ПОСТАНОВКА ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ В БИКОМПАКТНЫХ СХЕМАХ ДЛЯ НОLO АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

© 2019 г. Е.Н. Аристова¹, Н.И. Караваева^{1,2}

¹ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва ² Московский физико-технический институт, Долгопрудный МО aristovaen@ mail.ru; natali95k@mail.ru

DOI: 10.1134/S0234087919090016

Рассмотрены бикомпактные схемы для HOLO алгоритмов решения уравнения переноса. В этих алгоритмах для ускорения сходимости итераций по рассеянию используется не только решение уравнения переноса относительно функции распределения высокой размерности (HO – high order), но и уравнения квазидиффузии более низкой размерности (LO – low order). Для обеих систем кинетических уравнений используются полудискретные бикомпактные схемы, обладающие четвертым порядком аппроксимации по пространству. Интегрирование по времени может проводиться с любым порядком аппроксимации, в работе используется диагонально-неявный метод третьего порядка аппроксимации, каждая стадия которого может быть сведена к неявному методу Эйлера. Подробно описана дискретизация уравнений квазидиффузии. Исследованы два варианта постановки краевых условий – классический, посредством введения дробно-линейных функционалов, и вариант непосредственной постановки условий для плотности излучения из решения уравнения переноса НО части. Показано, что постановка краевых условий для LO системы уравнений квазидиффузии понижает порядок сходимости схемы по времени до второго. Постановка краевых условий по решению уравнения переноса сохраняет третий порядок сходимости по времени, но ухудшает эффективность HOLO алгоритмов ускорения итераций.

Ключевые слова: уравнение переноса, метод квазидиффузии, бикомпактная схема, HOLO алгоритмы решения уравнения переноса, потоковая прогонка, диагональнонеявные методы Рунге–Кутты.

THE BOUNDARY CONDITIONS IN THE BICOMPACT SCHEMES FOR HOLO ALGORITHMS FOR SOLVING THE TRANSPORT EQUATION

E.N. Aristova¹, N.I. Karavaeva^{1,2}

¹ Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS

² Moscow Institute of Physics and Technology

The paper considers bicompact schemes for HOLO algorithms for solving the transport equation. To accelerate the convergence of scattering iterations, not only the solution of

the transfer equation with respect to the distribution function of high order (HO) is used, but also the quasidiffusion equation of low order (LO) is used. For both systems of kinetic equations semi-discrete bicompact schemes with the fourth order of approximation in space are constructed. Integration over time can be carried out with any order of approximation. The diagonal-implicit third order approximation method is used in the work, its each stage can be reduced to the implicit Euler method. The discretization of quasi-diffusion equations is described in detail. Two variants for the boundary conditions for the LO part are considered: the classical one using fractional-linear functionals for the flux and radiation density ratio, and also by the radiation density value from the HO part of the system. It is shown that the classical boundary conditions for the LO system of equations of quasi-diffusion reduces the order of convergence of the scheme in time to the second. Setting the boundary conditions under the solution of the transport equation preserves the third order of convergence in time, but worsens the efficiency of iteration acceleration in HOLO algorithm.

Keywords: transport equation, quasi-diffusion method, bicompact scheme, HOLO algorithms for transport equation solving, sweep method, diagonally implicit Runge-Kutta method.

1. Введение. Линейное уравнение переноса описывает процесс переноса излучения или незаряженных частиц. К необходимости решения уравнения переноса приводят различные задачи науки и техники от моделирования конструкции и поведения активных зон быстрых реакторов до расчета сложных газодинамических течений, сопровождающихся активным переносом излучения, как, например, в задачах управляемого термоядерного синтеза или при входе возвращаемых космических аппаратов в атмосферу Земли.

В одномерном нестационарном приближении это уравнение для одной группы частиц по энергии имеет вид

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

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

Здесь введены следующие обозначения: $I(x,t,\mu) - функция распределения,$ зависящая от фазовых переменных и времени, μ – косинус угла направления полета частицы, составляемого с направлением оси x, S(I) – член рассеяния, $F(x,t,\mu)$ – внешний источник, κ_a, κ_s – коэффициенты поглощения и рассеяния соответственно, w_j – коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния по полиномам Лежандра $P_i(\mu)$. Для уравнения (1) ставится начально-краевая задача

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

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

В ряде задач ставятся более сложные краевые условия отражения.

Уравнение (1) является интегро-дифференциальным, и для его решения обычно по интегральным членам рассеяния (и деления) используется итерационный процесс. Для ряда задач такой итерационный процесс может быть медленно сходящимся.

2. НОLO алгоритмы. Эффективным методом ускорения итераций по членам рассеяния (и деления), а также для организации эффективной связи решения уравнения переноса с другими уравнениями, описывающими состояние среды, через которую проходит излучение или поток частиц, являются HOLO алгоритмы. Их основная идея заключается в совместном решении уравнений высокой размерности (HO – high order) и уравнений низкой размерности (LO – low order) [1–8].

В рассматриваемой задаче уравнением высокой размерности является уравнение переноса (1), а уравнением низкой размерности – система уравнений квазидиффузии. Для ее получения введем следующие величины: U(x,t) – плотность излучения, сопоставляемую с интегралом от функции распределения по угловой переменной $\mu = \cos\theta$: $U(x,t) = \int_{-1}^{1} I(x,t,\mu)d\mu$, и W(x,t) – поток, сопоставляемый с аналогичным интегралом с весовой функцией μ : $W(x,t) = \int_{-1}^{1} \mu I(x,t,\mu)d\mu$. Проинтегрировав уравнение (1) по переменной μ с весами 1 и μ и использовав ортогональность многочленов Лежандра, получим систему уравнений квазидиффузии:

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} + \kappa_0(x,t)U = Q_0(x,t), \\ \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial DU}{\partial x} + \kappa_1(x,t)W = Q_1(x,t), \\ Q_0(x,t) = \int_{-1}^{1} F(x,t,\mu)d\mu, \quad Q_1(x,t) = \int_{-1}^{1} \mu F(x,t,\mu)d\mu, \\ \kappa_0 = \kappa_a, \quad \kappa_1 = \kappa_a + \kappa_s(1-w_1). \end{cases}$$
(3)

В уравнениях квазидиффузии введен коэффициент квазидиффузии

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

зависящий дробно-рациональным образом от искомого решения.

