

577
с 40
МФМ

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

А. М. Сироткин



**ФАКУЛЬТЕТ
ТЕХНИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ**

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА
НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ**

Москва 1989

577
640

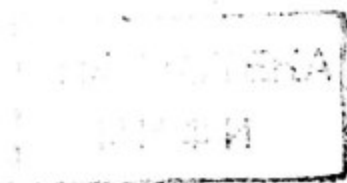
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР
ПО НАРОДНОМУ ОБРАЗОВАНИЮ

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

А.М. Сироткин

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА
НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ

*Утверждено
редсоветом института
в качестве учебного пособия*



Москва 1989

С и р о т к и н А.М. Численные методы расчета нейтронных полей: Учебное пособие. М.: МИФИ, 1989. — 72 с.

Дается классификация численных методов решения различных форм уравнения переноса нейтронов, рассматриваются итерационные методы решения однородных и неоднородных уравнений, достаточно подробно изложены вопросы перехода от дифференциальной формы диффузионного уравнения в двумерной геометрии к его векторно-матричному аналогу и два наиболее популярных итерационных метода его решения — метод переменных направлений и метод верхней релаксации.

©

Московский
инженерно-физический
институт, 1989 г.

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ РАСЧЕТА НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ

1.1. Введение

Прежде всего уточним, что под термином "нейтронное поле" будем подразумевать не физическую реальность — наличие нейтронов в заданном объеме, а их количественную характеристику. Например, можно говорить о полях распределения плотности потока или плотности тока нейтронов, имея в виду либо дифференциальную либо интегральную или глобальную их величину [1]. Таким образом, в общем случае поле нейтронов φ есть количество нейтронов с определенными характеристиками в заданной точке и единичном объеме фазового пространства в данный момент времени. Определение нейтронных полей является основой расчета и конструирования ядерных энергетических установок (ЯЭУ), так как именно нейтронные поля определяют поля энерговыделения, а следовательно, и температурные распределения. Нейтронные поля обуславливают поля гамма-квантов, а их совокупность определяет радиационное изменение свойств конструкционных материалов и прочностные характеристики ЯЭУ, наконец, ими в первую очередь обуславливаются динамические характеристики и прежде всего безопасность ЯЭУ.

Вместе с тем, расчет нейтронных полей является и наиболее сложной составляющей в расчетах ЯЭУ. Объясняется это не столько сложностью различных форм уравнения переноса нейтронов, определяющих φ как решение (скорее наоборот, внешне эти уравнения достаточно просты), сколько большей размерностью фазового пространства переменных, от которых зависит решение.

Действительно, фазовое пространство включает положение нейтрона — его пространственную координату \vec{r} , направление полета нейтрона $\vec{\Omega}$, энергию нейтрона E , временную координату t . Таким образом, $\varphi = \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$. Учитывая, что практически всегда от векторных переменных переходят к их проекциям, например: $\varphi = \varphi(x, y, z, \Omega_x, \Omega_y, E, t)$, получаем, что размерность фазового пространства равна семи. Правда, сама по себе большая размерность еще не предопределяет величину вычислительных затрат при численном решении задач математической физики. Важно знать, как ведет себя решение, в данном случае — решение уравнения переноса, по каждой координате, т.е. насколько просты или, наоборот, сложны функции-проекции решения.

Чтобы оценить хотя бы порядок вычислительных затрат, а заодно и объем требуемой памяти при определении φ , возьмем за основу конечно-разностный аналог уравнения переноса во всем объеме фазового простран-

ва. Дело в том, что метод сеток, основанный на таком аналоге, является в настоящее время, пожалуй, наиболее обоснованным и, вместе с тем, наиболее распространенным численным методом решения различных форм уравнения переноса нейтронов. Напомним, что непрерывная зависимость решения по каждой из координат фазового объема заменяется на дискретную в заданных точках — узлах, количество которых определяет точность решения.

Из накопленного богатого опыта расчета на ЭВМ задач ЯЭУ следует, что число узлов по каждой проекции пространственного вектора лежит в пределах 10—100, по угловым координатам — 2—40, по временной переменной — 1—100. Следует сказать, что временная координата (отвлекаясь от рассмотрения ядерных взрывов) выступает в качестве двух независимых переменных, если иметь в виду как быстротекающие процессы — динамику установки, так и медленно изменяющиеся — изменение нуклидного состава. В первом случае масштаб времени определяется секундами и их долями, во втором — часами и сутками. Ясно, что при одновременном рассмотрении этих процессов потребуется невообразимое количество узлов по временной координате. К счастью, для задач расчета ЯЭУ практически всегда требуется что-то одно, и количество узлов резко сокращается.

Наиболее сложно зависит φ от энергии. Объясняется это просто: ведь коэффициенты уравнения переноса непосредственно определяются сечениями взаимодействия нейтронов с ядрами среды, а характер взаимодействия часто определяется резонансами [2], что означает изменение сечений иногда на несколько порядков на весьма небольших (по сравнению с общим диапазоном изменения энергетической переменной — от 0,025 до $1,5 \cdot 10^7$ эВ) энергетических интервалах. Также на несколько порядков может меняться и величина φ . Учитывая, что число резонансов может достигать сотен даже для одного нуклида, а состав среды обычно бывает достаточно сложным, ясна необходимость введения до 10^6 узлов конечно-разностной сетки только по энергетической координате. Таким образом, общее число узлов для некоторого "среднего" варианта оказывается равным $50^3 \times 10^2 \times 10 \times 10^5 = 10^{13}$, т.е. размерность N вектора конечно-разностного представления $\vec{\varphi}$ равна 10^{13} . Ясно, что для того, чтобы просто хранить такой вектор, не хватит памяти не только современных ЭВМ (оперативная память ЭВМ ЕС-1060 порядка 10^7 байт, а долговременная на магнитных носителях порядка 10^9), но и ЭВМ ближайших поколений.

Для оценки требуемых временных затрат полезно знать, что количество операций, необходимое для решения системы линейных алгебраических уравнений порядка N , пропорционально N^3 , причем коэффициент пропорциональности имеет величину порядка 10. Эта же самая оценка справедлива и для вычисления матрицы порядка N , обратной к заданной (в нашем случае матрицы, соответствующей конечно-разностному представлению уравнения переноса). Следовательно, для вычисления вектора $\vec{\varphi}$ понадобится

выполнить 10^{10} элементарных действий. Учитывая, что быстродействие проектируемых ЭВМ оценивается не выше 10^{10} флопов (флоп — одна операция в секунду), даже в отдаленном будущем вряд ли такая задача будет им по силам. Значит ли это, что поле нейтронов практически не может быть определено с заданной (высокой) точностью? Вовсе нет, это означает лишь, что задача определения нейтронного поля не может быть разрешена, что называется "в лоб", прямолинейно, не используя физические модели, учитывающие специфику конкретной задачи, без учета как общих закономерностей в поведении решения уравнения переноса нейтронов, так и ряда частных соотношений, характерных для рассматриваемой модели или процесса в ЯЭУ. С точки зрения конечно-разностного представления использование таких априорных знаний приводит к специальному виду матрицы \hat{L} , при котором число операций, требуемое для ее обращения уже не будет подчиняться закону N^3 , да и сама размерность вектора решения N может быть существенно снижена.

Сокращение размерности решения в первую очередь связано с переходом к так называемому групповому представлению решения, при котором вся энергетическая шкала разбивается на ряд достаточно крупных интервалов, и коэффициенты уравнения переноса усредняются внутри этих интервалов по априорно заданному или специально рассчитанному спектру — энергетической зависимости нейтронного поля. Такой прием позволяет снизить число узлов по энергетической переменной до нескольких десятков. Далее, часто бывает возможным учесть заранее и поведение нейтронного поля в зависимости от угловых координат вектора направления полета нейтронов (наиболее распространенный пример — использование диффузионного приближения). Наконец, чаще всего рассматриваются стационарные случаи, т.е. фазовое пространство включает лишь положение нейтрона и его энергию. Число проекций пространственного вектора также во многих случаях удается снизить до двух. Но и в этом "усеченном" виде размерность вектора решения $\vec{\psi}$ остается достаточно большой, порядка 10^5 . Следовательно, и в этом случае сказанное выше относительно необходимости учитывать специфическую структуру матрицы конечно-разностного представления уравнения переноса остается в силе.

Приведенные примеры сокращения размерности вектора $\vec{\psi}$ основаны на таких наиболее распространенных приближениях, как стационарное, многогрупповое, диффузионное. В действительности таких приближений — моделей — может быть (и действительно применяется) гораздо больше. Объясняется это как большим разнообразием ЯЭУ, так и различными целями определения нейтронных полей. В свою очередь, приближенные математические модели допускают использование различных методов решения задач математической физики. Вот почему так велико разнообразие методов решения различных форм уравнения переноса нейтронов, разнообразия, которого, пожалуй, нет в методах решения никакого другого уравнения и ко-

торое практически перекрывает весь спектр численных методов решения уравнений математической физики, предназначенных для алгоритмической реализации на современных ЭВМ.

Здесь нелишне напомнить, что само появление ЭВМ было в значительной степени инициировано необходимостью решения задачи определения нейтронного поля, правда, не для расчета ЯЭУ, а для создания первой атомной бомбы!

1.2. Классификация методов решения уравнения переноса нейтронов

Любая классификация носит относительный, часто условный характер. Признаков отнесения того или иного метода к определенному классу может быть несколько. Прежде всего выделим два основных. Первый относится к изначальной постановке задачи. Так, процессы формирования нейтронного поля по своей физической природе носят сугубо вероятностный, статистический характер, т.е. принципиально заранее нельзя предсказать, что произойдет с нейтроном: провзаимодействует ли он с ядром или нет, а если провзаимодействует, то каков будет характер этого взаимодействия — захватится ли нейтрон ядром, вызовет ли деление ядра или рассеется и т.д. Можно говорить лишь о вероятности того или иного процесса. Но так как число нейтронов в ЯЭУ огромно, то нас интересует усредненный результат всех этих процессов. Этот результат можно получить двумя путями. Первый состоит в том, чтобы на основе балансных соотношений, учитывающих вероятностный характер процессов, получить уравнение для некоторого "усредненного" нейтрона, а точнее — для поля нейтронов, — что и будет, собственно, одной из форм уравнения переноса нейтронов. Далее, любые численные методы будут относиться уже не непосредственно к моделированию реального физического процесса, а к сведению полученной математической модели к более простым.

Второй путь — это моделирование поведения каждого отдельного нейтрона или группы нейтронов и на основе такого моделирования, по самой своей природе носящего случайный, статистический характер, получить информацию о поле нейтронов. Методы, реализующие этот второй путь, относятся к классу статистических методов и представителями этого класса являются в первую очередь метод Монте-Карло и метод вероятности первых столкновений. Все остальные методы можно отнести к классу детерминистических.

Следующим столь же обобщающим признаком подразделения методов на классы является принципиальный подход к получению решения: либо это путь последовательных приближений, позволяющий в конце концов получить решение с любой наперед заданной точностью, либо решение получается сразу, минуя стадию последовательных уточнений. В первом случае говорят о классе итерационных методов, во втором — о классе прямых методов.

Наконец, подразделение методов на более узкие классы может осуществляться по следующим двум признакам. Либо по способу сведения ис-

ходного уравнения переноса к более простым формам, либо по ограничениям, накладываемым на вид решения, на способ его представления. Эти признаки часто не являются независимыми, так как вид решения иногда предопределяет и способ сведения уравнения переноса к более простому или простым уравнениям и наоборот. Рассмотрим более подробно основные классы методов, используемых в практике расчета нейтронных полей.

1. *Класс сеточных методов.* Основой сеточных методов является разбиение области определения задачи — фазового пространства с помощью координатных линий, параллельных осям координат на элементарные ячейки. Для двумерного случая такое разбиение внешне аналогично наложению на область определения задачи сети, отсюда и произошло название. Точки пересечения линий называются *узлами сетки*. Исходная задача определения нейтронного поля как непрерывной функции от координат фазового пространства заменяется теперь на поиск вектора $\vec{\psi}$, элементы которого суть решение в узлах конечно-разностной сетки. Если в операторной форме уравнение переноса записано в виде

$$M\vec{\psi} = Q, \quad (1.1)$$

где M — дифференциальный или интегродифференциальный оператор одной из форм уравнения переноса нейтронов, то для вектора $\vec{\psi}$ векторно-матричное уравнение

$$\hat{M}\vec{\psi} = Q \quad (1.2)$$

есть результат интегрирования уравнения (1.1) по каждой из элементарных ячеек, содержащих координатный узел. В основе сеточных методов, таким образом, лежат два признака: дискретное представление решения и переход от исходного уравнения к его векторно-матричному аналогу.

Отличие методов, относящихся к данному классу, друг от друга определяется способом введения координатной сетки, тем приближениями, которые были использованы при интегрировании исходного уравнения, а самое главное тем, какой метод был выбран для решения системы векторно-матричных уравнений. Для небольшой размерности системы могут использоваться прямые методы, однако в основном это итерационные методы, основанные на специальном, чаще всего ленточном, виде матриц.

2. *Класс вариационных методов.* Отправным пунктом здесь является вариационная постановка задачи. Суть ее в том, что проблема решения уравнения переноса нейтронов заменяется проблемой поиска минимального или максимального, а в общем случае стационарного значения некоторого функционала, такого, для которого уравнением Эйлера является исходное уравнение переноса. Если стационарное значение ищется на классе функций из области определения оператора уравнения переноса без дополнительных ограничений, то эти две проблемы эквивалентны. Однако любое ограничение

класса функций приводит к приближенным, но более простым аналогам уравнения переноса. Поэтому вторым моментом в вариационной формулировке исходной задачи является выбор вида функций, точнее, выбор множества функций, на котором будет искомое решение. В зависимости от сделанного выбора вариационные методы можно разделить на три подкласса.

Прямые вариационные методы характеризуются следующим представлением решения:

$$\tilde{\varphi} = \sum_{i=1}^I a_i f_i(\vec{r}), \quad (1.3)$$

где $f_i(\vec{r})$ — система ортогональных базисных функций, а a_i — неизвестные коэффициенты, удовлетворяющие векторно-матричному уравнению

$$\hat{A} \vec{a} = \vec{Q}, \quad (1.4)$$

где элементы вектора \vec{a} есть коэффициенты a_i . Чаще всего векторно-матричный оператор (матрица \hat{A}) и вектор правой части \vec{Q} уравнения (1.4) являются результатом интегрирования с некоторыми весами $f_k^+(\vec{r})$ ($k=1, 2, \dots, I$) исходного оператора M и правой части Q уравнения (1.1) по всем переменным фазового пространства \vec{r} во всем диапазоне их изменения для данной задачи. Важно подчеркнуть, что в отличие от дискретного представления решения в сеточных методах степень гладкости решения $\tilde{\varphi}(\vec{r})$ полностью определяется гладкостью базисных функций $f_i(\vec{r})$ единых на всей области определения задачи. Если на систему базисных функций наложено требование полноты в области определения оператора M , то

$$\lim_{I \rightarrow \infty} \tilde{\varphi}(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}). \quad (1.5)$$

Однако скорость сходимости в (1.5) может быть для реальных систем достаточно медленной, и часто требуется несколько десятков, а то и сотен членов ряда в представлении решения (1.3) для достижения приемлемой точности. Наиболее известными представителями этого класса методов являются метод Ритца и метод Галеркина (Бубнова — Галеркина).

Полупрямые вариационные методы определяются представлением решения в виде

$$\tilde{\varphi}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^I \psi_i(\vec{\eta}) \cdot f_i(\vec{\xi}), \quad (1.6)$$

где $\vec{r} = \vec{\eta} \cup \vec{\xi}$, а $f_i(\vec{\xi})$ имеет тот же смысл, что $f_i(\vec{r})$ — для прямых методов. Неизвестными здесь уже являются не коэффициенты, а система

функций $\varphi_i(\vec{\eta})$, определяемая на фазовом пространстве $\vec{\eta}$ меньшей размерности, чем \vec{r} . Ясно, что множество функций вида (1.6) более широкое, чем (1.3), и, следовательно, число членов ряда в представлении (1.6) при той же точности будет меньшим. Вектор функция $\vec{\psi}(\vec{\eta})$, элементами которой являются $\psi_i(\vec{\eta})$ удовлетворяет векторно-матричному операторному уравнению вида:

$$\hat{M}(\vec{\eta})\vec{\psi}(\vec{\eta}) = \vec{Q}(\vec{\eta}), \quad (1.7)$$

которое может являться следствием реализации условий стационарности некоторого функционала, но может быть получена на основе метода моментов, т.е. интегрированием исходного уравнения (1.1) с некоторыми весовыми функциями $f_k^+(\xi)$ и с представлением решения в виде (1.6). Сложность решения системы операторных, чаще всего дифференциальных, уравнений (1.7) по сравнению с решением системы (1.4) в прямых методах компенсируется существенно меньшей ее размерностью.

Типичным представителем этого класса методов является метод сферических гармоник решения газокинетического уравнения Больцмана.

Синтетические вариационные методы отличаются от полупрямых тем, что система функций в представлении решения (1.6) не задается априорно, а либо находится предварительно из решения упрощенных, но сходных задач, либо определяется непосредственно в процессе итерационного решения системы (1.7) и аналогичной системы для вектор-функции $\vec{f}(\xi)$:

$$\hat{M}(\xi) \cdot \vec{f}(\xi) = \vec{Q}(\xi). \quad (1.8)$$

Увеличение вычислительных затрат при этом компенсируется уменьшением размерности систем (1.7) и (1.8) из-за уменьшения числа членов ряда (1.6), так как система функций $f_i(\xi)$ не носит абстрактный характер как, например, полиномы Лежандра в P_N -методе, а отражает специфику конкретной рассматриваемой задачи.

3. *Класс вариационно-разностных методов.* Методы, относящиеся к этому классу, основаны на комбинации идей вариационных и сеточных методов. В качестве исходной выступает вариационная формулировка задачи, однако представление решения вида (1.3) или (1.6) используется не для всей области определения задачи, а независимо в каждой из подобластей, на которые разбивается фазовое пространство независимых переменных, что как раз и характерно для сеточных методов. Естественно, что независимость решений в различных подобластях относительна, так как необходимо учитывать связь решений, имеющих смысл нейтронных полей, относящихся к разным подобластям, в частности, непрерывность решения. В зависимости от того, как именно эти условия учитываются, например, исходя из наложения этих условий на базисные функции f_i или в специальном виде используемого функционала-лагранжиана, и от того, какая система

функций в представлениях (1.3) или (1.6) выбрана, формулируются конкретные методы этого класса. В последнее время получили широкое распространение метод конечных элементов (МКЭ) и метод граничных элементов (МГЭ). Наиболее эффективно использование этих методов в задачах с модульной структурой зон или в задачах с зонами неправильной формы, причем, как для решения диффузионного, так и газокинетического уравнений.

