, ускоряя простую итерацию примерно от 3 до 33 раз, однако при $\theta = 0$ точность расчетов снижается до первого порядка.

На основе разных вариантов одногрупповой задачи Ларсена была создана многогрупповая задача. В многогрупповом случае задача была сформулирована с учетом различных оптических толщин

для четырех групп: $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 10, \alpha_3 = 20, \alpha_4 = 30$; $\beta_{g'g} = \begin{cases} 0,98\alpha_g & \text{при } g = g'; \\ 0 & \text{при } g \neq g'. \end{cases}$ Результаты

расчетов этой задачи приведены в табл. 5.

Из табл. 5 видно, что результаты расчетов многогрупповой задачи качественно повторяют результаты расчетов одногрупповых задач.

Таблица 5

Число итераций в расчете многогрупповой задачи 1

Итерационный метод	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	LM	DDAD	DDAD ($\theta = 0$)
Метод Зейделя по группам	242	212	215	242	236	185
ВДЭ с коэффициентом d	Расх.	91	107	139	139	97
ВДЭ без коэффициента d	Расх.	60	108	128	129	73

Задача 2 (Кобаяши). Для второй модельной задачи расчеты проводились только в многогрупповой постановке. Многогрупповые константы взяты из работы [7].

Сферически-симметричная система, $0 \leq r \leq 105$, состоит из трех областей (рис. 2) с единичным источником во 2-й и 3-й группах первой области. Число групп $G = 4$, задача стационарная.

Начальное условие: $N_g = 0$ при $t = 0, g = 1, \dots, 4$.

Граничное условие: $N_g = 0$ при $\mu < 0, g = 1, \dots, 4$.

Константы α задаются табл. 6.

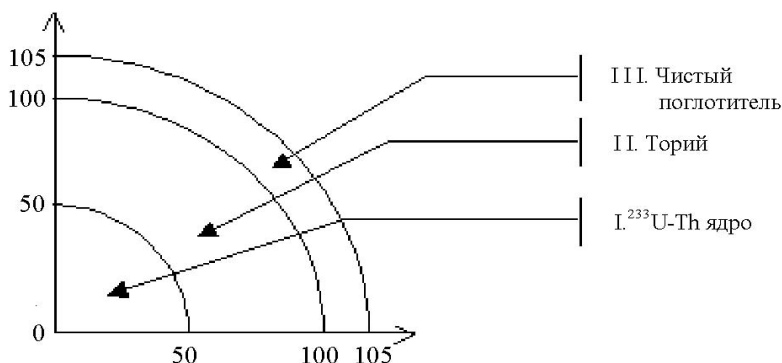


Рис. 2. Геометрия задачи 2

Значения α для задачи 2

g	Область I	Область II	Область III
1	0,09947	0,12494	1
2	0,13572	0,16404	1
3	0,17825	0,23776	1
4	0,26476	0,34153	1

В области 1

$$\{\beta_{g'g}\} = \begin{pmatrix} 0,06293 & 0,02963 & 0,0029 & 0 \\ 0 & 0,12415 & 0,0067 & 0,0003 \\ 0 & 0 & 0,16905 & 0,0032 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25455 \end{pmatrix} + 10^{-3} \cdot \begin{pmatrix} 9,94141 & 9,94141 & 9,94141 & 9,94141 \\ 8,41624 & 8,41624 & 8,41624 & 8,41624 \\ 9,60889 & 9,60889 & 9,60889 & 9,60889 \\ 1,46382 & 1,46382 & 1,46382 & 1,46382 \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 0,577 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,362 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,061 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,06866619357 & 0,03322879042 & 0,00350642601 & 0 \\ 0,00485617048 & 0,12719667888 & 0,00721339064 & 0,0003 \\ 0,00554432953 & 0,00347841818 & 0,16963614229 & 0,0032 \\ 0,00084462414 & 0,00052990284 & 0,00008929302 & 0,25455 \end{pmatrix}.$$

В области 2

$$\{\beta_{g'g}\} = \begin{pmatrix} 0,06963 & 0,04736 & 0,00512 & 0 \\ 0 & 0,15353 & 0,0079 & 0,00004 \\ 0 & 0 & 0,22893 & 0,00399 \\ 0 & 0 & 0 & 0,33242 \end{pmatrix} + 10^{-3} \cdot \begin{pmatrix} 4,83123 & 4,83123 & 4,83123 & 4,83123 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 0,577 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,362 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,061 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,07241761971 & 0,04910890526 & 0,00541470503 & 0 \\ 0 & 0,15353 & 0,0079 & 0,00004 \\ 0 & 0 & 0,22893 & 0,00399 \\ 0 & 0 & 0 & 0,33242 \end{pmatrix}.$$

В области 3 $\{\beta_{g'g}\} = 0$.