В рамках реализации HOLO алгоритма решения уравнения (1) и системы (3) оказываются тесно связанными. Из системы (3) рассчитываются плотность и поток излучения, их значения передаются в уравнение переноса (1) для вычисления главных трех первых членов интеграла рассеяния. Решение уравнения (1) для ряда угловых направлений, соответствующих выбору узлов квадратурной формулы по углам, позволяет рассчитать интегралы, входящие в коэффициент квазидиффузии (4) и в граничные условия для системы уравнений квазидиффузии. В данном простейшем одномерном случае использовались квадратуры Гаусса отдельно для положительных и отрицательных угловых направлений, т.к. на характеристике $\mu = 0$ решение не только может быть недифференцируемым, но и может терпеть разрыв.

Для нахождения решения необходимо организовать итерационный процесс, включающий решение уравнений LO и HO и обмен данными между ними. Алгоритм повторяется до достижения необходимой точности на каждом шаге по времени.

3. Вывод бикомпактной схемы для уравнения переноса. Для решения начально-краевой задачи (1)–(2) в [9–15] были разработаны бикомпактные схемы, обладающие четвертым порядком аппроксимации по пространственным переменным и произвольным (в реализации – третьим) по времени на минимальном двухточечном шаблоне по каждой из переменных. В качестве примера построения схемы для расчета, реализующей возможности достижения четвертого порядка аппроксимации по пространского порядка аппроксимации по времени, рассмотрим вывод схемы для уравнения переноса с изотропным рассеянием, которое в схеме HOLO итераций можно считать уравнением с известной правой частью:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + \kappa_t I = Q,$$
(5)
$$\kappa_t = \kappa_a + \kappa_s, \quad Q = 0.5\kappa_s U + F.$$

Здесь величины v – скорость рассматриваемой группы частиц и μ – косинус угла, составляемого направлением движения частицы с положительным направлением оси x, они не зависят от пространственной координаты и вре-

мени. Коэффициенты поглощения и рассеяния κ_a , κ_s и их сумма могут зависеть от времени и пространственной координаты.

Для уравнения (5) ставится начально-краевая задача (2).

Для начала введем сетку $\{x_i, 0 \le i \le N_x\}$ на отрезке $x \in [0, L]$ и пространственный шаг $h_i = x_{i+1} - x_i$. В дальнейшем индекс, указывающий на номер ячейки, будет опускаться, так как разностная схема строится в рамках одной ячейки.

Бикомпактная схема строится методом прямых с выводом полудискретной системы уравнений – пространственные производные аппроксимируются конечными разностями, а производные по времени оставляются в дифференциальном виде. Вывод полудискретной формы бикомпактной схемы для уравнения переноса основан на смешанной конечно-объемной (FV – Finite Volume) и конечно-разностной (FD – Finite Difference) технике.

Стандартным образом на двухточечном шаблоне возможно достижение второго порядка аппроксимации, для увеличения порядка до четвертого используется расширение списка неизвестных и включение в него помимо узловых значений искомой функции I_i интегральных средних от величины I по ячейке. Введем для них следующее обозначение:

$$\overline{I}_i = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} I dx \,. \tag{6}$$

В рамках FV подхода уравнение (5) интегрируется по ячейке, в результате получается точное следствие исходного уравнения следующего вида:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial \overline{I_i}}{\partial t} + \frac{\mu}{h}(I_{i+1} - I_i) + \overline{\kappa_{t,i}} I_i = \overline{Q}, \qquad \qquad \overline{Q_i} = \frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_{i+1}} Q dx.$$
(7)

В уравнение (7) входит среднее от произведения заданной и искомой функций $\overline{\kappa_{t,i} I_i}$. Замена $\overline{\kappa_{t,i} I_i} = \overline{\kappa}_{t,i} \overline{I_i}$ доставляет лишь второй порядок аппроксимации по пространству. При заданном двойном наборе узловых и средних искомых величин для достижения четвертого порядка аппроксимации по пространству воспользуемся формулой Симпсона. Считая, что значение коэффициента κ_t доступно в любой пространственной точке, введем его значение в полуцелом узле. Записывая выражение для интегральных средних $\overline{\kappa_{t,i} I_i}$ и $\overline{I_i}$ с помощью формулы Симпсона и исключая неизвестное значение в полуцелом узле $I_{i+1/2}$, имеем

Е.Н. Аристова, Н.И. Караваева

$$\frac{\kappa_{t,i}I_i = (\kappa_{t,i}I_i + 4\kappa_{t,i+1/2}I_{i+1/2} + \kappa_{t,i+1}I_{i+1})/6,}{\overline{I_i} = (I_i + 4I_{i+1/2} + I_{i+1})/6.}$$
(8)

Таким образом, среднее от произведения примет вид

$$\overline{\kappa_{t,i} I_i} = (\kappa_{t,i} - \kappa_{t,i+1/2}) I_i / 6 + \kappa_{t,i+1/2} \overline{I_i} + (\kappa_{t,i+1} - \kappa_{t,i+1/2}) I_{i+1} / 6.$$
(9)