4. *Класс интегральных методов.* К этому классу отнесем, во-первых, методы, непосредственно использующие интегральную форму представления уравнения переноса нейтронов, и, во-вторых, методы, в которых само решение ищется в интегральной форме. К первым относятся метод вероятности первых столкновений и его модификации и метод поверхностных токов. К представителям второго направления можно отнести метод поверхностных псевдоисточников и метод интегральных преобразований (волновой метод).

Метод вероятности первых столкновений (ВПС) является наиболее популярным методом решения интегрального транспортного уравнения. Идея метода состоит в разбиении рассматриваемой области на однородные по характеристикам среды зоны и в предположении постоянства потока в каждой из них. Тогда исходное интегральное уравнение сводится к системе алгебраических уравнений относительно средних потоков в зонах с коэффициентами этих уравнений, имеющими смысл вероятности того, что нейтрон, испущенный в одной зоне, испытает следующее столкновение в другой. Часто вычисления ВПС в системах со сложной двумерной или трехмерной геометрией проводятся с помощью метода Монте-Карло. В таком случае метод ВПС может быть отнесен к статистическим, что еще раз подтверждает условный характер классификации методов.

Метод поверхностных токов (ПТ) так же, как и метод ВПС, предназначен для решения уравнения переноса нейтронов в его интегральной форме. Рассматриваемая система разбивается на большое число подсистем, в каждой из которых используется один из традиционных методов, например ВПС, после чего подсистемы связываются с соседними с помощью токов на границах раздела между подсистемами. Такое разбиение на малые подсистемы существенно экономит, по сравнению с методом ВПС, время вычисления вероятностей столкновений, поскольку в методе ПТ они связывают между собой области, находящиеся только в каждой подсистеме, тогда как в методе ВПС — все области исходной системы.

Метод поверхностных псевдоисточников также характеризуется разбиением многозонной области на зоны с постоянными сечениями, но задача нахождения решения в произвольной зоне l заменяется другой задачей, в которой вещество выделенной зоны распространяется на все пространство, а на поверхности этой зоны S вводятся фиктивные источники интенсивностью $q_S^n(\vec{r}_S, \vec{\Omega})$. Тогда решение этой задачи легко выражается через функцию

Грина уравнения переноса для однородной бесконечной среды с параметрами l -й зоны. Используя непрерывность величины $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ на границах раздела зон, получим систему интегральных уравнений относительно функций $g_S^l(\vec{r}_S, \vec{\Omega})$. Для численного решения системы интегральных уравнений поверхностные псевдоисточники разлагаются по подходящей системе функций.

Метод интегральных преобразований основан на представлении искомой функции распределения в виде трехмерного интеграла Фурье. В этом случае общее решение в виде обратного преобразования Фурье содержит произвольные функции, определяемые краевыми условиями. При использовании приближенных краевых условий произвольные функции разлагаются в ряд, и возникает система алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения.

5. Класс гетерогенных методов. В гетерогенных методах реактор на тепловых нейтронах рассматривается как система урановых блоков, помещенных в замедляющую нейтроны среду. Урановые блоки являются источниками быстрых нейтронов и стоками тепловых и резонансных нейтронов (первоначальное название гетерогенного подхода — метод источников-стоков).

В первом приближении гетерогенный подход основан на описании нейтронного поля во внешнем замедлителе между блоками суперпозицией полей отдельных блоков, установленных в узлах решетки гетерогенного реактора. Вначале гетерогенный метод использовался для решения диффузионно-возрастного уравнения в бесконечном замедлителе, содержащем произвольно расположенные нитевидные блоки, рассматриваемые как источники и стоки нейтронов. Затем теория модифицировалась для того, чтобы учесть конечность радиуса блоков, размера замедлителя, а также с целью замены диффузионно-возрастного приближения многогрупповой теорией. При этом первоначальная ориентация на получение аналитических решений для частного круга задач уступила место более общему разностному подходу к решению уравнений гетерогенного реактора, с помощью которого можно рассчитывать реакторы с несколькими тысячами блоков.

Гетерогенная теория развивалась и в направлении детального описания поля нейтронов в топливных элементах. В частности, рассматривались многозонные цилиндрические топливные блоки разных сортов, размещенные в периодической решетке. При этом поле внутри блоков и на их поверхности может предполагаться как азимутально-симметричным (монопольное приближение), так и с учетом азимутальной зависимости. Многообразие приближений и методов расчета поля нейтронов внутри блоков обуславливает большое число методов, относящихся к данному классу.

1.3. Виды итераций при решении различных форм уравнения переноса

Интегродифференциальное уравнение переноса нейтронов в операторном виде имеет одну из следующих форм: однородного уравнения

$$L\psi = S\psi + \frac{1}{\lambda} F\psi \quad (1.9)$$

или неоднородного уравнения

$$L\psi = S\psi + F\psi + q, \quad (1.10)$$

где $L \equiv \vec{\Omega} \nabla + \sum_{tot} (\vec{r}, E)$ — дифференциальный оператор, отвечающий за перенос нейтронов; S — интегральный оператор рассеяния нейтронов; F — интегральный оператор деления, а $q = q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ — внешние источники нейтронов, включающие как объемные, так и поверхностные члены; λ — собственное число однородного уравнения (1.9), причем лишь при $\lambda = \lambda_{\text{МАКС}}$ решение уравнения (1.9) всюду положительно и имеет физический смысл поля нейтронов; а $\lambda_{\text{МАКС}}$ часто обозначают $k_{\text{эф}}$, так как оно по физическому смыслу совпадает с эффективным коэффициентом размножения нейтронов.

Уравнение (1.9) может быть записано в виде

$$\lambda\psi = B\psi, \quad (1.11)$$

где $B = M^{-1} \cdot F$, $M = L - S$, а M^{-1} — оператор, обратный к M .

В общем случае не существует прямого, непосредственного метода решения однородного уравнения (1.11) или (1.9). Проиллюстрировать это утверждение можно следующим образом. Из приведенного в предыдущем разделе обзора-классификации методов численного решения уравнения переноса следует, что все детерминистические методы так или иначе сводят уравнение (1.9) к векторно-матричному виду, например:

$$\hat{L}\vec{\psi} = \hat{S}\vec{\psi} + \frac{1}{\lambda} \hat{F}\vec{\psi}, \quad (1.12)$$

где $\vec{\psi}$ — вектор порядка π , \hat{L} , \hat{S} , \hat{F} — матрицы того же порядка, или в обозначениях (1.11),

$$\lambda\vec{\psi} = \hat{B}\vec{\psi}. \quad (1.13)$$

Известно, что нахождение собственных чисел λ матрицы \hat{B} сводится к поиску корней характеристического уравнения, т.е. корней алгебраического уравнения порядка π . Но при $\pi > 4$ в общем случае уравнение в рациональных функциях не разрешимо (Абель, 1826 г.). Иными словами, численно решить уравнение (1.13) можно лишь методом последовательных приближений — методом итераций. Итерационный процесс решения уравнения (1.9) обычно записывают в следующем виде:

$$M\psi^t = Q^t; \quad (1.14)$$

$$Q^t = F \varphi^{t-1}, \quad (1.15)$$

где φ^0 — произвольное начальное распределение, а выражение (1.14) рассматривается как уравнение относительно φ^t при известном φ^{t-1} , t — номер итерации. Можно показать [3], что итерационный процесс (1.14) сходится и

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi^t = \varphi, \quad \text{а} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \|Q^t\| / \|Q^{t-1}\| = k_{эф}$$

Физически итерации (1.14) означают поиск распределения нейтронов φ^t , отвечающего источнику деления Q^t , полученному на предыдущем распределении φ^{t-1} , и поэтому итерационный процесс (1.14) называют итерациями по источнику деления или итерациями смены поколений нейтронов.

Аналогичный итерационный процесс применим и для решения уравнения (1.10), но выражение (1.15) для Q^t примет вид:

$$Q^t = F \varphi^{t-1} + q \quad \text{при этом} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \varphi^t = \varphi$$

Смысл поиска решения уравнения (1.10) с помощью итерационного процесса (1.14) состоит в том, что обращение оператора M , необходимое для определения φ^t из выражения (1.14), часто оказывается проще непосредственного решения уравнения (1.10).

Тем не менее, и решение уравнения (1.14) относительно φ^t представляет собой далеко не простую задачу, сложность которой обуславливается прежде всего одновременным присутствием в M дифференциального и интегрального операторов. Поэтому и уравнение (1.14) при фиксированном индексе t часто также решается методом последовательных приближений:

$$L \varphi^{t,s} = Q^{t,s}; \quad \text{где} \quad Q^{t,s} = S \varphi^{t,s-1} + Q^t \quad (1.16)$$

Здесь S — номер итерации, $\varphi^{t,0}$ — произвольное начальное распределение. Итерационный процесс (1.16) на каждом шаге S рассматривается как решение уравнения относительно $\varphi^{t,s}$ при заданном распределении $\varphi^{t,s-1}$. Ясно, что обращение дифференциального оператора L , необходимое для решения уравнения (1.16) много проще обращения интегродифференциального оператора M в уравнении (1.14). Можно показать [3], что итерации (1.16) всегда сходятся к решению φ^t уравнения (1.14), т.е. $\lim_{s \rightarrow \infty} \varphi^{t,s} = \varphi^t$.

Физически итерационный процесс (1.16) означает поиск распределения нейтронов $\varphi^{t,s}$, отвечающего источнику деления Q^t и источнику рассеяния $S \varphi^{t,s-1}$, полученному на предыдущем распределении $\varphi^{t,s-1}$, поэтому итерационный процесс (1.16) называют итерациями по источнику или интегралу рассеяния. Подчеркнем, что итерационный процесс (1.16) должен

проводиться на каждой итерации t по источнику деления. По этой причине последние иногда называют *внешними итерациями*. Следует отметить, что итерации по интегралу рассеяния могут проводиться не только при решении газокинетического интегродифференциального уравнения переноса, но и, например, использоваться при решении многогрупповых уравнений диффузии в области термализации. Однако чаще всего при решении уравнения переноса в диффузионном приближении итерации по интегралу рассеяния не проводятся. Что касается итераций по источнику деления, то эти итерации характерны для решения уравнений (1.9) и (1.10) в любом приближении.

Остановимся теперь на решении уравнения (1.16). Запишем его, опуская индексы t и S :

$$L\psi = Q. \quad (1.17)$$

Здесь оператор L может рассматриваться либо как дифференциальная часть оператора переноса в газокинетическом приближении, либо как оператор диффузии. В любом случае прямое решение уравнения (1.17) представляет большие трудности, особенно в многомерной геометрии. Поэтому и для решения уравнения (1.17) с дифференциальным оператором L также часто применяют метод последовательных приближений. Для его применения используют тождественное преобразование уравнения (1.17) к виду

$$L_1\psi = L_2\psi + \tilde{Q}, \quad (1.18)$$

в котором обращение оператора L_1 должно быть достаточно просто, тогда итерационный процесс

$$\psi^i = L_1^{-1} L_2 \psi^{i-1} + L_1^{-1} \tilde{Q} \quad (1.19)$$

сходится к решению уравнений (1.17), (1.18) при условии $\|L_1^{-1} L_2\| < 1$. Ясно, что итерации (1.19) должны включаться как на каждом шаге итерационного процесса по источнику деления, так и на каждом шаге итераций по интегралу рассеяния (при наличии таких итераций). Поэтому итерации (1.19) называют *внутренними итерациями*. Таким образом, внутренние итерации служат для обращения дифференциальной части уравнения переноса нейтронов в любой его форме.

Наконец, рассмотрим итерации, обусловленные граничными условиями в ячейке. Этот специфический вид итераций возникает, как правило, при использовании сеточных методов решения газокинетического уравнения, например, в S_n -методе. Рассмотрим два типа ячеек. Для наглядности ограничимся плоскопараллельной геометрией. *Первый тип* — ячейка с условиями отражения на левой и правой границах:

$$\psi(x_L, \vec{\Omega}) = \psi(x_L, -\vec{\Omega}) \quad \text{и} \quad \psi(x_R, \vec{\Omega}) = \psi(x_R, -\vec{\Omega}).$$

Обозначим \vec{n} — единичный вектор, нормальный к внешней границе. Тогда итерационный процесс ведется следующим образом. По заданному граничному распределению $\varphi^{i-1}(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0$ рассчитывается $\varphi^i(x, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0$. Из условия $\varphi^i(x_n, -\vec{\Omega}) = \varphi^i(x_n, \vec{\Omega})$ расчи-

тывается граничное условие на правой границе для $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0$, и по нему определяется $\varphi^i(x, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0$, тогда $\varphi^i(x_n, \vec{\Omega}) = \varphi^i(x_n, -\vec{\Omega})$, и далее процесс повторяется, пока $|\varphi^i(x_n, \vec{\Omega})/\varphi^{i-1}(x_n, \vec{\Omega}) - 1| < \varepsilon$, где ε — заданная погрешность, а начальное распределение на границе $\varphi^0(x_n, \vec{\Omega})$ задается произвольно. *Второй тип* — ячейка с бесконечным повторением своей структуры слева и справа. Граничные условия записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varphi(x_n, \vec{\Omega}) &= \varphi(x_n, \vec{\Omega}) \quad \text{при} \quad (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0; \\ \varphi(x_n, \vec{\Omega}) &= \varphi(x_n, \vec{\Omega}) \quad \text{при} \quad (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Итерационный процесс поиска решения с удовлетворением условий (1.20) ведется следующим образом: по ранее рассчитанному $\varphi^{i-1}(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0$ определяется из решения уравнения переноса $\varphi^i(x, \vec{\Omega})$, тогда $\varphi^i(x_n, \vec{\Omega}) = \varphi^i(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0$. Аналогично, по заданному $\varphi^{i-1}(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0$ рассчитывается $\varphi^i(x, \vec{\Omega})$ и $\varphi^i(x_n, \vec{\Omega}) = \varphi^i(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0$. Итерационный процесс ведется до достижения заданной точности независимо для положительных и отрицательных направлений угла полета нейтронов. В качестве начальных распределений на левой и правой границах берутся произвольные распределения $\varphi^0(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) > 0$ и $\varphi^0(x_n, \vec{\Omega})$ при $(\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0$.

К рассмотренным итерационным процессам формально можно добавить и алгоритм расчета поля нейтронов в групповом приближении в области замедления без учета термализации. Если $\varphi^j(r, \vec{\Omega})$ есть распределение нейтронов в энергетической группе с номером j , то интеграл столкновений в уравнениях (1.9) и (1.10) можно разбить на две части:

$$S\varphi = S^j \varphi^j + \sum_{i=1}^{j-1} S^{i \rightarrow j} \varphi^i,$$

где диапазону с максимальной энергией соответствует индекс " $j=1$ ". Тогда, помечая индексом " j " дифференциальный оператор L^j , отвечающий за перенос нейтронов в этой группе, и обозначая $M^j = L^j - S^j$, заменим выражение (1.15) для Q^t следующим:

$$Q_{j,t}^t = F\varphi_{j,t}^{t-1} + \sum_{i=1}^{j-1} S^{i \rightarrow j} \varphi_i^i \quad (1.21)$$

Итерационный процесс (1.14) запишется в виде

$$M_j^j \varphi_{j,t}^t = Q_{j,t}^t \quad (1.22)$$

Формально выражение (1.22) можно рассматривать как итерационный процесс при фиксированном t , в том смысле, что $\varphi_{j,t}^t$ определяется через известные (ранее вычисленные) φ_i^i при $i < j$, однако фактически формулы (1.21), (1.22) представляют собой не алгоритм уточнения решения, а алгоритм последовательного определения $\varphi_{j,t}^t$, отвечающего различным групповым интервалам энергии.

Глава 2

СТЕПЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА В ОПЕРАТОРНОЙ ФОРМЕ

2.1. Степенной метод решения однородного уравнения

Из предыдущей главы следует, что однородное уравнение переноса нейтронов (1.9) может быть приведено к виду (1.11)

$$\lambda \psi = B\psi,$$

итерационный процесс решения которого (1.14), (1.15) дает возможность найти распределение поля нейтронов ψ и эффективный коэффициент размножения системы $k_{эф}$. Однако вид уравнения (1.11) совпадает с известной постановкой задачи на вычисление собственных функций и собственных значений оператора правой части уравнения. Причем к рассмотрению этой задачи приводит не только проблема определения нейтронов в условно-критическом реакторе, но и ряд итерационных методов решения неоднородных уравнений переноса нейтронов. В этом случае оператор правой части не совпадает с оператором B . Ниже мы рассмотрим итерационный алгоритм поиска собственных функций и собственных значений оператора, при наложении на него лишь некоторых достаточно общих ограничений, и оценим зависимость скорости сходимости такого процесса от физических размеров системы.

Итак, пусть задано однородное уравнение с некоторым линейным оператором L :

$$\lambda_n \varphi_n = L \varphi_n \quad (2.1)$$

Напомним, что линейность оператора означает, что для произвольных φ_1 и φ_2 из области определения оператора и для произвольных констант c_1 и c_2 : $L(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1L\varphi_1 + c_2L\varphi_2$. Заметим, что нелинейные задачи теории переноса нейтронов так или иначе сводятся к линейным. Кроме того, потребуем, чтобы собственные значения оператора L были дискретны и действительны, а система собственных функций оператора была полна, т.е. любая функция из области определения оператора L представима разложением в ряд Фурье по собственным функциям φ_n . Такими свойствами, например, обладает оператор диффузии. Покажем, что итерационный процесс

$$\psi^t = L \psi^{t-1} \quad (2.2)$$

сходится к собственной функции φ_0 , отвечающей максимальному по модулю собственному числу λ_0 ($|\lambda_0| > |\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots$). Представим произвольное начальное распределение ψ^0 рядом Фурье:

$$\psi^0 = \sum_{i=0} a_i \varphi_i \quad (2.3)$$

Тогда

$$\psi^1 = L \psi^0 = L \sum_{i=0} a_i \varphi_i = \sum_{i=0} a_i L \varphi_i = \sum_{i=0} a_i \lambda_i \varphi_i ;$$

$$\psi^t = \sum_{i=0} a_i (\lambda_i)^t \varphi_i \quad (2.4)$$

Разделим обе части равенства (2.4) на $(\lambda_0)^t$ и выделим в правой части три слагаемых:

$$\psi^t / (\lambda_0)^t = a_0 \varphi_0 + a_1 (\lambda_1 / \lambda_0)^t \varphi_1 + \sum_{i=2} (\lambda_i / \lambda_0)^t a_i \varphi_i \quad (2.5)$$

Переходя в выражении (2.5) к пределу при $t \rightarrow \infty$, получаем

$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\psi^t}{(\lambda_0)^t} = a_0 \varphi_0$, так как при $t > 1$ $|\frac{\lambda_i}{\lambda_0}| < 1$, то $\lim_{t \rightarrow \infty} (\frac{\lambda_i}{\lambda_0})^t = 0$,

т.е. $\lim_{t \rightarrow \infty} \psi^t = (\lambda_0)^t a_0 \varphi_0$.