Задача рассчитывалась на сетке с $\Delta r = 1$ ($I = 105$); $\Delta \mu = 0,25$ ($M = 8$). Константы сходимости итераций: $\varepsilon_1 = 10^{-4}$; $\varepsilon_2 = 10^{-4}$. Результаты расчетов приведены в табл. 7.

Из табл. 7 видно, что применение при расчете задачи 2 ВДЭ-метода без коэффициента d дает наименьшее число итераций.

Решение задачи в виде профиля SN_g для всех групп приведено на рис. 3.

Число итераций в расчете задачи 2

Итерационный метод	Разностная схема					
	DD	DSt	DD+DSt	LM	DDAD	DDAD ($\theta = 0$)
Простая итерация	481	431	481	482	482	478
Метод Зейделя по группам	464	416	464	465	465	464
ВДЭ с коэффициентом d	412	369	412	413	413	409
ВДЭ без коэффициента d	403	321	403	400	398	403
ВДЭ без коэффициента d с простой итерацией по группам на обоих этапах	419	331	419	416	461	410

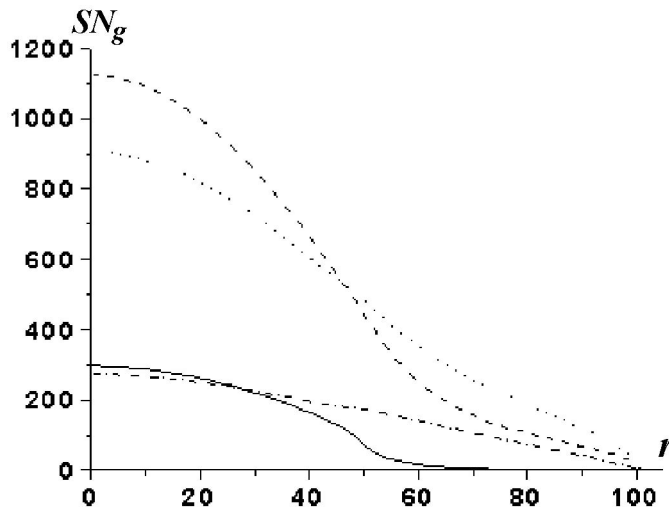


Рис. 3. Профиль SN_g : — — $g = 1$; - - - $g = 2$; ··· — $g = 3$; - · - · $g = 4$

Заключение

В результате проведенных исследований можно сказать, что ВДЭ-метод, реализованный для уравнения переноса нейтронов, дает менее значительное ускорение итераций, чем для задач переноса излучения. Он уступает RDSA-методу по скорости сходимости итераций, но является более простым в реализации и легко распараллеливается.

Список литературы

1. Schmidt E. Auflosung der allgemeinen linear Integralgleichungen // Math. Ann. 1907. Bd. 64. S. 161.
2. Гусев В. Ю., Козманов М. Ю., Рачилов Е. Б. Метод решения неявных разностных уравнений, аппроксимирующих системы уравнений переноса и диффузии излучения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1984. Т. 24, № 12. С. 1842—1849.
3. Гаджиев А. Д., Селезнев В. Н., Шестаков А. А. DS_n -метод с искусственной диссипацией и ВДМ-метод ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в кинетической модели // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 33—46.
4. Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Шестаков А. А. RDSA-метод для численного решения уравнения переноса нейтронов // Там же. 2007. Вып. 2. С. 3—19.

5. *Гаджиев А. Д., Шестаков А. А.* Метод выделения диагональной матрицы для численного решения уравнения переноса излучения в P_1 -приближении по схеме РОМБ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 1. С. 3—13.
6. *Larsen E. W.* Unconditionally stable diffusion-synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete ordinates equation // Nucl. Sci. and Eng. 1982. Vol. 82. P. 47—70.
7. *Kobajashi K., Misawa T.* Spherical harmonics method for a two-dimensional multigroup transport equation using a semi-discrete ordinates equation: part II // Ibid. 1986. Vol. 92. P. 407—420.

Статья поступила в редакцию 19.03.08.