Уравнения (7) с учетом (8) недостаточно для нахождения всех нужных величин. Вторым шагом (FD) для получения замкнутой системы уравнений к уравнению (7) добавляют проинтегрированное по ячейке первое дифференциальное следствие уравнения (5). Первое дифференциальное следствие представляет собой уравнение, правая и левая часть которого суть производные по x от соответствующей части исходного уравнения:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial I}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\kappa_t I) = \frac{\partial}{\partial x}Q.$$
(10)

Тогда при интегрировании (10) по ячейке получим следующее выражение:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial (I_{i+1} - I_i)}{\partial t} + \mu \left(\frac{\partial I}{\partial x} \Big|_{i+1} - \frac{\partial I}{\partial x} \Big|_i \right) + (\kappa_t I)_{i+1} - (\kappa_t I)_i = Q_{i+1} - Q_i.$$
(11)

В него, помимо узловых значений *I*, также входят пространственные производные функции распределения в узлах. Для их исключения из системы уравнений в [5] предложено использовать формулу Эйлера–Маклорена, обладающую четвертым порядком аппроксимации:

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

С учетом связи разности производных с узловыми значениями и интегральным средним (12) уравнение (11) оказывается возможным переписать следующим образом:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial(I_{i+1}-I_i)}{\partial t} + \frac{6\mu}{h}(I_{i+1}-2\overline{I}_i+I_i) + (\kappa_t I)_{i+1} - (\kappa_t I)_i = Q_{i+1} - Q_i.$$
 (13)

Система полудискретных уравнений (7), (13) замкнута относительно переменных I, \overline{I} , не содержит в себе производных по пространству и может быть проинтегрирована по времени любым удобным способом. Мы будем использовать L-устойчивый диагонально-неявный метод Рунге-Кутты третьего порядка аппроксимации с таблицей Бутчера

$$\frac{\mathbf{c} \mid \mathbf{A}}{\mid \mathbf{b}^{\mathrm{T}}} = \frac{\begin{array}{c} 1 & 1 \\ 1/3 & 0 & 1/3 \\ 1 & -1/12 & 3/4 & 1/3 \end{array}}{\begin{array}{c} -1/12 & 3/4 & 1/3 \end{array}}.$$
(14)

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

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

где ξ обозначает решение на предыдущем шаге по времени, ξ – решение на новом шаге по времени. Цифры в скобках в верхних индексах обозначают номер стадии.

Соответственно, неявный метод Эйлера определяет базовую схему реализации метода Рунге-Кутты по времени. Система уравнений для неявного метода Эйлера в применении к (7), (13) запишется следующим образом:

$$\left(\frac{1}{v}\frac{\overline{I}_{i}^{n+1}-\overline{I}_{i}^{n}}{\Delta t} + \left(\frac{\mu}{h} + \frac{(\kappa_{t,i+1}-\kappa_{t,i+1/2})}{6}\right)I_{i+1}^{n+1} + \left(\frac{(\kappa_{t,i}-\kappa_{t,i+1/2})}{6} - \frac{\mu}{h}\right)I_{i}^{n+1} + \kappa_{t,i+1/2}\overline{I_{i}} = \overline{Q}_{i}^{n+1}, \\
\frac{1}{v}\frac{(I_{i+1}^{n+1}-I_{i}^{n+1}) - (I_{i+1}^{n}-I_{i}^{n})}{\Delta t} + \frac{6\mu}{h}(I_{i+1}^{n+1}-2\overline{I}_{i}^{n+1}+I_{i}^{n+1}) + \\
+ (\kappa_{t}I)_{i+1}^{n+1} - (\kappa_{t}I)_{i}^{n+1} = Q_{i+1}^{n+1} - Q_{i}^{n+1}.$$
(15)

Система (15) вместе с соответствующим знаку µ граничным условием ре-

шается методом бегущего счета на каждом временном слое: для $\mu > 0$ слева направо, для $\mu < 0$ справа налево. Более подробно численная реализация схемы для уравнения переноса изложена, например, в [16].

4. Схема для системы уравнений квазидиффузии. Дифференциальная система уравнений низкой размерности (уравнений квазидиффузии) получается интегрированием уравнения переноса с весами 1 и μ по угловой переменной. Поэтому схему для LO системы уравнений можно строить двумя различными путями.

1. Строить схему для дифференциальной системы двух уравнений в частных производных. Принципы построения расчетной схемы для системы уравнений квазидиффузии мало отличаются от принципов, описанных выше для уравнения переноса.

2. Пусть у нас задана квадратурная формула для вычисления интегралов от функции распределения вида

$$\int_{-1}^{1} f(I,\mu)d\mu \simeq \sum_{k} c_k f(I_k,\mu_k), \qquad (16)$$

где c_k – веса квадратурной формулы, μ_k – узлы квадратуры. Разностная схема может быть получена из разностной схемы для уравнения переноса суммированием с весами квадратурной формулы каждого из двух уравнений и их же, домноженных на μ_k .

Выпишем главные этапы вывода схемы первым из этих методов для системы следующего вида (изотропное рассеяние):

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} + \kappa_a(x,t)U = Q_0(x,t), \\ \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial DU}{\partial x} + \kappa_t(x,t)W = Q_1(x,t). \end{cases}$$
(17)

Система уравнений квазидиффузии (LO) (17) получена из уравнения (5) интегрированием по углам с весом 1 и µ. Начальные условия к ней также получаются интегрированием по углам начального условия (2).