Так как собственные функции определены с точностью до постоянного множителя, то утверждение о сходимости итерационного процесса (2.2) к собственной функции, отвечающей максимальному по модулю собственному числу, доказано. Ясно также, что

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\|\psi^t\|}{\|\psi^{t-1}\|} = \lambda_0 \quad (2.6)$$

В то же время скорость сходимости определяется вторым слагаемым в выражении (2.5). Действительно, при $t \gg 1$, считая собственные функции нормированными на единицу, получаем

$$\left| \frac{\|\psi^t\|}{\|a_0 \varphi_0\| \cdot \lambda_0^t} - 1 \right| \approx \frac{a_1}{a_0} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^t \quad (2.7)$$

Практическое использование алгоритма (2.2) не всегда приемливо, так как при $|\lambda_0| > 1$ $\|\psi^t\| \rightarrow \infty$, а при $|\lambda_0| < 1$ $\|\psi^t\| \rightarrow 0$, что при существенном отличии $|\lambda_0|$ от единицы может приводить к переполнению или машинному нулю в попытке практической реализации алгоритма (2.2) на ЭВМ. Поэтому обычно на каждом шаге итерационного процесса (2.2) проводят нормирование ψ^t . Так что итерационный процесс выглядит следующим образом: задаются начальные значения величин $\varepsilon, \lambda_0^0, \psi^0$ и $t=1$, далее: а) $\tilde{\psi}^t = L\psi^{t-1}$; б) $\lambda_0^t = \|\tilde{\psi}^t\|$; в) $\psi^t = \tilde{\psi}^t / \lambda_0^t$; г) $\delta = |\lambda_0^t / \lambda_0^{t-1} - 1|$; д) $\lambda_0^{t-1} = \lambda_0^t$; е) $t = t+1$; ж) при $\delta > \varepsilon$ уход на а), иначе — конец.

Поставим теперь задачу определить количество итераций T , необходимое для достижения заданной погрешности $\varepsilon = e^{-N}$, предполагая, что $a_1/a_0 \sim 1$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^T < \varepsilon; \quad T \cdot \ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right) < \ln \varepsilon = -N; \\ T > -\frac{N}{\ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)}, \text{ предполагая } \frac{\lambda_1}{\lambda_0} = 1 - \delta_1, \text{ где } \delta_1 \ll 1, \\ T > \frac{N}{\delta_1}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

т.е. при $\lambda_0 \approx 1$ (критический реактор) число итераций T оказывается пропорциональным логарифму погрешности и обратно пропорциональным разности двух максимальных по модулю собственных чисел δ_1 . Проведенная нами оценка справедлива настолько, насколько оправдано ограничение в выражении (2.5) рассмотрением лишь двух слагаемых. Выкладки, аналогичные тем, что использованы выше, приводят к следующей оценке числа итераций T , когда вклад третьего слагаемого в выражении (2.5) по отношению ко второму слагаемому оказывается в пределах заданной погрешности:

$$T > \frac{N}{\delta_2}, \quad \text{где} \quad \delta_2 = 1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1}.$$

Таким образом, для априорной оценки количества итераций необходимо знать распределение собственных чисел оператора L или, по крайней мере, уметь проводить оценку такого распределения. Сделать это чисто качественно можно, не прибегая к сложным расчетам, а используя анализ распределения собственных чисел на модели однородного реактора без отражателя [4]. Рассмотрим три случая.

1. Реактор в виде бесконечной пластины толщиной H_3 , где H_3 — "экстраполированные" размеры реактора:

$$\lambda_n = \frac{k_\infty}{1 + \left(\frac{\pi L}{H_3}\right)^2 (2n+1)^2}; \quad (2.9)$$

при $n=0$: $\lambda_0 = k_{эф} = k_\infty / (1 + \alpha_0^2 L^2)$, где $\alpha_0^2 = \left(\frac{\pi}{H_3}\right)^2$ — геометрический параметр. Тогда

$$\delta_n = 1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} = \frac{8n}{\left(\frac{H_3}{\pi L}\right)^2 + (2n+1)^2}. \quad (2.10)$$

Пусть реактор критический, а $k_\infty < 1,25$, тогда физический размер реактора (число длин диффузии в H_3) $H_3/L \gtrsim 6$. При $H_3/L \approx 6$ (физически малый реактор) $\lambda_1 \approx 0,4$ и погрешность (2.7) с ростом числа итераций t очень быстро снижается. При $H_3/L \approx 20$ (физически небольшой реактор) $\lambda_1 \approx 0,8$ и для достижения той же точности, по сравнению с предыдущим случаем, требуется, вообще говоря, в четверо больше итераций. Наконец, при $H_3/L > 30$ (физически большой реактор) выражение (2.10) можно упростить:

$$\delta_n \approx 8n \left(\frac{\pi L}{H_3}\right)^2 < 0,08n. \quad (2.11)$$

Т.е. при небольших π в физически больших системах распределение собственных чисел с увеличением π становится относительно более разреженным, значит вклад в выражении (2.5) третьего слагаемого по сравнению со вторым уменьшается быстрее, чем коэффициент при первой гармонике по сравнению с коэффициентом при нулевой.

2. Реактор сферической формы с экстраполированным радиусом R_3 :

$$\lambda_\pi = \frac{k_\infty}{1 + \left(\frac{\pi L}{R_3}\right)^2 (\pi+1)^2}, \text{ здесь } \alpha_0^2 = \left(\frac{\pi}{R_3}\right)^2;$$

$$\delta_\pi = 1 - \frac{\lambda_\pi}{\lambda_{\pi-1}} = \frac{8\pi+4}{1 + \left(\frac{2R_3}{\pi L}\right)^2 (2\pi+2)^2} \quad (2.12)$$

При $2R_3/L \approx 12$ ($k_\infty \approx 1,25$) $\lambda_1 \approx 0,6$; при $2R_3/L \approx 20$ ($k_\infty \approx 1,1$) $\lambda_1 \approx 0,8$; при $2R_3/L \approx 30$ и небольших значениях π выражение (2.12) принимает вид,

$$\delta_\pi \approx \left(\frac{\pi L}{2R_3}\right)^2 (8\pi+4) < 0,08 (\pi+0,5).$$

Таким образом, распределения собственных чисел в плоском и сферическом реакторах довольно близки, и качественные оценки скорости сходимости, приведенные для плоского случая, справедливы и для сферического реактора.

3. Реактор в форме параллелепипеда со сторонами a, b, c (будем считать их экстраполированными размерами):

$$\lambda_\pi = \frac{k_\infty}{1 + \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (2k+1)^2 + \left(\frac{\pi}{b}\right)^2 (2l+1)^2 + \left(\frac{\pi}{c}\right)^2 (2m+1)^2\right]} \quad (2.13)$$

Здесь материальный параметр $\alpha_0^2 = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{b}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{c}\right)^2$, а номер собственного числа π (напомним, что нумерация ведется так, что $\lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 \dots$) зависит от трех независимых индексов k, l, m : $\pi = f(k, l, m)$. Пусть $a=b=c=H_3$, тогда

$$\lambda_\pi = \frac{k_\infty}{1 + \left(\frac{\pi L}{H_3}\right)^2 [(2k+1)^2 + (2l+1)^2 + (2m+1)^2]}$$

Множитель в квадратных скобках принимает в порядке возрастания следующие значения: 3, 11, 19, 27, 35, 43, 51, 59, 67, ... Видим, что, начиная с $\pi > 1$,

даже в этом простейшем случае распределения собственных чисел существенно отличается от распределения в сферическом или плоском реакторах. В том случае, когда размеры сторон параллелепипеда различны, вклад третьего слагаемого в выражении (2.5) по сравнению со вторым может уменьшаться гораздо медленнее, чем доля первой гармоники по сравнению с нулевой. Ни о какой прогрессирующей разреженности собственных чисел с ростом n нельзя говорить, более того, вполне возможны случаи, когда $\lambda_1 \approx \lambda_2$. Тем не менее, можно утверждать, что вклад третьего слагаемого уменьшается не медленнее, чем $(\lambda_1/\lambda_0)^t$, где t — номер итерации. И, следовательно, оценка числа итераций (2.8) по-прежнему остается справедливой. Интересно отметить, что если $a < b < c$, то $\lambda_0 = k_{эф}$ реактора в первую очередь зависит от наименьшего размера a , в то время как скорость сходимости итерационного процесса (2.2), зависящая от $\delta_1 = 1 - \lambda_1/\lambda_0$, определяется наибольшим размером c . Например, при $c \gg b \sim a$ и $\lambda_0 = 1$:

$$\delta_1 \approx \delta \left(\frac{\pi L}{c} \right)^2,$$

что совпадает с формулой (2.11) при $n=1$ и $c=H_2$.

2.2. Степенной метод решения неоднородного уравнения

Рассмотрим неоднородное уравнение, записанное в форме (1.17):

$$L\psi = Q.$$

Это уравнение можно тождественно преобразовать к виду

$$\psi = B\psi + f. \quad (2.14)$$

Оператор B и функция f зависят от способа преобразования уравнения к виду (2.14). Так, из сравнения с выражением (1.19), получаем $B = L_1^{-1}L_2$, $f = L_1^{-1}Q$. Способов преобразования может быть много: например, прибавим к обеим частям уравнения (1.17) функцию $A\psi$, где A — произвольный оператор, для которого существует обратный — A^{-1} , тогда $A\psi + L\psi = A\psi + Q$; $\psi = A^{-1}(A-L)\psi + A^{-1}Q$, так что в обозначениях (2.14) $B = A^{-1}(A-L)$ и $f = A^{-1}Q$. Но можно потребовать, чтобы существовал оператор, обратный к $(A+L)$, тогда $\psi = (A+L)^{-1}A\psi + (A+L)^{-1}Q$, в этом случае $B = (A+L)^{-1}A$ и $f = (A+L)^{-1}Q$. Теперь наложим на оператор B дополнительные три условия: B — линейный; система собственных функций оператора B полна; $|\lambda_0| < 1$. Как покажем в четвертой главе, эти условия в ряде случаев можно удовлетворить. Тогда итерационный процесс

$$\psi^t = B\psi^{t-1} + f \quad (2.15)$$

сходится к решению уравнения (2.14), а следовательно, и к решению исходного уравнения (1.17), т.е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi^t = \varphi \quad (2.16)$$

при произвольном начальном распределении ψ^0 . Для доказательства этого утверждения представим ψ^0 и f разложением в ряд по собственным функциям оператора B :

$$\psi^0 = \sum_{i=0}^{\infty} b_i \varphi_i ; \quad (2.17)$$

$$f = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i , \quad (2.18)$$

где φ_i — собственные функции оператора B , т.е.

$$\lambda_i B \varphi_i = B \varphi_i . \quad (2.19)$$

Тогда:

$$\psi^1 = B\psi^0 + f = B \sum_{i=0}^{\infty} b_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i b_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i ;$$

$$\psi^2 = B\psi^1 + f = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 b_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i a_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i ;$$

.....

$$\psi^t = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^t b_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^{t-1} a_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^{t-2} a_i \varphi_i + \dots + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i .$$

Объединяя слагаемые в выражении для ψ^t , начиная со второго, в сумму, получаем:

$$\psi^t = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^t b_i \varphi_i + \sum_{k=0}^{t-1} \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^k a_i \varphi_i .$$

Меняя порядок суммирования,

$$\psi^t = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^t b_i \varphi_i + \sum_{i=0}^{\infty} a_i \varphi_i \sum_{k=0}^{t-1} \lambda_i^k .$$

Переходя к пределу при $t \rightarrow \infty$, видим, что первое слагаемое обращается в ноль, так как $|\lambda_i| < 1$ при всех i , а внутренняя сумма во втором слагаемом — сумма бесконечно убывающей геометрической прогрессии со знаменателем λ_i , так что

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi^t = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{a_i}{1-\lambda_i} \varphi_i . \quad (2.20)$$

После непосредственной подстановки выражения (2.20) в уравнение (2.14) и с учетом представления f разложением (2.18) убеждаемся, что оно обращается в тождество, т.е. утверждение (2.16) доказано.

Оценим теперь скорость сходимости итерационного процесса (2.15). Для этого из обеих частей уравнения (2.14) вычтем обе части равенства (2.15). Обозначая $\delta^t = \varphi - \psi^t$, получаем

$$\delta^t = B \delta^{t-1} . \quad (2.21)$$

Но выражение (2.21) соответствует итерационному процессу (2.2) для решения однородного уравнения (2.19). Используя представление (2.5) и ограничиваясь первым слагаемым, получаем

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \delta^t \cong (\lambda_0)^t b_0 \varphi_0 \rightarrow 0, \quad \text{т.е.} \quad \|\delta^t\| \approx b_0 |\lambda_0|^t .$$

Проводя выкладки, аналогичные использованным в предыдущем параграфе, оценим число итераций T , необходимое для достижения заданной погрешности $\varepsilon = e^{-N}$:

$$T > \frac{N}{1-|\lambda_0|} .$$

Таким образом, основная задача с точки зрения скорости сходимости итерационного процесса (2.15) состоит в том, чтобы при переходе от исходного

уравнения (1.17) к уравнению (2.14) получить оператор B с максимальным по модулю собственным числом, как можно меньшим единицы.

Итерационный процесс (2.15) можно модифицировать, используя следующий прием. Вычтем из обеих частей равенства (2.15), записанного для t -го шага итерационного процесса, обе части равенства, записанного для следующего шага. Обозначая разницу двух соседних итераций $\Delta^t = \psi^{t+1} - \psi^t$ (не путать с ошибкой δ^t), получим для Δ^t выражение, аналогичное выражению (2.21) или итерационному процессу (2.2):

$$\Delta^t \approx B \Delta^{t-1} \quad (2.22)$$

Следовательно,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta^t = \lambda_0^t c_0 \varphi_0 \rightarrow \lambda_0 \rightarrow \frac{\|\Delta^t\|}{\|\Delta^{t-1}\|} \quad (2.23)$$

Заметим, что $\sum_{k=0}^{t-1} \Delta^k = \psi^t - \psi^0$, т.е.

$$\psi^t = \psi^0 + \sum_{k=0}^{t-1} \Delta^k \quad (2.24)$$

В соответствии с этим, итерационный алгоритм поиска решения уравнения (2.14) можно построить следующим образом. Задается произвольное начальное распределение ψ^0 , рассчитывается ψ^1 :

$$\psi^1 = B\psi^0 + f,$$

вычисляется $\Delta^0 = \psi^1 - \psi^0$. Далее приближенное решение строится по формуле (2.24), где Δ^k определяются из итерационного процесса (2.22). При достаточно большом числе итераций, когда справедливо выражение (2.23), можно получить значительно более точное приближение к решению уравнению (2.14) по сравнению с ψ^t . Действительно,

$$\psi = \psi^\infty = \psi^t + \sum_{k=t}^{\infty} \Delta^k,$$

так как $\Delta^k \approx c_0 \lambda_0^k \varphi_0$, то $\sum_{k=t}^{\infty} \Delta^k = b_0 \varphi_0 \frac{\lambda_0^t}{1-\lambda_0} = \frac{\Delta^t}{1-\lambda_0}$,

тогда

$$\psi_{\text{итодч.}}^t = \psi^t + \frac{4^t}{1-\lambda_0} \quad (2.25)$$

где максимальное собственное число λ_0 оператора B определяется из выражения (2.23).

2.3. Организация итераций при определении высших гармоник однородного уравнения и в частном случае неоднородного уравнения

В первых параграфах настоящей главы мы рассматривали итерационный процесс (2.2) поиска собственной функции оператора L , отвечающей максимальному по модулю собственному числу λ_0 . Для оценки скорости сходимости такого процесса, как мы показали, необходимо знать, по крайней мере, следующее собственное число λ_1 . Однако для ускорения сходимости итераций (2.2) часто бывает нужным знать не только λ_i при $i \gg 1$, но и собственные функции оператора φ_i . Кроме того, собственные функции часто используются как базис для разложения решения неоднородного уравнения $L\varphi = Q$, а также в ряде других случаев. Ниже мы покажем, что итерационный процесс (2.2) можно использовать и для нахождения высших гармоник однородного уравнения (2.1). Действительно, если в качестве начального приближения ψ^0 выбрать такую функцию, что в ее разложении (2.3) $a_0 = 0$, то в представлении (2.4) для ψ^t нулевая гармоника также будет отсутствовать и выражение (2.5) примет вид

$$\frac{\psi^t}{(\lambda_1)^t} = a_1 \varphi_1 + a_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^t \varphi_2 + \sum_{i=3}^{\infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^t \varphi_i a_i \quad (2.26)$$

Следовательно, все последующие выкладки параграфа (2.1) будут справедливы с соответствующим изменением индексов на единицу:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\|\psi^t\|}{\|\psi^{t-1}\|} = \lambda_1 \quad (2.27)$$

$$\left| \frac{\|\psi^t\|}{\lambda_1^t \|\varphi_1\|} - 1 \right| \approx \frac{a_2}{a_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^t \quad (2.28)$$

Справедливо также и замечание относительно необходимости модификации алгоритма с тем, чтобы нормировать ψ^t на каждом шаге итерационного

процесса. Для количества итераций T , требуемого при достижении погрешности $\varepsilon = e^{-N}$, справедлива оценка (в предположении $a_2/a_1 \approx 1$):

$$T > \frac{N}{\delta_2}, \quad \text{где} \quad \delta_2 = 1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \ll 1.$$

Итак, задача сводится к тому, чтобы выбрать начальное приближение, не содержащее нулевой гармоники. Сделать это можно следующим образом. Пусть f^0 — произвольная функция, представимая рядом $\sum a_i \varphi_i$ и пусть оператор L — самосопряженный, т.е. $(u, Lv) \equiv (v, Lu) \stackrel{!}{=} 0$ для любых

пар функций u и v из области определения оператора. Здесь (f_1, f_2) обозначает скалярное произведение функций, т.е. интеграл от произведения функций по всей области их определения или обычное скалярное произведение векторов, если функции f_1 и f_2 — векторы. Свойством самосопряженности обладают многие операторы, например, оператор диффузии на классе функций, обращающихся в ноль на внешних границах. Для самосопряженных операторов собственные функции, отвечающие двум различным собственным значениям λ_l и λ_k ортогональны, т.е. $(\varphi_l, \varphi_k) = 0$ при $l \neq k$. Используя это свойство, покажем, что функция

$$\tilde{\psi}^0 = f^0 - (f^0, \varphi_0) \cdot \varphi_0 \quad (2.29)$$

не содержит в разложении (2.3) нулевой гармоники. Для этого умножим скалярно левую и правую часть выражения (2.29) на φ_0 и, считая φ_0 нормированной на единицу, т.е. $(\varphi_0, \varphi_0) = 1$, получим

$$(\tilde{\psi}^0, \varphi_0) = (f^0, \varphi_0) - (f^0, \varphi_0) \cdot (\varphi_0, \varphi_0) = 0, \quad (2.30)$$

т.е. $\tilde{\psi}^0$ ортогональна к φ_0 ; это и означает, что в разложении ее в ряд по φ_i не присутствует нулевая гармоника: $a_0 = 0$ (в противном случае при $(\psi^0, \varphi_0) = a_0 \neq 0$, что противоречит доказанному выше свойству ортогональности функций $\tilde{\psi}^0$ и φ_0). Заметим, что аналогично доказывается эквивалентность утверждений относительно ортогональности $\tilde{\psi}^0$ к φ_i и равенства нулю коэффициента разложения a_i при любом i .

При реализации итерационного процесса (2.2) на ЭВМ с начальным условием (2.29) в процессе вычислений возникают ошибки округления, которые накапливаются с ростом числа итераций и приводят к появлению коэффициента a_0 в разложении ψ^t и, следовательно, к возможности вновь вывести итерационный процесс на φ_0 . Чтобы этого не произошло, необходимо через определенное количество итераций (когда коэффициент при нулевой гармонике начнет возрастать) вновь проводить ортогонализацию по схеме (2.29), где в качестве f^0 выступает ψ^t .

Таким образом, для поиска φ_1 с помощью степенного метода (2.2) необходимо сначала найти φ_0 , затем для произвольной функции f^0 опре-

делить по формуле (2.29) начальное распределение $\tilde{\psi}^0$, отнормировать его: $\psi^0 = \tilde{\psi}^0 / \|\tilde{\psi}^0\|$ и затем вновь провести модифицированные (с нормированием) итерации (2.2) с периодической ортогонализацией ψ^t к ψ^0 .

Изложенный выше алгоритм, как нетрудно понять, может быть применен и для поиска φ_i при $i > 1$, если нам удастся найти начальное распределение ψ^0 , а в дальнейшем — поддерживать последующие ψ^t ортогональными не только к ψ^0 , но и ко всем φ_k при $k \leq i-1$. Сделать это нетрудно, если модифицировать выражение (2.29) следующим образом:

$$\tilde{\psi}^0 = f^0 - \sum_{k=0}^{i-1} (f^0, \varphi_k) \varphi_k \quad (2.31)$$

Умножив скалярно обе части, выражения (2.31) на φ_π при $\pi \leq i-1$, убеждаемся, что $(\tilde{\psi}^0, \varphi_\pi) = 0$. Следовательно, последовательно определяя в итерационном процессе $\varphi_0, \varphi_1, \dots$, проводя ортогонализацию (2.31) ко всем ранее найденным φ_k , можно получить собственную функцию φ_i с любым номером i .

Рассмотрим теперь проблему поиска собственных функций и собственных значений несамосопряженного оператора. В этом случае удается воспользоваться свойством биортогональности собственных функций исходного и сопряженного к L оператора (напомним, что оператор L^+ называется сопряженным к L , если для любых двух пар функций u и v из областей определения L^+ и L соответственно выполняется тождество $(u, L^+v) \equiv (v, L^+u)$). Пусть φ_k^+ удовлетворяет однородному уравнению

$$L^+ \varphi_k^+ = \lambda_k \varphi_k^+ \quad (2.32)$$

Тогда $(\varphi_i, \varphi_k^+) = 0$ при $i \neq k$. Если нормировать φ_k^+ таким образом, что $(\varphi_i, \varphi_i^+) = 1$, то распределение $\tilde{\psi}^0$, определяемое выражением

$$\tilde{\psi}^0 = f^0 - \sum_{k=0}^{i-1} (f^0, \varphi_k^+) \varphi_k^+ \quad (2.33)$$

оказывается ортогональным к φ_π^+ при $\pi \leq i-1$.

Действительно, умножая левую и правую части равенства (2.33) на φ_π^+ , получаем

$$(\tilde{\psi}^0, \varphi_\pi^+) = (f^0, \varphi_\pi^+) - \sum_{k=0}^{i-1} (f^0, \varphi_k^+) (\varphi_k, \varphi_\pi^+) = 0$$

при всех $\pi \leq i-1$, что и требовалось доказать.

Но ортогональность к ψ_n^+ означает, что в разложении (2.3) не содержится n -я гармоника, т.е. $a_n = 0$ (в противном случае $(\tilde{\psi}_i^0, \psi_n^+) = a_n \neq 0$, что противоречит доказанной ортогональности). Процесс отыскания собственных функций и значений несамосопряженного оператора с помощью итераций, степенного метода (2.2) оказывается вдвое более трудоемким, так как, чтобы воспользоваться формулой (2.33), необходимо находить не только все предыдущие гармоники ψ_k , но и ψ_k^+ , т.е. точно также параллельно решать проблему собственных функций оператора L^+ . При этом требуется и начальные распределения ψ_i^{+0} , и последующие распределения ψ_i^{+t} поддерживать ортогональными ко всем ранее найденным ψ_k с помощью следующей процедуры:

$$\tilde{\psi}_i^{+t} = f_i^t - \sum_{k=0}^{i-1} (f_i^t, \psi_k^+) \psi_k^+ \quad (2.34)$$

Используем теперь прием ортогонализации начального распределения к собственным функциям оператора для решения степенным методом неоднородного уравнения с $\lambda_0(B) = 1$, т.е. с нарушением одного из трех требований, наложенных на оператор B и обеспечивающих, как было показано в разделе 2.2, сходимость к решению итерационного процесса (2.15). Но при внимательном рассмотрении процесса сходимости итераций (2.15) следует, что если в начальном распределении (2.17) и разложении функции f (2.18) нулевая гармоника отсутствует, процесс (2.15) сойдется, только в разложении решения (2.20) не будет присутствовать член с $i=0$. Как сделать начальное распределение ортогональным к ψ_0^+ известно, а вот, чтобы в разложении f (2.18) $a_0 = 0$ от нас уже не зависит. Однако из альтернативы Фредгольма следует, что уравнение (2.14) тогда только и имеет решение, когда f ортогональна к ψ_0^+ , а следовательно, и не содержит ψ_0 .

Итак, для решения степенным методом этого частного случая неоднородного уравнения необходимо сначала найти (например, тем же степенным методом) собственные функции ψ_0 и ψ_0^+ операторов B и B^+ с $\lambda_0 = 1$. Затем следует воспользоваться формулой (2.33) с $i=1$ для получения начального распределения без нулевой гармоники и далее перейти к выполнению итерационного процесса (2.15), периодически проводя ортогонализацию ψ_i^t к ψ_0^+ по формуле (2.33) (для "чистки" ψ_i^t от ψ_0 , появляющейся в ψ_i^t из-за погрешности при проведении вычислений на ЭВМ). Заметим, что скорость сходимости итераций будет теперь определяться не разностью $1 - \lambda_0$, а следующим по модулю собственным числом оператора B : $\lambda_1(B)$. Так, что для оценки числа итераций, необходимых для достижения заданной погрешности $\varepsilon = e^{-N}$ будет справедливо соотношение $T > \frac{N}{1 - |\lambda_1|}$. Модифицированный итерационный процесс (2.22) также возможен при

условий ортогонализации Δ^t к φ_0^+ , но предельные соотношения (2.23) будут следующими:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta^t = \lambda_1^t c_0 \varphi_0 \quad \text{и} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\|\Delta^t\|}{\|\Delta^{t-1}\|} = \lambda_1(B).$$

Вместе с тем, и уточнение решения (2.25) примет вид:

$$\psi_{\text{уточ.}}^t = \psi^t + \frac{\Delta^t}{1 - |\lambda_1|}$$

В заключение следует отметить, что задачи с $\lambda_0(B) = 1$ вовсе не надуманы, а практически всегда возникают в теории малых возмущений при формулировке уравнений относительно эффективностей (ценностей) по отношению к каким-либо функционалам нейтронного поля.

Г л а в а 3

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИФфуЗИИ

3.1. Конечнo-разностные сетки и переход к системе алгебраических уравнений в конечно-разностном представлении двумерных уравнений диффузии

Как было показано в первой главе, итерационные методы решения уравнения переноса нейтронов позволяют от рассмотрения однородного уравнения (1.9) или неоднородного уравнения (1.10), записанных в общем виде, перейти к рассмотрению решения неоднородного уравнения вида

$$L\psi = Q, \quad (3.1)$$

где оператор L — одногрупповой дифференциальный оператор переноса, а правая часть Q включает как внешние источники нейтронов, так и источники деления и замедления нейтронов.

Ниже мы рассмотрим конечно-разностное преобразование уравнения (3.1), когда оператор L является оператором диффузионного приближения [5]

$$L\psi \equiv -\text{div grad } \psi + \Sigma \psi = Q, \quad (3.2)$$

определенный в двумерной области S с внешней границей Γ . Здесь $D = D(\vec{r})$; $\Sigma = \Sigma(\vec{r})$ — коэффициент диффузии и сечение увода из данной группы. Правую часть уравнения (3.2) будем считать известной.

На внешней границе Γ может быть задано условие

$$\psi(\vec{r})|_{\vec{r} \in \Gamma} = 0$$

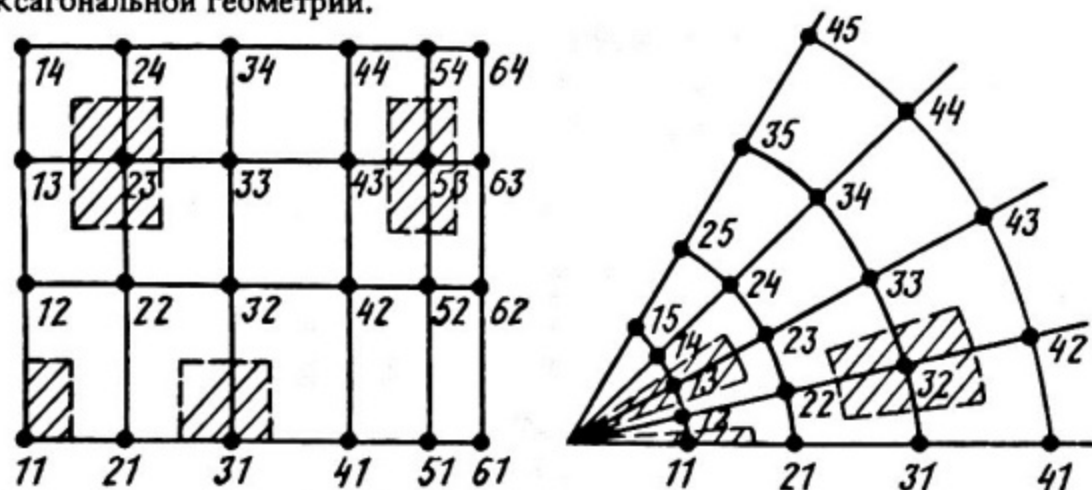
или условие вида

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} + \frac{\gamma}{2D} \psi = 0 \quad (3.3)$$

Здесь \vec{n} — направление внешней нормали к границе Γ в точке \vec{r} ; $\gamma = \gamma(\vec{r})$ — постоянная, определяющая тип граничного условия. При $\gamma = 0$ реализуется условие симметрии, при $\gamma = 1$ плотность потока \mathcal{J} обращается в нуль на экстраполированной границе. Предполагается, что область S состоит из конечного числа однородных подобластей (зон) $S_{\vec{n}}$ с границами $\Gamma_{\vec{n}}$.

При расчете конкретных систем реальные границы должны быть приближенно заменены такими $\Gamma_{\vec{n}}$ и Γ , чтобы они совпадали с координатными линиями выбранной системы. При расчете реактора чаще всего используются следующие координатные системы: декартова прямоугольная система (x, y) ; цилиндрическая (r, z) ; цилиндрическая (r, θ) ; косоугольные системы (гексагональная и треугольная). Из перечисленных систем лишь одна — (r, z) может описать реактор конечного объема, остальные системы предполагают, вообще говоря, идеализированный реактор в виде тела, бесконечного в направлении перпендикулярном к плоскости рассматриваемой системы координат. Конечность реактора обычно учитывается приближенно в виде члена, описывающего утечку нейтронов в этом направлении и включаемого в сечение Σ .

Рассмотрим сначала первые три из перечисленных координатных систем. В области S на координатных линиях нанесем систему точек или узлов (рис. 3.1 и 3.2). Узлы могут попадать или не попадать на границы раздела зон с различными физическими свойствами, и это определяет вид коэффициентов в граничных точках. Пусть для определенности границы раздела проходят через узлы сетки; другой случай будет рассмотрен для гексагональной геометрии.



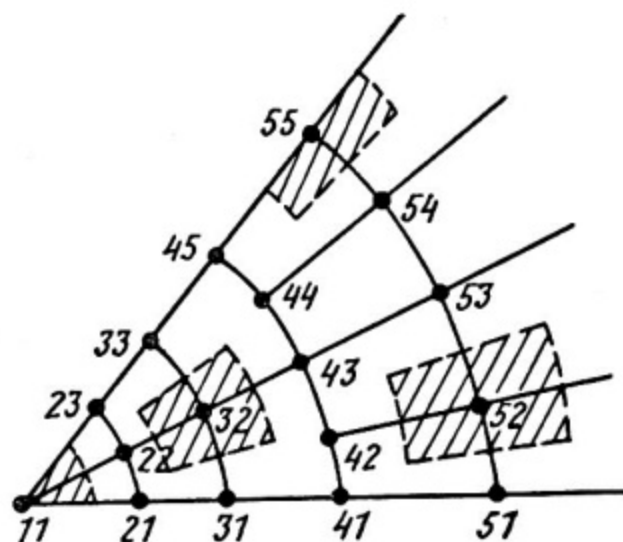
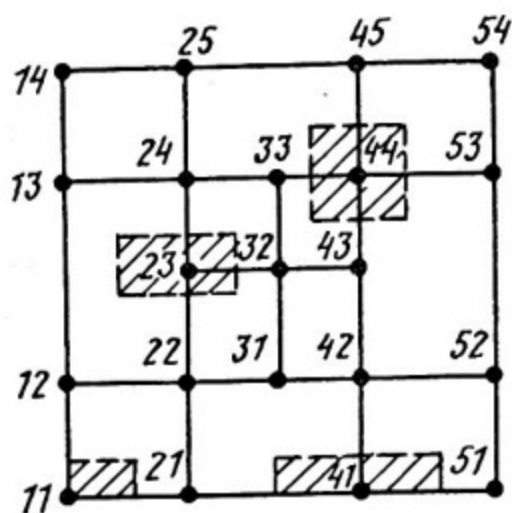


Рис. 3.2. Примеры сеток с локальным учащением:
 а — (x, y) -геометрия; б — (r, θ) -геометрия

Узлы, образующие конечно-разностную сетку, имеют двойную нумерацию: $i\bar{j}$ ($i = 1, 2, 3, \dots, I$; $j = 1, 2, 3, \dots, J$). Первый индекс обозначает номер ряда, в котором находится узел (счет начинается слева), второй — порядковый номер точки в ряду, считая снизу. Сетки, изображенные на рис. 3.1, характерны тем, что на каждой координатной линии расположено одинаковое число точек. Назовем такие сетки *простыми*. В ряде случаев целесообразно отказаться от этого правила. Так, почти всегда в реакторе имеются области, где распределение плотности потока нейтронов меняется существенно более резко, чем по реактору в целом. Значит для сохранения той же точности при выбранной интерполяции плотности потока между узлами расставлять их надо более часто. Кроме того, из рисунков видно, что в (r, θ) -геометрии с увеличением расстояния от центра сетка становится все более разреженной, так что здесь также следует увеличивать число узлов на дуге с ростом r . Сетки с разным числом точек на координатных линиях назовем сетками с локальным учащением (см. рис. 3.2, а, б). Расстояния между узлами (шаги) сетки должны выбираться в зависимости от резкости изменения нейтронного поля, однако накопленный опыт проведения расчетов в диффузионном приближении показывает, что в тех случаях, когда такое приближение справедливо, расстояние между узлами сетки δ должно быть меньше или сравнимо с длиной диффузии, т.е. $\delta \lesssim \sqrt{D/\Sigma}$.

Для перехода к конечно-разностному аналогу уравнения (3.2) разделим область S координатными линиями на части $\Delta S_{i\bar{j}}$ так, чтобы каждая точка $i\bar{j}$ попала внутрь элементарной ячейки интегрирования $\Delta S_{i\bar{j}}$. На рис. 3.1 и 3.2 некоторые характерные $\Delta S_{i\bar{j}}$ заштрихованы.