В классическом варианте HOLO алгоритмов граничные условия для системы (17) получаются из решения уравнения переноса введением еще одного класса дробно-линейных функционалов:

Постановка граничных условий в бикомпактных ...

$$\frac{W - W^{in}}{U - U^{in}}\Big|_{x=0} = c_0, \qquad \frac{W - W^{in}}{U - U^{in}}\Big|_{x=L} = c_L,$$

$$c_0 = \frac{\int_{-1}^{0} \mu I(t, x, \mu) d\mu}{\int_{-1}^{0} I(t, x, \mu) d\mu}, \qquad c_L = \frac{\int_{0}^{1} \mu I(t, x, \mu) d\mu}{\int_{0}^{1} I(t, x, \mu) d\mu}.$$
(18)

Значения падающих плотности и потока излучения на границах области получаются из краевых условий (2):

$$U^{in}\Big|_{x=0} = \int_{0}^{1} \phi_{0}(t,\mu)d\mu, \qquad W^{in}\Big|_{x=0} = \int_{0}^{1} \mu \phi_{0}(t,\mu)d\mu,$$
$$U^{in}\Big|_{x=L} = \int_{-1}^{0} \phi_{L}(t,\mu)d\mu, \qquad W^{in}\Big|_{x=L} = \int_{-1}^{0} \mu \phi_{L}(t,\mu)d\mu.$$
(19)

Нами также был рассмотрен вариант непосредственной постановки условий для плотности излучения из решения уравнения переноса НО части

$$U\Big|_{x=0} = \int_{-1}^{1} I(t,0,\mu)d\mu, \qquad U\Big|_{x=L} = \int_{-1}^{1} I(t,L,\mu)d\mu.$$
(20)

Для вывода схемы мы в первую очередь расширяем список неизвестных, добавляя средние по ячейке от обеих неизвестных. Введем обозначения

$$\overline{u}_{i} = \frac{1}{h} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} U(x,t) dx, \qquad \overline{w}_{i} = \frac{1}{h} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} W(x,t) dx,$$

$$\overline{Q}_{0i} = \frac{1}{h} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} Q_{0}(x,t) dx, \qquad \overline{Q}_{1i} = \frac{1}{h} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} Q_{1}(x,t) dx.$$
(21)

Проинтегрировав по ячейке оба уравнения, получим первые два уравнения системы

$$\begin{cases} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial t} + \frac{1}{h}(W_{i+1} - W_{i}) + \overline{\kappa_{a,i} u_{i}} = \overline{Q}_{0i}, \\ \frac{\partial \overline{w}_{i}}{\partial t} + \frac{1}{h}((DU)_{i+1} - (DU)_{i}) + \overline{\kappa_{t,i} w_{i}} = \overline{Q}_{1i}. \end{cases}$$
(22)

Далее находим первые дифференциальные следствия от обоих уравнений и тоже интегрируем их по ячейке

$$\begin{cases} \frac{\partial (U_{i+1} - U_i)}{\partial t} + \frac{6}{h} (W_{i+1} - 2\overline{w}_i + W_i) + ((\kappa_a U)_{i+1} - (\kappa_a U)_i) = Q_{0i+1} - Q_{0i}, \\ \frac{\partial (W_{i+1} - W_i)}{\partial t} + \frac{6}{h} ((DU)_{i+1} - 2\overline{(DU)_i} + (DU)_i) + ((\kappa_t W)_{i+1} - (\kappa_t W)_i) = Q_{1i+1} - Q_{1i}. \end{cases}$$
(23)

Средние $\overline{\kappa_{a,i} u_i}$ и $\overline{\kappa_{t,i} w_i}$ раскроем с четвертым порядком аппроксимации, аналогично формулам (9). В формулы (23) входит также среднее от \overline{DU} .

Коэффициент \overline{D} не является независимым коэффициентом, а вводится как дробно-линейный функционал от интегрального среднего в ячейке \overline{I} при интегрировании по углам (4), (16):

$$\overline{D} = \sum_{k} c_{k} \mu_{k}^{2} \overline{I}_{k} / \sum_{k} c_{k} \overline{I}_{k} .$$
⁽²⁴⁾

Раскрытие средних $\overline{(DU)}_i$ по формуле $\overline{(DU)}_i = \overline{D}_i \overline{u}_i$, обладающей формально вторым порядком аппроксимации, из требования кинетической согласованности схем для уравнений квазидиффузии (HO) со схемой для уравнения переноса (LO) приводит к схеме четвертого порядка аппроксимации, т.к в этом случае при сходимости итераций выполняется точное равенство

$$\overline{DU} = \sum_{k} c_{k} \mu_{k}^{2} \overline{I}_{k} = \frac{\sum_{k} c_{k} \mu_{k}^{2} \overline{I}_{k}}{\sum_{k} c_{k} \overline{I}_{k}} \sum_{k} c_{k} \overline{I}_{k} = \overline{D}\overline{u}.$$

Интегрирование по угловым переменным для LO уравнений приводит к тому, что на каждом шаге по времени возникает краевая задача по пространству. Для реализации базовой схемы при интегрировании по времени – неявного метода Эйлера – в данном случае потребуется использовать метод потоковой прогонки. Подробности реализации схемы можно найти в [19]. Для интегрирования по углам используется метод Гаусса с пятью узлами на каждом из полуинтервалов от [-1,0] и [0,1].

5. Реализация базовой схемы неявного метода Эйлера для уравнений квазидиффузии. Рассмотрим реализацию неявного метода Эйлера для системы уравнений (17):

$$\frac{\overline{u}_i^{n+1} - \overline{u}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{h} (W_{i+1}^{n+1} - W_i^{n+1}) + \overline{(\kappa_a u)}_i^{n+1} = \overline{Q}_{0i}^{n+1},$$

Постановка граничных условий в бикомпактных ...

$$\frac{(U_{i+1}^{n+1} - U_{i}^{n+1}) - (U_{i+1}^{n} - U_{i}^{n})}{\Delta t} + \frac{W_{i+1}^{n+1} - 2\overline{w}_{i}^{n+1} + W_{i}^{n+1}}{h/6} + \\ + (\kappa_{a}U)_{i+1}^{n+1} - (\kappa_{a}U)_{i}^{n+1} = Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}, \\ \frac{\overline{w}_{i}^{n+1} - \overline{w}_{i}^{n}}{\Delta t} + \frac{1}{h} (D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - D_{i}^{n+1}U_{i}^{n+1}) + \overline{(\kappa_{t}w)}_{i}^{n+1} = \overline{Q}_{1i}^{n+1}, \quad (25)$$
$$\frac{(W_{i+1}^{n+1} - W_{i}^{n+1}) - (W_{i+1}^{n} - W_{i}^{n})}{\Delta t} + \frac{D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - 2\overline{(DU)}_{i}^{n+1} + D_{i}^{n+1}U_{i}^{n+1}}{h/6} +$$

+
$$(\kappa_t W)_{i+1}^{n+1} - (\kappa_t W)_i^{n+1} = Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}$$
.

Запишем систему (25) в виде

$$\begin{cases} m_{0i}\overline{u}_{i}^{n+1} + C(W_{i+1}^{n+1} - W_{i}^{n+1}) + (d_{a,i+1}U_{i+1}^{n+1} - d_{a,i+1/2}U_{i}^{n+1}) = F_{1i}^{n}, \\ m_{a,i+1}U_{i+1}^{n+1} - m_{a,i}U_{i}^{n+1} + 6C(W_{i+1}^{n+1} - 2\overline{w}_{i}^{n+1} + W_{i}^{n+1}) = F_{2i}^{n}, \\ m_{1i}\overline{w}_{i}^{n+1} + C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - D_{i}^{n+1}U_{i}^{n+1}) + (d_{t,i+1}W_{i+1}^{n+1} - d_{t,i+1/2}W_{i}^{n+1}) = F_{3i}^{n}, \\ m_{t,i+1}W_{i+1}^{n+1} - m_{t,i}W_{i}^{n+1} + 6C(D_{i+1}^{n+1}U_{i+1}^{n+1} - 2\overline{D}_{i}^{n+1}\overline{u}_{i}^{n+1} + D_{i}^{n+1}U_{i}^{n+1}) = F_{4i}^{n}, \end{cases}$$
(26)

где коэффициенты системы

$$\begin{split} m_{a,i} &= 1 + \Delta t \kappa_{a,i}^{n+1}, \quad m_{t,i} = 1 + \Delta t \kappa_{t,i}^{n+1}, \\ d_{a,i+1} &= \Delta t (\kappa_{a,i+1}^{n+1} - \kappa_{a,i+1/2}^{n+1}) / 6, \quad d_{t,i+1} = \Delta t (\kappa_{t,i+1}^{n+1} - \kappa_{t,i+1/2}^{n+1}) / 6, \\ F_{1i}^{n} &= \Delta t \overline{Q}_{0i}^{n+1} + \overline{u}_{i}^{n}, \quad F_{2i}^{n} = \Delta t (Q_{0i+1}^{n+1} - Q_{0i}^{n+1}) + (U_{i+1}^{n} - U_{i}^{n}), \\ F_{3i}^{n} &= \Delta t \overline{Q}_{1i}^{n+1} + \overline{w}_{i}^{n}, \quad F_{4i}^{n} = \Delta t (Q_{1i+1}^{n+1} - Q_{1i}^{n+1}) + (W_{i+1}^{n} - W_{i}^{n}). \end{split}$$

Теперь выразим из первого и третьего уравнений (26) \overline{u}_i^{n+1} и \overline{w}_i^{n+1} и подставим во второе и четвертое. Эти уравнения относительно неизвестных на верхнем слое примут вид (верхний индекс n + 1 в дальнейшем опускается):

$$\begin{cases} A_{1}U_{i+1} + B_{1}U_{i} + C_{1}W_{i+1} + D_{1}W_{i} = G_{1}, \\ A_{2}U_{i+1} + B_{2}U_{i} + C_{2}W_{i+1} + D_{2}W_{i} = G_{2}, \end{cases}$$
(27)

с коэффициентами

$$A_{1} = m_{a,i+1} + \frac{12C^{2}}{m_{t,i+1/2}}D_{i+1}^{n+1}, \qquad B_{1} = -m_{a,i} - \frac{12C^{2}}{m_{t,i+1/2}}D_{i}^{n+1},$$

$$\begin{split} C_1 &= 6C + \frac{12C}{m_{t,i+1/2}} d_{t,i+1}, \qquad D_1 = 6C - \frac{12C}{m_{t,i+1/2}} d_{t,i+1/2}, \quad G_1 = F_{2i}^n + \frac{12C}{m_{t,i+1/2}} F_{3i}^n, \\ A_2 &= 6CD_{i+1}^{n+1} + \frac{12Cd_{a,i+1}}{m_{a,i+1/2}} \overline{D}_i^{n+1}, \quad B_2 = 6CD_i^{n+1} - \frac{12Cd_{a,i+1/2}}{m_{a,i+1/2}} \overline{D}_i^{n+1}, \\ C_2 &= m_{t,i+1} + \frac{12C^2}{m_{a,i+1/2}} \overline{D}_i^{n+1}, \qquad D_2 = -m_{t,i} - \frac{12C^2}{m_{a,i+1/2}} \overline{D}_i^{n+1}, \\ G_2 &= F_{4i}^n + \frac{12C}{m_{a,i+1/2}} \overline{D}_i^{n+1} F_{1i}^n. \end{split}$$

Система уравнений (27) с краевыми условиями (18) или (20), которые переписываются в виде

$$\mu_{0}(t)W(0,t) + \tau_{0}(t)U(0,t) = \eta_{0}(t),$$

$$\mu_{L}(t)W(L,t) + \tau_{L}(t)U(L,t) = \eta_{L}(t),$$
(28)

может быть решена методом потоковой прогонки [19].