Уравнение (3.2) проинтегрируем по каждой ячейке ΔS_{ij}

$$-\iint_{\Delta S_{ij}} \operatorname{div}(\nabla \operatorname{grad} \varphi) dS + \iint_{\Delta S_{ij}} \Sigma \cdot \varphi dS = \iint_{\Delta S_{ij}} Q dS \quad (3.4)$$

Рассмотрим сначала случай, когда узел ij не принадлежит ни одной из четырех граничных координатных линий (рис. 3.3). Номера границ обозначены

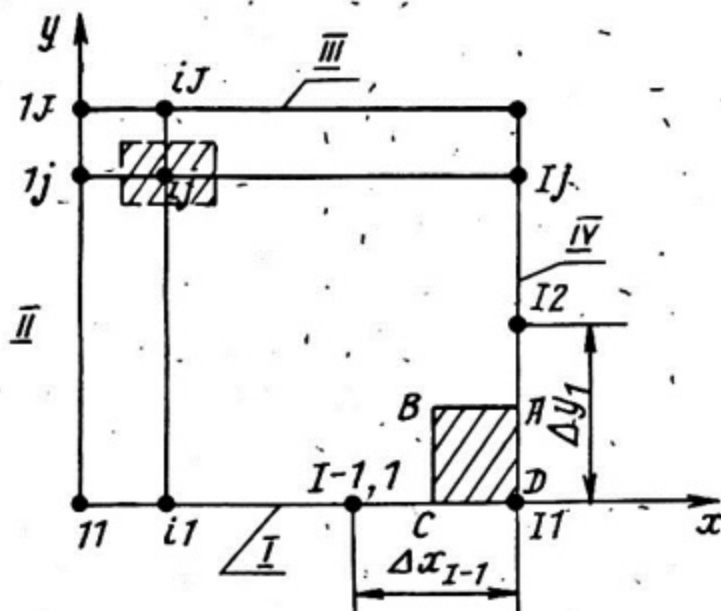


Рис. 3.3. Нумерация узлов и границ системы

римскими цифрами. Для приближенного вычисления интегралов, входящих в обе части уравнения, рассмотрим более подробно область интегрирования вокруг ij -го координатного узла (рис. 3.4). Ограничимся пока случаем простой сетки. В общем случае узел ij может оказаться на границе четырех физически различных зон. Пометим четверти ячейки интегрирования, принадлежащие разным зонам, индексами $k = a, b, c, d$, так что каждый из интегралов в (3.4) представим в виде суммы четырех интегралов по областям ΔS_{ij}^k :

$$\sum_k \left\{ -\iint_{\Delta S_{ij}^k} D \Delta \varphi dS + \iint_{\Delta S_{ij}^k} \Sigma \cdot \varphi dS - \iint_{\Delta S_{ij}^k} Q dS \right\} = 0.$$

Для вычисления второго и третьего интегралов воспользуемся приближенной формулой

$$\iint_{\Delta S_{ij}^k} g(x, y) dS \approx g(x_i, y_j) \cdot \Delta S_{ij}^k.$$

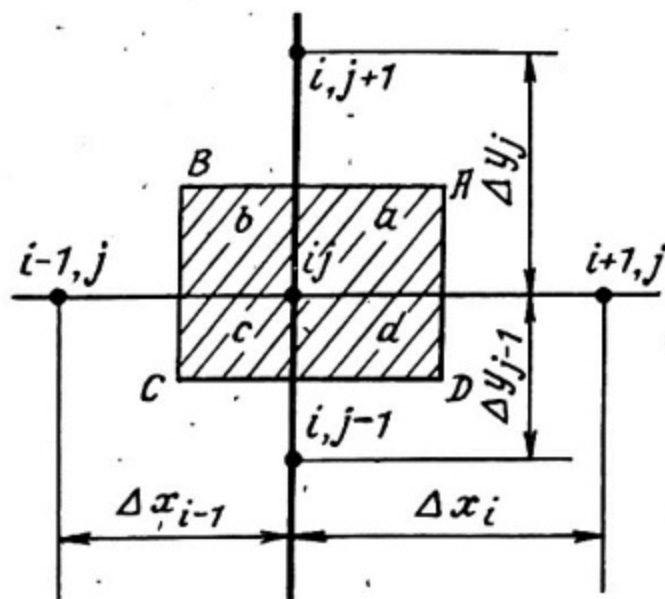


Рис. 3.4. Элементарная ячейка интегрирования

Первый интеграл преобразуем, используя теорему Грина:

$$\iint_{\Delta S_{ij}^k} D \Delta \varphi dS = D^k \int_{\sigma_{ij}^k} \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} d\sigma.$$

Здесь σ_{ij}^k — контур или поверхность, охватывающая область ΔS_{ij}^k ; $\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}}$ — производная по нормали к σ_{ij}^k , представленная с помощью конечных разностей. Для получения ее конкретного представления необходимо от общего вида уравнения (3.2) перейти к рассмотрению его в выбранных системах координат.

В декартовой и цилиндрической системах координат уравнение (3.2) имеет вид

$$\left[\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha D \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \beta \frac{1}{r^{2\alpha}} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) + (1-\beta) \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \right] + \Sigma \varphi = Q, \quad (3.5)$$

где при $\alpha=2$ — декартова система координат, а при $\alpha=1$ — цилиндрическая; $\beta=2$ в (x, y) - и (r, z) -геометриях и $\beta=1$ в (r, θ) -геометрии. В дальнейшем для сокращения записи шаг конечно-разностной сетки во всех трех геометриях будем обозначать Δx и Δy . Имея в виду, что в (r, z) -геометрии $\Delta x \equiv \Delta r$, $\Delta y \equiv \Delta z$, а в (r, θ) -геометрии $\Delta x \equiv \Delta r$, $\Delta y \equiv \Delta \theta$. В принятых обозначениях на каждой из границ элементарной ячейки AB , BC , CD и AD для производной по нормали примем следующие приближенные соотношения:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{AB} = \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}}{\Delta y_j}; \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{BC} = \frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ij}}{\Delta x_{i-1}}; \quad (3.6)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{CD} = \frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ij}}{\Delta y_{j-1}}; \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_{AD} = \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}}{\Delta x_i}.$$

Тогда для конечно-разностного аналога уравнения (3.5) получим следующий канонический вид:

$$a_{ij} \varphi_{i-1,j} + b_{ij} \varphi_{ij} + c_{ij} \varphi_{i+1,j} + d_{ij} \varphi_{i,j-1} + e_{ij} \varphi_{i,j+1} = q_{ij}, \quad (3.7)$$

где коэффициенты определяются соотношениями

$$\left\{ \begin{aligned} -a_{ij} &= \frac{D_b \Delta y_j + D_c \Delta y_{j-1}}{2 \Delta x_{i-1}} \left(r_{i-\frac{1}{2}} \right)^\alpha; & -c_{ij} &= \frac{D_a \Delta y_j + D_d \Delta y_{j-1}}{2 \Delta x_i} \left(r_{i+\frac{1}{2}} \right)^\alpha; \\ -d_{ij} &= \frac{D_d \Delta x_i + D_c \Delta x_{i-1}}{2 \Delta y_{j-1}} \left(\frac{1}{r_i} \right)^{2\beta-\alpha}; & -e_{ij} &= \frac{D_a \Delta x_i + D_b \Delta x_{i-1}}{2 \Delta y_j} \left(\frac{1}{r_i} \right)^{2\beta-\alpha}; \\ b_{ij} &= -(\alpha_{ij} + c_{ij} + d_{ij} + e_{ij}) + \rho_{ij}; \\ \rho_{ij} &= \frac{1}{4} (\sum_a \Delta x_i \Delta y_j + \sum_b \Delta x_{i-1} \Delta y_j + \sum_c \Delta x_{i-1} \Delta y_{j-1} + \sum_d \Delta x_i \Delta y_{j-1}) r_i^\alpha; \\ q_{ij} &= \frac{1}{4} (Q_a \Delta x_i \Delta y_j + Q_b \Delta x_{i-1} \Delta y_j + Q_c \Delta x_{i-1} \Delta y_{j-1} + Q_d \Delta x_i \Delta y_{j-1}) r_i^\alpha; \\ r_{i+\frac{1}{2}} &= r_i + \frac{\Delta x_i}{2}; & r_{i-\frac{1}{2}} &= r_i - \frac{\Delta x_{i-1}}{2}. \end{aligned} \right. \quad (3.8)$$

Хотя формально уравнение (3.7) справедливо для всех индексов ij , коэффициенты для индексов узлов, лежащих на границах, должны быть рассчитаны с учетом условия (3.3), т.е. выражения (3.6) для производных по нормальям к линиям, совпадающим с границами системы, заменяются следующими:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} \right|_r = -\frac{\gamma}{2D} \varphi_{ij}.$$

Тогда на границе I: $d_{i1} = 0$, на границе II: $a_{1j} = 0$, на границе III: $e_{iJ} = 0$ и на границе IV: $c_{iJ} = 0$. Для угловых точек равна нулю соответствующая пара коэффициентов. Значения остальных коэффициентов также изменяются. Так, для узла I7 (см. рис. 3.3) элементарной ячейкой интегрирования

является лишь одна четверть области, рассматриваемой для внутренних узлов. Интегрирование уравнения (3.4) по этой ячейке с учетом граничного условия (3.3) с соответствующими значениями γ_I^I и $\gamma^{\bar{I}}$, приводит к следующим выражениям для коэффициентов уравнения (3.7):

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{I1} = \frac{D_b \Delta y_1}{2 \Delta x_{I-1}} \cdot \left(\frac{r}{r_I - \frac{1}{2}} \right)^\alpha; \quad e_{I1} = \frac{D_b \Delta x_{I-1}}{2 \Delta y_1} \left(\frac{r}{r_I} \right)^{2\beta-\alpha}; \\ c_{I1} = d_{I1} = 0; \quad p_{I1} = \frac{1}{4} \left[\sum_b \Delta x_{I-1} \Delta y_1 + \gamma^{\bar{I}} \Delta y_1 + \gamma^I \Delta x_{I-1} \left(\frac{r}{r_I} \right)^\beta \right] \cdot r_I^\alpha; \\ q_{I1} = \frac{1}{4} (Q_b \Delta x_{I-1} \Delta y_1) r_I^\alpha. \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Аналогично рассчитываются коэффициенты и для других индексов узлов, лежащих на границах рассматриваемой системы. Отметим особенность (r, θ) -геометрии: не следует располагать узел при $r=0$.

Из вида коэффициентов (3.8) для внутренних точек следует, что $a_{i+1, j} = c_{ij}$ и $d_{i, j+1} = e_{ij}$. Здесь необходимо учитывать, что значения коэффициентов диффузии при переходе к следующему узлу, оставаясь по величине неизменными (границы физически различных зон по сделанному выше предположению не лежат между координатными линиями), формально меняют индекс четверти. Например, для узла $i+1, j$ коэффициенты D_b и D_c равны коэффициентам диффузии D_a и D_d для индекса ij .

Рассмотрим теперь конечно-разностное представление уравнения диффузии в косоугольной системе координат. Пусть реактор набран из шестигранных кассет. Расположим сначала координатные узлы в центрах

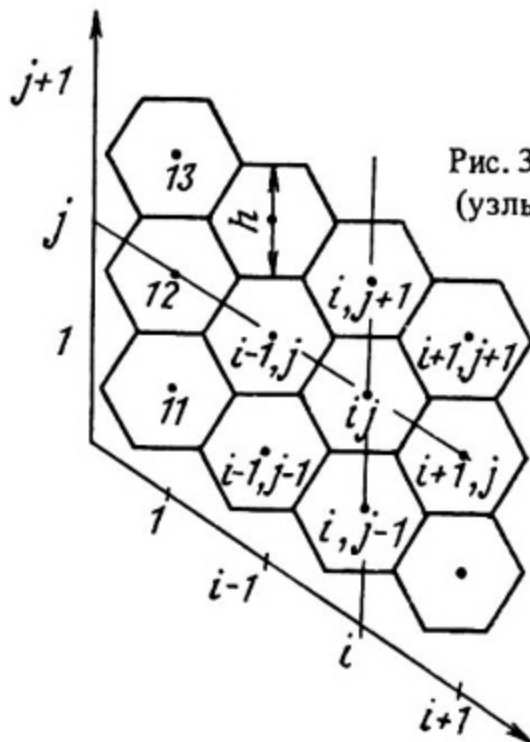


Рис. 3.5. Шестигранная ячейка (узлы в центрах кассет)

шестигранников (рис. 3.5), а для их нумерации используем координатные линии, расположенные вертикально и под углом 120° к вертикали. В этом случае элементарной ячейкой интегрирования будет являться сама шестигранная кассета. Из всех шестигранных сеток, используемых в настоящее время в практике расчетов реакторов, такая сетка является наиболее распространенной. Для аппроксимации производной по нормали к контуру интегрирования используемое ранее отношение разности плотности потока в соседних узлах к шагу сетки в данном случае оказывается слишком грубым, так как производная по нормали при различных свойствах соседних кассет может претерпевать разрыв. Для более корректной аппроксимации комплекса $D \frac{\partial \varphi}{\partial n}$ введем вспомогательные узлы на границах, например, для кассет с номерами ij и $i+1, j$ такой узел пометим индексами $i+\frac{1}{2}, j$. Тогда из условия непрерывности тока нейтронов $D_{ij}(\varphi_{i+\frac{1}{2}, j} - \varphi_{ij})/h = D_{i+1, j}(\varphi_{i+1, j} - \varphi_{i+\frac{1}{2}, j})/h$ выражаем $\varphi_{i+\frac{1}{2}, j}$ и, следовательно, $D \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_r = \frac{2(\varphi_{i+1, j} - \varphi_{ij})}{h(D_{ij}^{-1} + D_{i+1, j}^{-1})}$. Аналогично получаем соотношения для остальных границ. Ясно, что в этом случае окажутся связанными значения плотности потока нейтронов в семи соседних узлах, а не в пяти, как для прямоугольной сетки. Соответственно конечно-разностное представление уравнения диффузии будет иметь вид

$$\begin{aligned}
 & a_{ij} \varphi_{i-1, j} + b_{ij} \varphi_{ij} + c_{ij} \varphi_{i+1, j} + d_{ij} \varphi_{i, j-1} + e_{ij} \varphi_{i, j+1} + \\
 & + f_{ij} \varphi_{i-1, j-1} + g_{ij} \varphi_{i+1, j+1} = q_{ij} .
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Значения коэффициентов уравнения (3.10) для внутренних узлов с учетом выведенного выше соотношения для $D \frac{\partial \varphi}{\partial n}$ определяются следующими формулами:

$$\left. \begin{aligned}
 -a_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i-1, j}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; & -c_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i+1, j}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; \\
 -d_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i, j-1}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; & -e_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i, j+1}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; \\
 -f_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i-1, j-1}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; & -g_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{3}(D_{i+1, j+1}^{-1} + D_{ij}^{-1})} ; \\
 b_{ij} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{2} \Sigma_{ij} - (a_{ij} + c_{ij} + d_{ij} + e_{ij} + f_{ij} + g_{ij}) ; \\
 q_{ij} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{2} Q_{ij} .
 \end{aligned} \right\} \tag{3.11}$$

Значения коэффициентов с индексами кассет, лежащих на границе, определяются с учетом граничных условий (3.3) так же, как это было сделано для прямоугольной сетки. Недостатком рассмотренной схемы является однозначная зависимость шага сетки h от размера кассеты, что для больших кассет может привести к слишком грубой сетке.

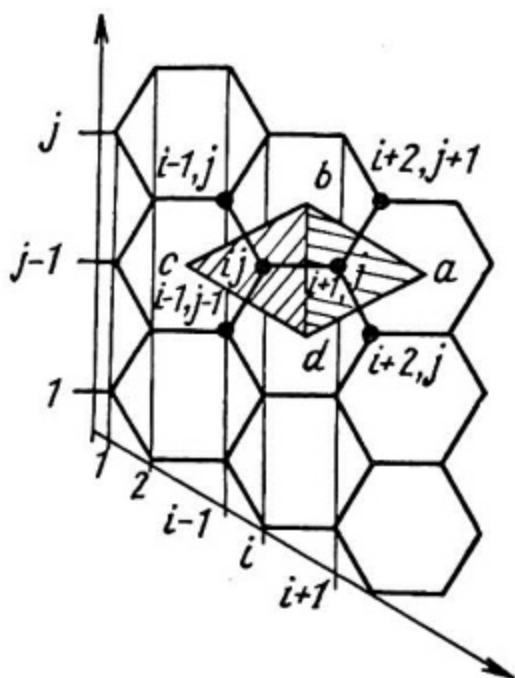


Рис. 3.6. Шестигранная ячейка (узлы в вершинах кассет)

Рассмотрим другую схему расположения узлов в шестигранной ячейке (рис. 3.6). Здесь узлы расположены в вершинах кассет, а их нумерация такова, что первый индекс означает номер вертикальной координатной линии, а второй — номер ломанной координатной линии, расположенной под углом 120° к вертикали. Элементарной ячейкой интегрирования являются равносторонние треугольники (на рисунке заштрихованы две ячейки, относящиеся к узлам i, j и $i+1, j$). При таком выборе узлов не возникает сложностей с аппроксимацией производной по нормали к границам ячейки, и шаг сетки при том же значении размера кассеты h оказывается меньшим. Интегрирование уравнения диффузии по ячейке приводит к четырехточечной конечно-разностной схеме. Однако вид канонического уравнения диффузии и значения коэффициентов оказываются в зависимости от расположения (вверху или внизу) узла на данной ломанной линии j . Так, при интегрировании уравнения диффузии по ячейке, содержащей узел i, j , в конечно-разностное представление войдет значение $\psi_{i-1, j-1}$, относящееся к нижней ломанной линии, а при интегрировании по ячейке, содержащей узел $i+1, j$, — значение $\psi_{i+2, j+1}$, относящееся к верхней ломанной координатной линии:

$$a_{ij} \varphi_{i-1,j} + b_{ij} \varphi_{ij} + c_{ij} \varphi_{i+1,j} + f_{ij} \varphi_{i-1,j-1} = q_{ij} ; \quad (3.12)$$

$$a_{i+1,j} \varphi_{ij} + b_{i+1,j} \varphi_{i+1,j} + c_{i+1,j} \varphi_{i+2,j} + g_{i+1,j} \varphi_{i+2,j+1} = q_{i+1,j} .$$

Значения коэффициентов определяются соотношениями

$$\left. \begin{aligned} -a_{ij} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_b + D_c); & -c_{ij} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_b + D_d); & -f_{ij} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_c + D_d); \\ b_{ij} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{12} (\Sigma_a + \Sigma_b + \Sigma_c) - (a_{ij} + c_{ij} + f_{ij}); & q_{ij} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{12} (Q_a + Q_b + Q_c); \\ -a_{i+1,j} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_b + D_d); & -c_{i+1,j} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_a + D_d); & -g_{i+1,j} &= \frac{\sqrt{3}}{2} (D_a + D_b); \\ b_{i+1,j} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{12} (\Sigma_a + \Sigma_b + \Sigma_d) - (a_{i+1,j} + c_{i+1,j} + g_{i+1,j}); \\ q_{i+1,j} &= \frac{k^2 \sqrt{3}}{12} (Q_a + Q_b + Q_d) . \end{aligned} \right\} \quad (3.13)$$

Здесь индексами "a", "b", "c", "d" помечены кассеты, окружающие узлы ij и $i+1, j$. Соотношения (3.13) справедливы для внутренних узлов. Для граничных точек можно опять воспользоваться условием (3.3) при аппроксимации члена $D \frac{\partial \varphi}{\partial n}$, но в ряде случаев бывает оправданным считать, что экстраполированная граница совпадает с истинной, и, следовательно, значения плотности потока в граничных узлах просто приравнять нулю.