6. Аналитический тест для HOLO алгоритма. Составим аналитическое решение для (5) на $x \in [0,1]$, в качестве функции распределения выберем

$$I(x,t,\mu) = (1 + \mu + e^{-x})(1 + \mu + e^{-t}).$$

Коэффициенты рассеяния и поглощения зададим в виде

$$\kappa_a = A_0, A_0 = 0.1, \kappa_s = B_0 + B_1 \sin x, B_0 = 0.2, B_1 = 0.01.$$

Интегрированием по µ получатся следующие точные решения для плотности и потока излучения:

$$U(x,t) = 2/3 + 2e^{-x-t},$$

$$W(x,t) = 2(e^{-x} + e^{-t})/3.$$

В вычислениях потребуются величины F, Q_0, Q_1 , найдем F из (5):

$$F = \frac{1}{v} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + \kappa_t I - \frac{\kappa_s}{2} U.$$

Величины Q_0 , Q_1 вычислим по (3).

Начально-краевая задача ставится в соответствии с (2). В [16] показано, что для достижения третьего порядка аппроксимации по времени для методов Рунге–Кутты краевые условия необходимо ставить, используя производные по времени

$$I'_{t}(x,t,\mu)\big|_{x=x_{0}} = \varphi'_{t,0}(t,\mu), \quad \mu \ge 0, \quad I'_{t}(x,t,\mu)\big|_{x=L} = \varphi'_{t,L}(t,\mu), \quad \mu \le 0, \quad (29)$$

и интегрируя краевые условия (29) в общей схеме применения метода Рунге–Кутты. Это связано со структурой погрешности методов Рунге–Кутты [17,18].

Рассмотрим два варианта нахождения решения задачи (5), (2): решение только на основе уравнения переноса, т.е. классическим методом итераций источника (SIM – source iteration method), и в соответствии с HOLO алгоритмом. Результаты для порядков аппроксимации по времени и пространству представлены в табл. I-II. Из табл. II видно, что порядок аппроксимации по времени падает до второго при подключении к решению системы уравнений квазидиффузии. Это связано с тем, что краевые условия (18) мы не можем представить в виде условий типа (29) для производных по времени от искомых функций, которые необходимы для обеспечения третьего порядка сходимости по времени. В таблицах величина є определяет точность сходимости итераций по членам рассеяния на каждой стадии используемого метода Рунге-Кутты. Исследовалось либо сгущение сеток при фиксированном гиперболическом числе Куранта и тогда сходимость определяется членами наименьшего порядка аппроксимации, т.е. по времени, либо фиксировался малый временной шаг и измельчались сетки по пространству. В последнем случае исследовалась сходимость по пространственной переменной.

Таблица I. Погрешности численного решения и порядок сходимости по времени в методе итерации источника для теста. Сгущение сеток при фиксированном числе Куранта (слева), либо при фиксированном малом шаге по времени (справа).

N_x	$\Delta t / h = 2, \ \varepsilon = 10^{-12}$		
	$\lg(\ r\ _{C} / \ u_{ex}\ _{C})$	Порядок	
		схемы	
25	-6.20	2.95	
50	-7.09	2.97	
100	-7.99	2.97	
200	-8.91	2.89	
400	-9.79	2.36	
800	-10.54		

N _x	$\Delta t = 10^{-3}, N_t = 25, \epsilon = 10^{-12}$		
	$\lg(\ r\ _{C} / \ u_{ex}\ _{C})$	Порядок	
		схемы	
25	-8.51	3.97	
50	-9.71	3.58	
100	-10.78		





Рис.2. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при фиксированном гиперболическом числе Куранта *C*=2 для теста. Для сравнения проведена прямая с наклоном –2 (порядка аппроксимации по времени).

Как видно из представленных данных в табл. II, подключение системы LO уравнений (уравнений квазидиффузии) понижает порядок сходимости до второго по времени при использовании классической постановки краевых условий в виде (18), сохраняя четвертый порядок сходимости по пространству. Быстрое падение порядка сходимости в табл. II связано как с не слишком малым шагом по времени (и вторым порядком аппроксимации по этой переменной в силу данной постановки краевых условий), так и с тем, что константа погрешности по пространству мала (1/1512).

Таблица II. Погрешности численного решения и порядок сходимости по времени при использовании HOLO алгоритма для теста с краевыми условиями (18)–(19). Сгущение сеток при фиксированном числе Куранта (слева), либо при фиксированном малом шаге по времени (справа).

N _x	$\Delta t / h = 2, \ \varepsilon = 10^{-12}$		
	$\lg(\ r\ _C / \ u_{ex}\ _C)$	Порядок	
		схемы	
25	-4.74	1.96	
50	-5.33	1.93	
100	-5.93	1.96	
200	-6.53	1.98	
400	-7.13	1.99	
800	-7.73		

		/	
N _x	$\Delta t = 10^{-4.35}, \ N_t = 400, \ \varepsilon = 10^{-12}$		
	$\lg(\ r\ _{C} / \ u_{ex}\ _{C})$	Порядок	
		схемы	
25	-8.74	3.95	
50	-9.94	2.35	
100	-10.56		

16

Рассмотрим второй вариант (20) постановки граничных условий (табл.III). В этом случае мы отключим взаимодействие решения уравнения переноса и системы уравнений квазидиффузии через граничные условия (18), ожидая увеличения количества итераций, необходимого для достижения заданной точности по сравнению с HOLO алгоритмом без этой модификации.

Таблица III. Погрешности численного решения и порядок аппроксимации по времени для HOLO алгоритма при использовании краевых условий (20) для теста. Сгущение сеток при фиксированном числе Куранта (слева), либо при фиксированном малом шаге по времени (справа).

			· ·		
N _x	$\Delta t / h = 2, \ \varepsilon = 10^{-12}$		λ	$\Delta t = 10^{-4.35}, N_t = 400, \varepsilon = 10^{-100}$	
	$\lg(\ r\ _{C} / \ u_{ex}\ _{C})$	Порядок	IV _x	$\lg(\ r\ _{C} / \ u_{ex}\ _{C})$	Порядок
		схемы			схемы
25	-5.85	3.00	25	-8.74	3.99
50	-6.75	3.00	50	-9.95	4.03
100	-7.66	3.00	100	-11.16	2.50
200	-8.56	2.99	200	-11.92	
400	-9.46	2.93			
800	-10.34				
	$ \mathbf{g} \mathbf{r} _{C} / \mathbf{g} \mathbf{u}_{ex} _{C}$				
				<u> </u>	



Рис.3. Зависимость погрешности численного решения от числа узлов по пространству при фиксированном гиперболическом числе Куранта C=2 для теста. Для сравнения проведена прямая с наклоном –3 (порядка аппроксимации по времени).

Сравним эффективность алгоритмов метода итераций источника (SIM - 1) и два варианта HOLO алгоритма: с использованием классических краевых условий метода квазидиффузии с введением дробно-линейных функционалов (18) (HOLOcl - 2) и с постановкой краевых условий непосредственно интегрированием функции распределения (HOLOmod - 2), сравнив число итераций по всем шагам и по всем стадиям, необходимых для достижения заданной точности. Результаты представлены на рис.4.

 $\varepsilon = 10^{-12}$



Рис.4. Зависимость суммарного по всем стадиям и всем шагам по времени числа итераций, необходимых для достижения точности ε на каждой стадии каждого шага решения. N_x = 25, N_t = 25, Δt = 0.08. Закрашенные квадраты – метод итераций источника (SIM − 1), полузакрашенные треугольники – HOLOmod −2, полые круги – HOLOcl −2.

7. Заключение. Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации по пространству и третьего по времени для решения уравнения переноса и гиперболических систем уравнений были построены ранее в работах [9-16]. Для ускорения сходимости итераций по рассеянию могут быть использованы HOLO алгоритмы, в которых наряду с решением уравнения переноса решается система уравнений квазидиффузии. В работе построены бикомпактные полудискретные схемы для кинетических уравнений низкого порядка (уравнений квазидиффузии), имеющие четвертый порядок аппроксимации по пространству. По времени могут быть использованы различные методы интегрирования, в реализации наиболее удобен диагонально-неявный метод Рунге–Кутты третьего порядка аппроксимации, каждая стадия которого при реализации может быть сведена к неявному методу Эйлера. Использование классической постановки краевых условий для уравнений квазидиффузии введением дробно-линейных функционалов понижает реальный порядок сходимости до второго. Постановка краевых условий с использованием плотности излучения, вычисляемой по решению непосредственно уравнения переноса, сохраняет третий порядок сходимости, но ухудшает эффективность HOLO алгоритма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *M.L. Adams, E.W. Larsen.* Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // Progress in Nuclear Energy, 2002, v.40, №1, p.3–159.
- 2. L. Chacón, G. Chen, D.A. Knoll, C. Newman, H. Park et al. Multiscale high-order/loworder (HOLO) algorithms and applications // J. Comp. Phys., Feb. 2017, v.330, p.21–45.
- 3. W.A. Wiesequist, D.Y. Anistratov, J.E. Morel. A cell-local finite difference discretization of

the low order of the quasidiffusion equations for neutral particle transport on unstructured quadrilateral meshes // J. Comp. Phys., 2014, 273, 343–357.

- В.Я. Гольдин. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Ж. вычисл. матем. и матем. физики, 1964, т.4, №6, с.1078–1087; http://mi.mathnet.ru/rus/ zvmmf/v4/i6/p1078 http://mi.mathnet.ru/zvmmf7676 V.Ya. Gol'din. A quasi-diffusion method of solving the kinetic equation // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1964, v.4, №6, p.136–149; https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0041555364900850?via%3Dihub
- 5. В.Я. Гольдин. О математическом моделировании задач сплошной среды с неравновесным переносом // Современные проблемы математической физики и вычислительной математики. – М.: Наука, 1982, 340 с. V.Ya. Gol'din. O matematicheskom modelirovanii zadach sploshnoi sredy s neravnovesnum perenosom // Souramennue problemu matematicheskoi fiziki i uvabislitelnoi matema.

nym perenosom // Sovremennye problemy matematicheskoi fiziki i vychislitelnoi matematiki. – M.: Nauka, 1982, 340p.