3.2. Структура матричных операторов для простых сеток в прямоугольной и гексагональной геометриях

Для решения систем уравнений (3.7), (3.10), (3.12) полезно представить их в векторно-матричном виде: $\hat{L} \vec{\varphi} = \vec{q}$. Это, помимо краткости записи, что само по себе ценно, позволит увидеть их общие черты и даст возможность в дальнейшем сформулировать прямой метод их решения и обосновать итерационные подходы к решению этих уравнений.

Введем вектор $\vec{\varphi}$, компонентами которого будут значения плотности потока в узлах. Выберем порядок компонент следующим:

$$\vec{\varphi} = \{ \varphi_{11}, \varphi_{21}, \dots, \varphi_{i1}, \dots, \varphi_{12}, \varphi_{22}, \dots, \varphi_{i2}, \dots, \varphi_{i-1,j}, \varphi_{ij}, \varphi_{i+1,j}, \dots, \varphi_{i,j}, \varphi_{i,j+1}, \dots, \varphi_{1j}, \dots, \varphi_{Ij} \} .$$

Номер t компоненты вектора $\vec{\varphi}$ связан с индексами ij следующим соотношением: $t = I \times (j-1) + i$, т.е. $[\vec{\varphi}]_t = \varphi_{ij}$. Аналогичную структуру примем для вектора \vec{q} , т.е. $[\vec{q}]_t = q_{ij}$. Вектора $\vec{\varphi}$ и \vec{q} можно представить в следующем виде:

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vec{\varphi}_2 \\ \vdots \\ \vec{\varphi}_j \\ \vdots \\ \vec{\varphi}_J \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \vec{q} = \begin{pmatrix} \vec{q}_1 \\ \vec{q}_2 \\ \vdots \\ \vec{q}_j \\ \vdots \\ \vec{q}_J \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \vec{\varphi}_j = \begin{pmatrix} \varphi_{1j} \\ \varphi_{2j} \\ \vdots \\ \varphi_{ij} \\ \vdots \\ \varphi_{Ij} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \vec{q}_j = \begin{pmatrix} q_{1j} \\ q_{2j} \\ \vdots \\ q_{ij} \\ \vdots \\ q_{Ij} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Здесь в подвекторы $\vec{\varphi}_j$ и \vec{q}_j входят значения плотности потока и источника вдоль j -й координатной линии.

Тогда структура матрицы \hat{L} , соответствующей левой части уравнения (3.7), будет иметь вид, изображенный на рис. 3.7. Действительно, перемножая строку t матрицы \hat{L} на вектор $\vec{\varphi}$, получаем левую часть уравнения (3.7), которая должна равняться t -й компоненте вектора \vec{q} , т.е. q_{ij} . Из рисунка ясно, что \hat{L} — квадратная пятидиагональная матрица размерностью $I \times J$, составленная из коэффициентов a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} , d_{ij} и e_{ij} . В то же время матрицу \hat{L} можно рассматривать и как блочную трехдиагональную матрицу, элементами которой являются квадратные подматрицы \hat{d}_j , \hat{b}_j и \hat{e}_j размерностью I :

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \hat{e}_1 & & & & \\ \hat{d}_2 & b_2 & \hat{e}_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \hat{d}_j & \hat{b}_j & \hat{e}_j \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & \hat{d}_{J-1} & b_{J-1} & \hat{e}_{J-1} \\ & & & & & \hat{d}_J & b_J \end{pmatrix} \quad (3.15), \quad \text{где} \quad \hat{b}_j = \begin{pmatrix} b_{1j} c_{1j} & & & & \\ a_{2j} & b_{2j} & c_{2j} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{ij} & b_{ij} & c_{ij} \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & a_{I-1,j} & b_{I-1,j} & c_{I-1,j} \\ & & & & & a_{I,j} & b_{I,j} \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

а \hat{d}_j и \hat{e}_j — диагональные матрицы с элементами на диагонали $[\hat{d}_j]_{ii} = d_{ij}$ и $[\hat{e}_j]_{ii} = e_{ij}$.
 Теперь рассмотрим структуру матрицы \hat{L} , соответствующей системе уравнений (3.10). Ясно, что семиточечным уравнениям будет соответство-

Таким образом, наиболее общим для всех трех рассмотренных типов сеток является их блочная трехдиагональная структура матрицы \hat{L} , соответствующей конечно-разностному представлению двумерного уравнения диффузии. Можно показать, что и в случае сеток с локальным учащением такая структура матриц сохранится. Здесь следует акцентировать внимание на том естественном порядке следования компонент в векторах $\vec{\psi}$ и \vec{q} , который был нами принят с самого начала. Но можно было остановиться и на другой последовательности записи этих компонент. Например, не вдоль координатной линии i , а вдоль координатной линии j (по столбцам). Структура матрицы \hat{L} для прямоугольной сетки от этого бы не изменилась, но диагонали с коэффициентами a_{ij} и d_{ij} так же, как и с c_{ij} и e_{ij} , поменялись бы местами. Что касается матриц \hat{L} , соответствующих гексагональным сеткам, то их структура несколько бы изменилась, правда по-прежнему оставаясь семи (пяти)-диагональной или блочной трехдиагональной.

Однако, если заполнить вектора $\vec{\psi}$ и \vec{q} компонентами произвольно, то произвольной, вообще говоря, будет и структура матрицы \hat{L} . Формально перестановка компонент в векторах $\vec{\psi}$ и \vec{q} , а также в матрице \hat{L} может быть осуществлена с помощью составленной из 0 и 1 унитарной матрицы подобного преобразования \hat{P} , так что

$$\tilde{\vec{\psi}} = \hat{P}\vec{\psi}; \quad \tilde{\vec{q}} = \hat{P}\vec{q}; \quad \tilde{\hat{L}} = \hat{P}\hat{L}\hat{P}^{-1}.$$

Напомним, если $\vec{\psi}$ есть решение уравнения $\hat{L}\vec{\psi} = \vec{q}$, то $\tilde{\vec{\psi}}$ — решение уравнения $\tilde{\hat{L}}\tilde{\vec{\psi}} = \tilde{\vec{q}}$ и, следовательно, с точностью до перестановки компонент в векторе $\tilde{\vec{\psi}}$ решение векторно-матричного уравнения не зависит от структуры \hat{L} . Это верно, если речь идет о точном решении уравнения. Но, с точки зрения использования того или иного метода решения уравнения $\hat{L}\vec{\psi} = \vec{q}$, далеко не все равно, какова структура матрицы \hat{L} . В одних случаях (например, в рассмотренном выше) можно указать достаточно эффективный метод прямого решения уравнения или обосновать сходимость решения при использовании итерационного подхода, в других случаях это сделать может оказаться затруднительно или вообще невозможно.

3.3. Свойства матричных операторов конечно-разностного представления двумерных уравнений диффузии

Чем же привлекательна структура матриц \hat{L} , рассмотренных в предыдущем разделе? Чтобы ответить на этот вопрос, выявим дополнительные свойства этих матриц. Прежде всего матрицы, соответствующие простым сеткам, симметричны (относительно главной диагонали). Для прямоугольных сеток это следует из отмеченного ранее соответствия между коэффицици-

ентами $a_{i+1,j} = c_{ij}$ и $a_{ij+1} = b_{ij}$. Эти же соотношения справедливы и для гексагональных сеток, как это следует из вида выражений (3.11) и (3.13). Из этих же выражений видно, что, кроме того, $f_{i,j+1} = g_{ij}$. Поскольку матрица \hat{L} состоит из действительных коэффициентов, то симметричность означает и самосопряженность \hat{L} , что отражает свойство самосопряженности исходного уравнения диффузии (3.2).

Далее, матрица \hat{L} диагонально доминантна, т.е. для произвольной строки или столбца сумма модулей недиагональных элементов меньше диагонального элемента. Свойство диагональной доминантности есть следствие наличия поглощения нейтронов и влияния граничных условий. Отметим еще, что диагональные элементы положительны, а недиагональные — неположительны. Из перечисленных свойств и элементов теории матриц следуют два важнейших положения. Первое — это положительная определенность матрицы: для любого вектора \vec{x} скалярное произведение $(\hat{L}\vec{x}, \vec{x}) > 0$, и как следствие, все собственные числа матрицы \hat{L} действительны и положительны, что имеет место и для исходного оператора диффузии. Второе положение — это положительность матрицы, обратной к \hat{L} . Напомним, что положительность матрицы \hat{L}^{-1} означает положительность всех ее элементов. Это важнейшее свойство гарантирует положительность решения $\vec{\psi} = \hat{L}^{-1}\vec{q}$ при любом положительном векторе источников \vec{q} .

Итак, конечно-разностный аналог дифференциального оператора диффузии сохраняет его основные спектральные свойства и положительность решения при положительном источнике. Следует выделить еще одно важное свойство исходного оператора — связность всех точек системы, что означает, что изменение физических свойств или источника в какой-либо точке приводит к изменению решения во всех точках системы. Это свойство также находит отражение в разностном аналоге: матрица \hat{L} неприводима, т.е. изменением порядка следования точек конечно-разностной сетки (одновременной перестановкой строк и столбцов — подобным преобразованием матрицы: $\hat{L} = \hat{P}\hat{L}\hat{P}^{-1}$) невозможно привести матрицу к виду $\begin{vmatrix} \hat{L}_1 & 0 \\ \hat{L}_2 & \hat{L}_3 \end{vmatrix}$, где \hat{L}_1 и \hat{L}_3 — квадратные матрицы. Если бы это было возможно, т.е. нашлась бы такая унитарная матрица подобного преобразования \hat{P} , что

$$\hat{L} = \hat{P}\hat{L}\hat{P}^{-1} = \begin{vmatrix} \hat{L}_1 & \hat{O} \\ \hat{L}_2 & \hat{L}_3 \end{vmatrix},$$

то уравнению $\hat{L}\vec{\psi} = \vec{q}$ соответствовало бы уравнение $\hat{L}\vec{\tilde{\psi}} = \vec{\tilde{q}}$, где $\vec{\tilde{\psi}} = \hat{P}\vec{\psi}$ и $\vec{\tilde{q}} = \hat{P}\vec{q}$, или

$$\begin{vmatrix} \hat{L}_1 & \hat{O} \\ \hat{L}_2 & \hat{L}_3 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \vec{\tilde{\psi}}_1 \\ \vec{\tilde{\psi}}_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{\tilde{q}}_1 \\ \vec{\tilde{q}}_2 \end{vmatrix},$$

откуда следует, что $\hat{L}_1 \tilde{\varphi}_1 = \tilde{q}_1$, и, значит, компоненты решения, входящие в подвектор $\tilde{\varphi}_1$, никак не зависели бы ни от значения компонент источника, входящих в \tilde{q}_2 , ни от элементов матрицы \hat{L} , входящих в подматрицы \hat{L}_2 и \hat{L}_3 . Но это как раз и означает нарушение свойств связности системы.

3.4. Метод матричной факторизации при решении двумерного уравнения диффузии

Как было установлено в разделе 3.2, общим для всех рассмотренных типов сеток является блочная трехдиагональная структура (3.15) матрицы \hat{L} конечно-разностного представления уравнения диффузии. Уравнение $\hat{L}\vec{\varphi} = \vec{q}$ тогда можно рассматривать как систему векторно-матричных уравнений относительно подвекторов $\vec{\varphi}_j$ (3.14):

$$\hat{d}_j \vec{\varphi}_{j-1} + \hat{b}_j \vec{\varphi}_j + \hat{e}_j \vec{\varphi}_{j+1} = \vec{q}_j; \quad j = 1, 2, \dots, J, \quad (3.21)$$

а для $j=1$ и $j=J$ в левой части уравнений (3.21) отсутствует соответственно первое и третье слагаемое. Для решения системы уравнений (3.21) применим идею Гаусса — метод последовательного исключения с учетом специфики векторно-матричной записи. Выпишем первые уравнения системы (3.21):

$$\left. \begin{aligned} \hat{b}_1 \vec{\varphi}_1 + \hat{e}_1 \vec{\varphi}_2 &= \vec{q}_1; \\ \hat{d}_2 \vec{\varphi}_1 + \hat{b}_2 \vec{\varphi}_2 + \hat{e}_2 \vec{\varphi}_3 &= \vec{q}_2; \\ \hat{d}_3 \vec{\varphi}_2 + \hat{b}_3 \vec{\varphi}_3 + \hat{e}_3 \vec{\varphi}_4 &= \vec{q}_3; \\ \cdot & \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \\ \cdot & \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \end{aligned} \right\} \quad (3.22)$$

Умножим обе части первого уравнения на \hat{b}_1^{-1} слева и, выразив $\vec{\varphi}_1$ через $\vec{\varphi}_2$:

$$\vec{\varphi}_1 = -\hat{b}_1^{-1} \hat{e}_1 \vec{\varphi}_2 + \hat{b}_1^{-1} \vec{q}_1,$$

подставим результат во второе уравнение:

$$(\hat{b}_2 - \hat{d}_2 \hat{b}_1^{-1} \hat{e}_1) \vec{\varphi}_2 + \hat{e}_2 \vec{\varphi}_3 = \vec{q}_2 - \hat{d}_2 \hat{b}_1^{-1} \vec{q}_1, \text{ обозначая } \tilde{\hat{b}}_2 = (\hat{b}_2 - \hat{d}_2 \hat{b}_1^{-1} \hat{e}_1) \text{ и } \tilde{\hat{q}}_2 = \vec{q}_2 - \hat{d}_2 \hat{b}_1^{-1} \vec{q}_1, \text{ приводим второе уравнение к виду, идентичному}$$

первому: $\hat{b}_2 \vec{\varphi}_2 + \hat{e}_2 \vec{\varphi}_3 = \vec{q}_2$. Далее, вновь умножив обе части полученного уравнения на \hat{b}_2^{-1} слева, выразив $\vec{\varphi}_2$ через $\vec{\varphi}_3$, подставив в следующее уравнение и т.д., все уравнения (3.22) приведем к виду

$$\hat{b}_j \vec{\varphi}_j + \hat{e}_j \vec{\varphi}_{j+1} = \vec{q}_j, \quad (3.23)$$

где $\hat{b}_1 \equiv \hat{b}_1$, $\vec{q}_1 \equiv \vec{q}_1$, а

$$\hat{b}_j = (\hat{b}_j - \hat{d}_j \hat{b}_{j-1}^{-1} \hat{e}_{j-1}), \quad (3.24)$$

и

$$\vec{q}_j = \vec{q}_j - \hat{d}_j \hat{b}_{j-1}^{-1} \vec{q}_{j-1}, \quad (3.25)$$

при $j=2, 3, \dots, J$. Однако при $j=J$ в последнем уравнении отсутствует третье слагаемое, поэтому его вид $\hat{b}_J \vec{\varphi}_J = \vec{q}_J$ позволяет найти подвектор

$$\vec{\varphi}_J = \hat{b}_J^{-1} \vec{q}_J. \quad (3.26)$$

Но тогда из уравнений (3.23) можно найти и все остальные подвекторы $\vec{\varphi}_j$:

$$\vec{\varphi}_j = \hat{b}_j^{-1} [\vec{q}_j - \hat{e}_j \vec{\varphi}_{j+1}] \quad (3.27)$$

при $j=J-1, J-2, \dots, 1$.

Итак, алгоритм решения системы (3.21) выглядит следующим образом. По формулам (3.24), (3.25) определяем \hat{b}_j и \vec{q}_j последовательно для всех j , начиная с $j=2$. Далее определяем $\vec{\varphi}_J$ из выражения (3.26), после чего находим остальные $\vec{\varphi}_j$ по формуле (3.27), начиная с $j=J-1$ и до $j=1$.

Изложенный алгоритм носит название матричной факторизации или метода двойной матричной прогонки, имея в виду, что сначала в одном направлении (с возрастанием j) определяются коэффициенты, а затем в обратном находятся сами решения $\vec{\varphi}_j$.

Подсчитаем количество операций, необходимое для реализации алгоритма матричной факторизации. Напомним, что решение системы алгебраических уравнений, так же как и обращение матрицы требует порядка $\sim N^3$ операций, где N — число уравнений (размерность матрицы). Ясно, что в основном количество операций при вычислении по формулам (3.24)–(3.27) идет на обращение матриц \hat{b}_j , порядок которых равен 1 . Следовательно,

\tilde{b}_j^{-1} на соответствующие вектора (число операций $\sim I^2$) и, следовательно, на каждой последующей итерации по источнику деления общее число операций будет пропорционально величине $\tilde{I}^2 \cdot J$, что повышает эффективность применения алгоритма в \tilde{I} раз.

Глава 4

ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ В ЕГО ВЕКТОРНО-МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

4.1. Оценка погрешности итерационных методов

Настоящая глава посвящена итерационным методам решения системы уравнений $\hat{L}\vec{\psi} = \vec{q}$, соответствующей векторно-матричному представлению двумерных уравнений диффузии. Так же, как и при рассмотрении степенного метода решения неоднородного уравнения, проанализированного в первой главе, представим это уравнение в форме (2.14):

$$\vec{\psi} = \hat{B}\vec{\psi} + \vec{f}, \quad (4.1)$$

аналогично, итерационный процесс (2.15) примет вид

$$\vec{\psi}^t = \hat{B}\vec{\psi}^{t-1} + \vec{f}, \quad (4.2)$$

а для вектора ошибки данной итерации $\vec{\delta}^t = \vec{\psi} - \vec{\psi}^t$, будет справедливо соотношение

$$\vec{\delta}^t = \hat{B}\vec{\delta}^{t-1}. \quad (4.3)$$

При любой матрице \hat{B} итерационный процесс (4.2) имеет смысл только тогда, когда для достижения заданной погрешности общее число операций будет меньше числа операций прямого метода решения исходного уравнения, т.е. меньше $\min(I^3 \cdot J, I \cdot J^3)$, а при использовании внешних итераций по источнику делений — меньше $\min(I^2 \cdot J, I \cdot J^2)$. В то же время из вида выражения (4.2) ясно, что число операций при выполнении одной итерации не может быть меньше, чем $I \cdot J$ (такова размерность вектора $\vec{\psi}$). Следовательно, даже при минимальных вычислительных затратах на одну итерацию общее число итераций T должно удовлетворять неравенствам:

$$T < \min(I^2 J) \quad \text{или} \quad T < \min(I, J^2).$$

Для анализа сходимости итерационного процесса (4.2), и соответственно требуемого числа итераций T воспользуемся определением спектральной нормы матрицы:

$$\|\hat{B}\| = \max_{\vec{x}} \frac{\|\hat{B}\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}, \quad (4.4)$$

где $\|\hat{B}\vec{x}\|$ и $\|\vec{x}\|$ — нормы векторов $\hat{B}\vec{x}$ и \vec{x} соответственно. Тогда $\|\hat{B}\vec{x}\| \leq \|\hat{B}\| \cdot \|\vec{x}\|$ и, следовательно, $\|\delta^t\| \leq \|\hat{B}\| \cdot \|\delta^{t-1}\|$ или

$$\|\delta^t\| \leq \|(\hat{B})^t\| \cdot \|\delta^0\| \quad (4.5)$$

Таким образом, необходимым условием сходимости итерационного процесса (4.2) является соотношение $\lim_{t \rightarrow \infty} \|(\hat{B})^t\| = 0$. Если ввести понятие

асимптотического уменьшения нормы ошибки за одну итерацию $\rho(\hat{B}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \|\delta^t\|^{1/t}$,

то необходимым условием сходимости будет неравенство $\rho(\hat{B}) < 1$. С другой стороны, из определения $\rho(\hat{B})$ следует, что $\rho(\hat{B}) \leq \|\hat{B}\|$. Тогда достаточным условием сходимости будет соотношение $\|\hat{B}\| < 1$. Попробуем установить связь между этим неравенством и условием сходимости степенного метода: $|\lambda_0(\hat{B})| < 1$.

Предположим, что все собственные значения симметричной матрицы \hat{B} , размерностью N , действительны и различны, тогда любой вектор \vec{x} можно разложить в ряд по собственным векторам матрицы \hat{B} $\vec{\psi}_n$: $\vec{x} = \sum_n a_n \vec{\psi}_n$. Подставим это разложение в определение нормы \hat{B} (4.4):

$$\|\hat{B}\| = \max_{a_n} \left(\|\hat{B} \sum_n a_n \vec{\psi}_n\| / \|\sum_n a_n \vec{\psi}_n\| \right)$$

Воспользуемся соотношениями $\|\vec{x}\| = (\vec{x}, \vec{x})^{1/2}$, $\hat{B}\vec{\psi}_n = \lambda_n \vec{\psi}_n$ и $(\vec{\psi}_n, \vec{\psi}_k) = \delta(n-k)$ (собственные вектора симметричной матрицы ортонормированы), тогда

$$\|\hat{B}\|^2 = \max_{a_n} f(a_n), \quad \text{где} \quad f(a_n) = \frac{\sum_n \lambda_n^2 a_n^2}{\sum_n a_n^2}$$

Условием экстремальности $f(a_n)$ является равенство $f'_{a_n} = 0$ или

$$\lambda_n^2 \sum_{k=0}^{N-1} a_k^2 = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k^2 a_k^2 \quad \text{при} \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4.6)$$

Ясно, что решение системы (4.6) есть $a_n = \delta(\pi - k)$, а функция $f(a_n)$ имеет N локальных максимумов, в которых принимает значения λ_n^2 , но тогда $\max_{a_n} f(a_n) = \lambda_0^2$, и, следовательно,

$$\|\hat{B}\| = |\lambda_0|, \quad (4.7)$$

т.е. достаточное условие сходимости итерационного процесса (4.2) совпадает с условием сходимости степенного метода решения неоднородного уравнения.

Число итераций для уменьшения нормы первоначальной ошибки в e^M раз будет определяться неравенством

$$T \geq \frac{M}{-\ln \rho(\hat{B})} \approx \frac{M}{-\ln \|\hat{B}\|} \approx \frac{M}{1 - |\lambda_0(B)|}$$

Здесь последнее соотношение справедливо, когда $|\lambda_0| \approx 1$. Отметим еще одно приближенное, но очень ценное для практических расчетов равенство, справедливость которого следует из выражения (2.25). Норма разности двух соседних итераций $\|\vec{\Delta}^t\| = \|\vec{\psi}^t - \vec{\psi}^{t-1}\|$ связана с нормой ошибки $\vec{\delta}^t$ (недоступной при проведении вычислений) приближенным (при больших t) равенством

$$\|\vec{\delta}^t\| \approx \frac{\|\vec{\Delta}^t\|}{1 - |\lambda_0|}$$

Это соотношение особенно ценно при плохой сходимости итерационного процесса, когда $\|\vec{\Delta}^t\|$ может быть достаточно малой, но погрешность $\|\vec{\delta}^t\|$ еще остается велика.

4.2. Метод переменных направлений. Принципиальная схема и выбор ускоряющих параметров

Для того чтобы яснее представить идею метода переменных направлений, выпишем уравнение диффузии (3.5) в $(x-y)$ -геометрии:

$$-\frac{\partial}{\partial x} D(x,y) \frac{\partial \varphi(x,y)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} D(x,y) \frac{\partial \varphi(x,y)}{\partial y} + \Sigma_s(x,y) \varphi(x,y) = Q(x,y). \quad (4.8)$$

Пусть нам априорно известно поведение решения в каком-либо направлении, для определенности будем считать — в направлении y . Тогда член уравнения (4.8), отвечающий за перенос нейтронов в этом направлении приближенно может быть нами оценен. Пометим его индексом " t " и перенесем в правую часть:

$$-\frac{\partial}{\partial x} D(x,y) \frac{\partial \varphi^{t+\frac{1}{2}}(x,y)}{\partial x} + \Sigma(x,y) \varphi^{t+\frac{1}{2}}(x,y) = Q(x,y) + \frac{\partial}{\partial y} D(x,y) \frac{\partial \varphi^t(x,y)}{\partial y} \quad (4.9)$$

Уравнение (4.9) относительно $\varphi^{t+\frac{1}{2}}$ есть уравнение параметрическое относительно переменной y , т.е. при фиксированном y_j его можно рассматривать как одномерное по переменной x диффузионное уравнение. Решая уравнение (4.9) при различных y_j , определяем $\varphi^{t+\frac{1}{2}}(x,y)$. Естественно предположить, что полученное решение $\varphi^{t+\frac{1}{2}}$ более правильно описывает поведение поля нейтронов в x направлении, но тогда в уравнении (4.8) первое слагаемое будем считать известным и перенесем его в правую часть, а переменную в левой части пометим индексом " $t+1$ ":

$$-\frac{\partial}{\partial y} D(x,y) \frac{\partial \varphi^{t+1}(x,y)}{\partial y} + \Sigma(x,y) \varphi^{t+1}(x,y) = Q(x,y) + \frac{\partial}{\partial x} D(x,y) \frac{\partial \varphi^{t+\frac{1}{2}}}{\partial x} \quad (4.10)$$

Теперь уравнение (4.10) оказывается параметрическим относительно переменной x , т.е. при фиксированном x_i его можно рассматривать как одномерное по переменной y диффузионное уравнение. Решая его при различных фиксированных x_i , определяем $\varphi^{t+1}(x,y)$ и вновь возвращаемся к решению уравнения (4.9) при следующем индексе " t ". Таким образом, решение уравнений (4.9) и (4.10) составляет одну итерацию метода последовательных уточнений решения, который естественно назвать методом переменных направлений. Из физических соображений кажется оправданным предположение о сходимости такого процесса при удачно выбранном начальном приближении. Ниже мы сформулируем этот метод применительно к векторно-матричному представлению и докажем сходимость итерационного процесса при любом выборе вектора начального приближения.

Из вывода выражений для коэффициентов матрицы \hat{L} следует, что коэффициенты a_{ij} и c_{ij} отвечают за перенос нейтронов вдоль оси x , а d_{ij} и e_{ij} — за перенос нейтронов вдоль направления y . Введем коэффициенты b_{ij}^I и b_{ij}^{II} , определив их следующим образом:

$$b_{ij}^I = \rho_{ij}/2 - (a_{ij} + c_{ij}); \quad b_{ij}^{II} = \rho_{ij}/2 - (d_{ij} + e_{ij}),$$

тогда матрицу \hat{L} представим в виде суммы $\hat{L} = \hat{L}^I + \hat{L}^{II}$, где

$$\hat{L}^I = \begin{vmatrix} \hat{b}_1^I & & & & \\ & \hat{b}_2^I & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \hat{b}_j^I & \\ & & & & \hat{b}_J^I \end{vmatrix}; \quad \hat{L}^{\bar{I}} = \begin{vmatrix} \hat{b}_1^{\bar{I}} \hat{e}_1 & & & & \\ \hat{a}_2 & \hat{b}_2^{\bar{I}} \hat{e}_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \hat{a}_j & \hat{b}_j^{\bar{I}} \hat{e}_j \\ & & & & \hat{a}_J & \hat{b}_J^{\bar{I}} \end{vmatrix}; \quad \hat{b}_j^I = \begin{vmatrix} b_{1j}^I & c_{1j}^I & & & \\ a_{2j} & b_{2j}^I & c_{2j}^I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{ij} & b_{ij}^I & c_{ij}^I \\ & & & a_{Jj} & b_{Jj}^I \end{vmatrix} \quad (4.11)$$

а $\hat{b}_j^{\bar{I}}$ — диагональные матрицы с $[\hat{b}_j^{\bar{I}}]_{ii} = b_{ij}^{\bar{I}}$. Таким образом, матрица \hat{L}^I является трехдиагональной матрицей с главной и рядом лежащими диагоналями, а $\hat{L}^{\bar{I}}$ — трехдиагональной матрицей с главной и "разнесенными" диагоналями. В обозначениях (4.11) итерационный процесс (4.9) — (4.10) представляется следующим образом:

$$(\hat{L}^I + \hat{p}/2) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}} = \vec{q} - (\hat{L}^{\bar{I}} - \hat{p}/2) \vec{\psi}^t; \quad (4.12)$$

$$(\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2) \vec{\psi}^{t+1} = \vec{q} - (\hat{L}^I - \hat{p}/2) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}}, \quad (4.13)$$

где \hat{p} — диагональная матрица с $[\hat{p}]_{kk} = p_{ij}$ ($k = J \times (j-1) + i$), по физическому смыслу отвечающая за поглощение нейтронов.

Умножая слева обе части уравнения (4.12) на $(\hat{L}^I + \hat{p}/2)^{-1}$, уравнения (4.13) на $(\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2)^{-1}$ и подставляя значение $\vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}}$, выраженное из уравнения (4.12) в правую часть уравнения (4.13), получим

$$\vec{\psi}^{t+1} = (\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2)^{-1} (\hat{L}^I - \hat{p}/2) (\hat{L}^I + \hat{p}/2)^{-1} (\hat{L}^{\bar{I}} - \hat{p}/2) \vec{\psi}^t - (\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2)^{-1} [\hat{E} - (\hat{L}^I - \hat{p}/2) (\hat{L}^I + \hat{p}/2)^{-1}] \vec{q}. \quad (4.14)$$

Обозначая теперь

$$\hat{B} = (\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2)^{-1} (\hat{L}^I - \hat{p}/2) (\hat{L}^I + \hat{p}/2)^{-1} (\hat{L}^{\bar{I}} - \hat{p}/2); \\ \hat{f} = (\hat{L}^{\bar{I}} + \hat{p}/2)^{-1} [\hat{E} - (\hat{L}^I - \hat{p}/2) (\hat{L}^I + \hat{p}/2)^{-1}] \vec{q}, \quad (4.15)$$

приводим итерационный процесс (4.14) к виду (4.2). К сожалению, выражение (4.15) для матрицы \hat{B} оказывается достаточно сложным и не удается оценить не только $\rho(\hat{B})$, но и $\|\hat{B}\|$. Попробуем упростить выражение для матрицы \hat{B} , несколько видоизменив итерационный процесс (4.12)–(4.13). Заменяем в выражении (4.12) член $\hat{p}/2$, по смыслу отвечающий за половину поглощения в каждом координатном узле, на некоторое среднее, одинаковое для всех точек значение половины поглощения $\omega^I \hat{E}$, аналогично поступим и с выражением (4.13), заменив $\hat{p}/2$ на $\omega^II \hat{E}$. Тогда итерационный процесс будет следующим:

$$(\hat{L}^I + \omega^I \hat{E}) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}} = \vec{q} - (\hat{L}^{II} - \omega^I \hat{E}) \vec{\psi}^t; \quad (4.16)$$

$$(\hat{L}^{II} + \omega^{II} \hat{E}) \vec{\psi}^{t+1} = \vec{q} - (\hat{L}^I - \omega^{II} \hat{E}) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}} \quad (4.17)$$

Соответствующая этому процессу матрица $\hat{B}(\omega^I, \omega^{II})$ определяется соотношением

$$\hat{B}(\omega^I, \omega^{II}) = (\hat{L}^{II} + \omega^{II} \hat{E})^{-1} (\hat{L}^I - \omega^{II} \hat{E}) (\hat{L}^I + \omega^I \hat{E})^{-1} (\hat{L}^{II} - \omega^I \hat{E}), \quad (4.18)$$

а вектор $\vec{f} = (\hat{L}^{II} + \omega^{II} \hat{E})^{-1} [\hat{E} - (\hat{L}^I - \omega^{II} \hat{E}) (\hat{L}^I + \omega^I \hat{E})^{-1}] \vec{q}$.

Тогда строгая формулировка метода переменных направлений звучит следующим образом: найти такие ускоряющие параметры ω^I и ω^{II} (отвлекаясь от их первоначального физического смысла), чтобы норма матрицы $\hat{B}(\omega^I, \omega^{II})$ была минимальной. Для решения этой задачи перейдем от матрицы \hat{B} к подобной ей матрице $\hat{B} = \hat{P} \hat{B} \hat{P}^{-1}$, где $\hat{P} = (\hat{L}^{II} + \omega^{II} \hat{E})$, тогда

$$\|\hat{B}\| = \|\hat{B}\| = \|(\hat{L}^I - \omega^I \hat{E}) (\hat{L}^I + \omega^I \hat{E})^{-1} (\hat{L}^{II} - \omega^I \hat{E}) (\hat{L}^{II} + \omega^{II} \hat{E})^{-1}\|. \quad (4.19)$$

Напомним, что спектральные нормы подобных матриц совпадают. Смысл этого перехода состоит в том, чтобы сомножители с матрицами \hat{L}^I и \hat{L}^{II} располагались попарно. Для дальнейшего изложения отметим, что свойства матричных сомножителей в выражении (4.19) удовлетворяют тем, что были сформулированы при выводе выражения (4.7). Кроме того, собственные вектора матрицы $\hat{\mathcal{A}}^I = (\hat{L}^I - \omega^I \hat{E}) (\hat{L}^I + \omega^I \hat{E})^{-1}$ совпадают с собственными векторами матрицы \hat{L}^I , а собственные числа $\lambda_n(\hat{\mathcal{A}}^I)$ связаны с собственными числами λ_n^I матрицы \hat{L}^I соотношениями

$$\lambda_n(\hat{\mathcal{A}}^I) = \frac{\lambda_n^I - \omega^I}{\lambda_n^I + \omega^I}$$

Аналогичные утверждения справедливы и для второй пары матриц в выражении (4.19) (их справедливость нетрудно проверить исходя из определения собственных векторов и собственных чисел матриц $\hat{\mathcal{L}}$). Тогда для оценки нормы матрицы \hat{B} (4.19) справедливы следующие преобразования

$$\begin{aligned} \|\hat{B}\| &= \|\hat{\tilde{B}}\| \leq \|(\hat{\mathcal{L}}^I - \omega^I \hat{E})(\hat{\mathcal{L}}^I + \omega^I \hat{E})^{-1}\| \cdot \|(\hat{\mathcal{L}}^{\bar{I}} - \omega^{\bar{I}} \hat{E})(\hat{\mathcal{L}}^{\bar{I}} + \omega^{\bar{I}} \hat{E})^{-1}\| = \\ &= \max_{\lambda_{\min}^I \leq \lambda^I \leq \lambda_0^I} \left| \frac{(\lambda^I - \omega^I)}{(\lambda^I + \omega^I)} \right| \cdot \max_{\lambda_{\min}^{\bar{I}} \leq \lambda^{\bar{I}} \leq \lambda_0^{\bar{I}}} \left| \frac{(\lambda^{\bar{I}} - \omega^{\bar{I}})}{(\lambda^{\bar{I}} + \omega^{\bar{I}})} \right| \end{aligned} \quad (4.20)$$

Прежде чем решать задачу о минимизации полученного выражения, отметим, что каждый из входящих в него сомножителей меньше единицы, и поэтому $\|\hat{B}\| < 1$ при любых положительных ω^I и $\omega^{\bar{I}}$, а итерационный процесс (4.16)–(4.17) сходится всегда при любом начальном векторе $\vec{\psi}^0$.