- 6. *E.N. Aristova*. Simulation of radiation transport in channel on the basis of quasi-diffusion method // Transport Theory and Statistical Physics, 2008, v.37, №05-07, p.483–503.
- 7. *Е.Н. Аристова, Д.Ф. Байдин.* Экономичность методов квазидиффузии расчета критических параметров быстрого реактора // Мат. мод., 2012, т.24, (2012), № 4, с.129–136; http://mi.mathnet.ru/mm3264

E.N. Aristova, D.F. Baydin. Efficiency of Quasi_Diffusion Method for Calculating Critical Parameters of a Fast Reactor // Mathem. Mod. and Comp. Simul., 2012, v.4, №6, p.568–573. https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048212060026

8. *Е.Н. Аристова, Д.Ф. Байдин.* Реализация метода квазидиффузии для расчета критических параметров реактора на быстрых нейтронах в трехмерной гексагональной геометрии // Математическое моделирование, 2012, т.24, № 8, с.65–80; http://mi.mathnet.ru/mm3301

E.N. Aristova, D.F. Baydin. Implementation of the Quasi Diffusion Method for Calculating the Critical Parameters of a Fast Neutron Reactor in 3D Hexagonal Geometry // Mathematical Models and Computer Simulations, 2013, v.5, No2, p.145–155.

https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048213020026

- 9. *Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская.* Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // ДАН, 2011, т.436, №5, с. 600–605. *B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya.* Monotone Bicompact Schemes for a Linear Advection Equation // Doklady Mathematics, 2011, v.83, №1, p.121–125. https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562411010273
- 10. Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // Математическое моделирование, 2011, т.23, №6, с. 98-110. http://mi.mathnet.ru/mm3122 B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya. Monotonic bicompact schemes for linear transport equations // Mathematical Models and Computer Simulations, 2012, v.4, №1, p.92–100. https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048212010103
- 11. Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская. Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации для гиперболических уравнений // ДАН, 2010, т.430, №4, с.470-474. B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya. Fourth-Order Accurate Bicompact Schemes for Hyperbolic Equations // Doklady Mathematics, 2010, v.81, №1, p.146–150. https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562410010400
- 12. Б.В. Рогов, М.Н. Михайловская. О сходимости компактных разностных схем // Математическое моделирование, 2008, т.20, №1, с.99-116. http://mi.mathnet.ru/mm2141

B.V. Rogov, M.N. Mikhailovskaya. On the convergence of compact difference schemes // Mathematical Models and Computer Simulations, 2009, v.1, №1, p.91–104. https://link.springer.com/article/10.1134%2FS2070048209010104

- 13. А.В. Чикиткин, Б.В. Рогов, Е.Н. Аристова. Высокоточные бикомпактные схемы для многомерного неоднородного уравнения переноса и их эффективная параллельная реализация // ДАН, серия Математика, 2016, т.469, № 4, с.1-6; *A.V. Chikitkin, B.V. Rogov, E.N. Aristova.* High-Order Accurate Bicompact Schemes for Solving the Multidimensional Inhomogeneous Transport Equation and Their Efficient Parallel Implementation // Doklady Mathematics, 2016, v.94, №2, p.516–521.
- 14. М.Д. Брагин, Б.В. Рогов. Метод итерируемой приближенной факторизации операторов высокоточной бикомпактной схемы для систем многомерных неоднородных уравнений гиперболического типа // Доклады РАН, 2017, т.473, №3, с.263–267. *М.D. Bragin, B.V. Rogov.* Iterative Approximate Factorization for Difference Operators of High-Order Bicompact Schemes for Multidimensional Nonhomogeneous Hyperbolic Systems // Doklady Mathematics, 2017, v.95, №2, p.140–143. https://link.springer.com/article/10.1134/S1064562417020107
- 15. Е.Н. Аристова, Б.В. Рогов, А.В. Чикиткин. Оптимальная монотонизация высокоточной бикомпактной схемы для нестационарного многомерного уравнения переноса // ЖВМ и МФ, 2016, т.56, № 6, с.973–988; http://mi.mathnet.ru/zvmmf10399 *E.N. Aristova, B.V. Rogov, A.V. Chikitkin.* Optimal Monotonization of a High-Order Accurate Bicompact Scheme for the Nonstationary Multidimensional Transport Equation // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2016, v.56, №6, p.962–976. https://link.springer.com/article/10.1134%2FS0965542516060038
- 16. *Е.Н. Аристова, Б.В. Рогов.* О реализации граничных условий в бикомпактных схемах для линейного уравнения переноса // Математ. моделир., 2012, т.24, №10, с.3–14. http://mi.mathnet.ru/mm3316 *E.N. Aristova, B.V. Rogov.* Boundary conditions implementation in bicompact schemes for the linear transport equation // Mathem. Mod. and Comp. Simul., 2013, v.5, №3, p.199–208.

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

17. *Е.А. Альшина, Е.М. Закс, Н.Н. Калиткин.* Оптимальные параметры явных схем Рунге-Кутты невысоких порядков // Математ. моделирование, 2006, т.18, №2, с.61–71; http://mi.mathnet.ru/mm100

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

- Е.А. Альшина, Е.М. Закс, Н.Н. Калиткин. Оптимальные схемы Рунге-Кутты с первого по шестой порядок точности // ЖВМ и МФ, 2008, т.48, №3, с.418-429; http://mi.mathnet.ru/zvmmf167
 Е.А. Alshina, E.M. Zaks, N.N. Kalitkin. Optimal first- to sixth-order accurate Runge-Kutta schemes // Computational Mathem. and Mathem. Physics, 2008, v.48, №3, p.395–405.
- 19. Е.Н. Аристова, Н.И. Караваева. Бикомпактные схемы высокого порядка аппроксимации для уравнений квазидиффузии // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, 2018, №45, 28 с.

E.N. Aristova, N.I. Karavaeva. Bicompact Higt Order Schemes for Quasi-Diffusion Equations // Preprint Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, 2018, №45, 28 p. http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-45

Поступила в редакцию 11.03.2019 После доработки 11.03.2019 Принята к публикации 08.04.2019

20