Решим теперь вспомогательную задачу: определим параметр $\omega > 0$, при котором минимален максимум величины $y(x) = \left| \frac{x-\omega}{x+\omega} \right|$, если $a \leq x \leq b$. Из графика $y(x)$ (рис. 4.1) видно, что при фиксированном ω максимум достигается либо при $x = a$, либо при $x = b$, так что задача состоит в нахождении $\min_{\omega} z(\omega)$, где

$$z(\omega) = \max \left\{ \left| \frac{a-\omega}{a+\omega} \right|, \left| \frac{b-\omega}{b+\omega} \right| \right\}.$$

Проанализируем тогда графики двух функций (рис. 4.2)

$$z_a(\omega) = \left| \frac{a-\omega}{a+\omega} \right| \quad \text{и} \quad z_b(\omega) = \left| \frac{b-\omega}{b+\omega} \right|$$

Слева и справа от точки ω^* , определяемой равенством

$$z_a(\omega^*) = z_b(\omega^*), \quad (4.21)$$

возрастает либо одна, либо другая функция, т.е. точка пересечения ω^* определяет $\min z(\omega)$. Из равенства (4.21) находим ω^* :

$$\omega^* = \sqrt{ab}, \quad (4.22)$$

тогда

$$\min_{\omega} \max \left\{ \left| \frac{a-\omega}{a+\omega} \right|, \left| \frac{b-\omega}{b+\omega} \right| \right\} = \frac{\sqrt{b}-\sqrt{a}}{\sqrt{b}+\sqrt{a}} \quad (4.23)$$

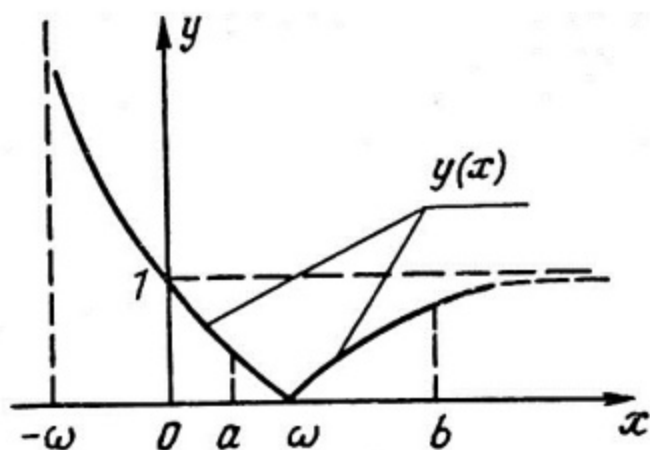


Рис. 4.1. График $y(x)$

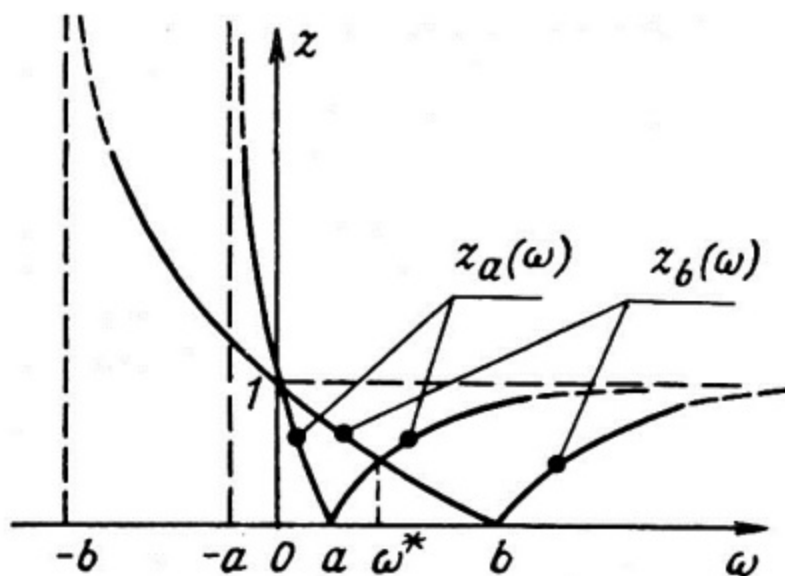


Рис. 4.2. Графики функций $z_a(\omega)$ и $z_b(\omega)$

Чтобы использовать полученный результат для минимизации $\|\hat{B}\|$, перейдем в выражении (4.20) к новым переменным $\lambda^{\bar{I}'}$ и $\lambda^{\bar{II}'}$ таким образом, чтобы

$$\sqrt{\lambda_{\min}^{\bar{I}'} \cdot \lambda_0^{\bar{I}'}} = \sqrt{\lambda_{\min}^{\bar{II}'} \cdot \lambda_0^{\bar{II}'}} = \omega^* , \quad (4.24)$$

что обеспечит одновременную минимизацию обоих сомножителей в выражении (4.20) при $\omega^{\bar{I}'} = \omega^{\bar{II}'} = \omega^*$;

Итак, обозначим $\lambda^{\bar{I}'} = \lambda^{\bar{I}} - \theta$; $\lambda^{\bar{II}'} = \lambda^{\bar{II}} + \theta$; $\lambda_{\min}^{\bar{I}'} = \lambda_{\min}^{\bar{I}} - \theta$;
 $\lambda_0^{\bar{I}'} = \lambda_0^{\bar{I}} - \theta$; $\lambda_{\min}^{\bar{II}'} = \lambda_{\min}^{\bar{II}} + \theta$; $\lambda_0^{\bar{II}'} = \lambda_0^{\bar{II}} + \theta$, тогда $\omega^{\bar{I}'} = \omega^{\bar{I}} - \theta$, $\omega^{\bar{II}'} = \omega^{\bar{II}} + \theta$.

Условие (4.24) определяет параметр сдвига θ :

$$\theta = \frac{\lambda_{min}^I \cdot \lambda_0^I - \lambda_{min}^{\bar{I}} \cdot \lambda_0^{\bar{I}}}{\lambda_{min}^I + \lambda_0^I + \lambda_{min}^{\bar{I}} + \lambda_0^{\bar{I}}} \quad (4.25)$$

Запишем окончательный результат для оптимальных ускоряющих параметров ω^I и $\omega^{\bar{I}}$:

$$\omega^I = \sqrt{(\lambda_{min}^I - \theta)(\lambda_0^I - \theta)} - \theta; \quad \omega^{\bar{I}} = \sqrt{(\lambda_{min}^{\bar{I}} + \theta)(\lambda_0^{\bar{I}} + \theta)} + \theta. \quad (4.26)$$

4.3. Расчетные формулы и оценка скорости сходимости метода переменных направлений

Исследуем теперь сходимость итерационного процесса (4.16) — (4.17), т.е. оценим $\|\hat{B}\|$ из соотношения (4.20) при оптимальных ускоряющих параметрах ω^I и $\omega^{\bar{I}}$, определяемых формулами (4.26). Используя ранее полученный результат (4.23), нетрудно преобразовать соотношение (4.20) к виду

$$\|\hat{B}\| \leq \frac{\sqrt{\lambda_0^I - \theta} - \sqrt{\lambda_{min}^I - \theta}}{\sqrt{\lambda_0^I + \theta} + \sqrt{\lambda_{min}^I + \theta}} \cdot \frac{\sqrt{\lambda_0^{\bar{I}} + \theta} - \sqrt{\lambda_{min}^{\bar{I}} + \theta}}{\sqrt{\lambda_0^{\bar{I}} + \theta} + \sqrt{\lambda_{min}^{\bar{I}} + \theta}} =$$

$$= \left[1 - \sqrt{\frac{(\lambda_{min}^I + \lambda_{min}^{\bar{I}})(\lambda_0^I + \lambda_0^{\bar{I}})}{(\lambda_{min}^I + \lambda_0^{\bar{I}})(\lambda_{min}^{\bar{I}} + \lambda_0^I)}} \right] / \left[1 + \sqrt{\frac{(\lambda_{min}^I + \lambda_{min}^{\bar{I}})(\lambda_0^I + \lambda_0^{\bar{I}})}{(\lambda_{min}^I + \lambda_0^{\bar{I}})(\lambda_{min}^{\bar{I}} + \lambda_0^I)}} \right] \quad (4.27)$$

Проанализируем полученное выражение. Во-первых, если $\lambda_{min}^I \rightarrow \lambda_0^I$ или $\lambda_{min}^{\bar{I}} \rightarrow \lambda_0^{\bar{I}}$, т.е. минимальные и максимальные собственные числа какой-либо из матриц \hat{L}^I или $\hat{L}^{\bar{I}}$ близки друг другу, то $\|\hat{B}\| \rightarrow 0$ и итерационный процесс сходится очень быстро. Наоборот, при $\lambda_{min}^I \rightarrow 0$ или $\lambda_{min}^{\bar{I}} \rightarrow 0$ правая часть соотношения (4.27) приближается к единице, и сходимость итерационного процесса ухудшается.

Представляет интерес случай, когда физические свойства зон и их размеры не сильно различаются вдоль направлений x и y . Тогда $\lambda_{min}^I \approx \lambda_{min}^{\bar{I}} \approx a$; $\lambda_0^I \approx \lambda_0^{\bar{I}} \approx b$. Пусть $b/a = p \gg 1$ (т.е. рассматривается не самый благоприятный с точки зрения скорости сходимости случай), когда выражение (4.27) преобразуется к виду

$$\|\hat{B}\| \leq \frac{1 - 2\sqrt{a/b}}{1 + 2\sqrt{a/b}} \approx 1 - 4\sqrt{a/b} \quad (4.28)$$

Практический интерес представляет оценка влияния погрешности в вычислениях спектральных границ матриц при подсчете значения ускоряющего параметра ω^* . Пусть ε_a и ε_b — относительные погрешности вычисления минимального и максимального собственных чисел матриц, т.е. $\varepsilon_a = |1 - \frac{\tilde{a}}{a}|$ и $\varepsilon_b = |1 - \frac{\tilde{b}}{b}|$. Тогда $\tilde{\omega}^* = \sqrt{\tilde{a} \cdot \tilde{b}}$, и поскольку $\tilde{\omega}^* \neq \sqrt{a \cdot b}$, то использовать выражение (4.27) уже нельзя. Тогда подставим значение $\tilde{\omega}^* \approx \omega^I \approx \omega^j$ непосредственно в соотношение (4.20). С учетом сделанных выше предположений получаем следующую оценку нормы $\|\hat{B}\|$:

$$\|\hat{B}\| \leq \left[\max_{a < \lambda < b} \left| \frac{\lambda - \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}}{\lambda + \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}} \right| \right]^2 = \left[\max \left\{ \left| \frac{a - \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}}{a + \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}} \right|, \left| \frac{b - \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}}{\tilde{b} + \sqrt{\tilde{a} \tilde{b}}} \right| \right\} \right]^2 \approx 1 - 4 \sqrt{\frac{a}{b}} \cdot \sqrt{1 - \varepsilon_a - \varepsilon_b}. \quad (4.29)$$

Таким образом, сравнивая соотношения (4.28) и (4.29), заключаем, что при не слишком больших погрешностях ε_a и ε_b ошибка в вычислении ускоряющего параметра ω^* слабо влияет на скорость сходимости итерационного процесса (4.16)–(4.17), т.е. сходимость метода переменных направлений слабо чувствительна к погрешности определения ускоряющих параметров.

Итак, по формулам (4.25)–(4.26) значения ускоряющих параметров вычислены. Как практически реализовать итерационный процесс (4.16)–(4.17)? Рассмотрим сначала решение первого уравнения. С учетом блочной структуры векторов (3.14) и матрицы \hat{Z}^I (4.11) уравнение (4.16) эквивалентно системе независимых друг от друга векторно-матричных уравнений

$$(\hat{b}_j^I + \omega^I \hat{E}) \vec{\psi}_j^{t+\frac{1}{2}} = \vec{q}_j - \hat{d}_j \vec{\psi}_{j-1}^t - (\hat{b}_j^{\bar{I}} + \omega^I \hat{E}) \vec{\psi}_j^t - \hat{e}_j \vec{\psi}_{j+1}^t \quad (4.30)$$

при $j = 1, 2, \dots, J$.

Каждое из этих уравнений при фиксированном индексе " j " и с учетом трехдиагонального вида матриц \hat{b}_j (4.11) и диагональной структуры остальных матриц в свою очередь эквивалентно системе алгебраических трехточечных уравнений

$$\begin{aligned} a_{ij} \psi_{i-1,j}^{t+\frac{1}{2}} + (b_{ij}^I + \omega^I) \psi_{ij}^{t+\frac{1}{2}} + c_{ij} \psi_{i+1,j}^{t+\frac{1}{2}} = \\ = \bar{q}_{ij} - d_{ij} \psi_{i,j-1}^t - (b_{ij}^{\bar{I}} + \omega^I) \psi_{ij}^t - e_{ij} \psi_{i,j+1}^t, \end{aligned} \quad (4.31)$$

которые решаются методом двойной прогонки и требуют для своего решения порядка I операций. Так, что для решения J уравнений (4.30) требуется порядка $I \cdot J$ операций. Напомним, что правая часть уравнений (4.31) вычисляется при известных ψ_{ij}^t .

Аналогично уравнение (4.17) эквивалентно системе также независимых друг от друга при фиксированном индексе "i" векторно-матричных уравнений

$$(\hat{b}_i^{\bar{n}} + \omega^{\bar{n}} \hat{E}) \vec{\psi}_i^{t+1} = \vec{q}_i^t - \hat{a}_i \vec{\psi}_{i-1}^{t+\frac{1}{2}} - (\hat{b}_i^{\bar{i}} + \omega^{\bar{n}} \hat{E}) \vec{\psi}_i^{t+\frac{1}{2}} - \hat{e}_i \vec{\psi}_{i+1}^{t+\frac{1}{2}}, \quad (4.32)$$

где структура векторов и матриц $\hat{b}_i^{\bar{n}}$ соответствует представлению (3.29) с заменой b_{ij} на $b_{ij}^{\bar{n}}$, а $\hat{b}_i^{\bar{i}}$ — диагональные матрицы с $[\hat{b}_i^{\bar{i}}]_{jj} = b_{ij}^{\bar{i}}$. Каждое из уравнений (4.32) с учетом структур входящих в него матриц эквивалентно системе следующих трехточечных уравнений:

$$\begin{aligned} c_{ij} \psi_{i,j-1}^{t+1} + (b_{ij}^{\bar{n}} + \omega^{\bar{n}}) \psi_{ij}^{t+1} + e_{ij} \psi_{i,j+1}^{t+1} = \\ = q_{ij} - a_{ij} \psi_{i-1,j}^{t+\frac{1}{2}} - (b_{ij}^{\bar{i}} + \omega^{\bar{n}}) \psi_{ij}^{t+\frac{1}{2}} - c_{ij} \psi_{i+1,j}^{t+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

которые, как и уравнения (4.31), решаются методом двойной прогонки с общим количеством операций порядка $I \cdot J$.

Рассмотренный нами алгоритм применим принципиально для любой из трех прямоугольных геометрий, конкретный вид которых учтен в выражениях (3.8) для коэффициентов, входящих в матрицу \hat{L} . Однако (r, z) -геометрия имеет свою особенность, заключающуюся в следующем. Из выражения (4.28) следует, что скорость сходимости метода переменных направлений определяется величиной отношения максимальных и минимальных собственных чисел матриц $\hat{L}^{\bar{i}}$ и $\hat{L}^{\bar{n}}$. Из общих соображений ясно, что это отношение меньше для матриц, у которых меньше разброс в значениях коэффициентов (например, у диагональных матриц значения диагональных коэффициентов и есть собственные значения). Но при прочих равных условиях из-за множителя r_i разброс в коэффициентах в (r, z) -геометрии будет в I раз больше, соответственно скорость сходимости в \sqrt{I} раз меньше. Существует простой способ избежать замедления сходимости в (r, z) -геометрии. Для этого вместо итерационной схемы (4.16)–(4.17) итерации следует проводить таким образом:

$$\left. \begin{aligned} (\hat{L}^{\bar{i}} + \omega^{\bar{i}} \hat{R}) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}} &= \vec{q} - (\hat{L}^{\bar{n}} - \omega^{\bar{i}} \hat{R}) \vec{\psi}^t; \\ (\hat{L}^{\bar{n}} + \omega^{\bar{n}} \hat{R}) \vec{\psi}^{t+1} &= \vec{q} - (\hat{L}^{\bar{i}} - \omega^{\bar{n}} \hat{R}) \vec{\psi}^{t+\frac{1}{2}} \end{aligned} \right\} \quad (4.34)$$

Схеме (4.34) соответствует следующая матрица $\hat{B}(\omega^I, \omega^{\bar{I}})$:

$$\hat{B} = (\hat{L}^{\bar{I}} + \omega^{\bar{I}} \hat{R})^{-1} (\hat{L}^I - \omega^{\bar{I}} \hat{R}) (\hat{L}^I + \omega^I \hat{R})^{-1} (\hat{L}^{\bar{I}} - \omega^I \hat{R}), \quad (4.35)$$

где \hat{R} — диагональная матрица с диагональными элементами \hat{r}_i . Если обозначить $\hat{R}^{-1/2}$ диагональную матрицу с коэффициентами $1/\sqrt{\hat{r}_i}$, а обратную к ней матрицу $\hat{R}^{1/2}$ с коэффициентами $\sqrt{\hat{r}_i}$, то подобная \hat{B} матрица $\tilde{B} = \hat{R}^{1/2} \hat{B} \hat{R}^{-1/2}$ будет представлена в следующем виде:

$$\tilde{B} = (\tilde{L}^{\bar{I}} + \omega^{\bar{I}} \tilde{E})^{-1} (\tilde{L}^I - \omega^{\bar{I}} \tilde{E}) (\tilde{L}^I + \omega^I \tilde{E})^{-1} (\tilde{L}^{\bar{I}} - \omega^I \tilde{E}), \quad (4.36)$$

где $\tilde{L}^I = \hat{R}^{-1/2} \hat{L}^I \hat{R}^{-1/2}$ и $\tilde{L}^{\bar{I}} = \hat{R}^{-1/2} \hat{L}^{\bar{I}} \hat{R}^{-1/2}$.

Так как подобные матрицы имеют одинаковые спектральные свойства, то выбор ускоряющих параметров и оценку скорости сходимости можно делать для матрицы \tilde{B} . Но элементы матриц \tilde{L}^I и $\tilde{L}^{\bar{I}}$ очень близки к соответствующим элементам матриц в (x, y) -геометрии.

Таким образом, для задачи в (r, z) -геометрии можно использовать схему (4.34), где ускоряющие параметры рассчитываются для той же схемы, если ее формально рассматривать в (x, y) -геометрии.

В заключение отметим следующее обстоятельство. Из анализа неравенства (4.20), так же как и из формулы (4.28), ясно, что при $\lambda_{min} / \lambda_{max} \rightarrow 0$ ($\frac{\alpha}{\beta} \rightarrow 0$) итерационный процесс может оказаться несходящимся. Но именно этот предел имеет место при уменьшении шага сетки, когда точность конечно-разностного аналога дифференциального уравнения диффузии повышается. Ведь при этом λ_{min} , соответствующее конечно-разностному аналогу, стремится к λ_{min} исходного дифференциального оператора, но последнее равно нулю. Приходим к неожиданному результату. Чисто "физическое" или исходя из "здорового смысла" первоначальное предположение о сходимости метода переменных направлений в его изначальной формулировке (4.9)–(4.10) оказывается неверным.

Следовательно, "здоровый смысл" или "физические соображения" должны рассматриваться не более чем предпосылкой для исследования того или иного приближенного метода. Окончательная формулировка метода нуждается в тщательном математическом его обосновании.

Метод переменных направлений применим только к конечно-разностному аналогу двумерного уравнения диффузии. Причем, повышение точности аппроксимации окупается как бы двойной ценой: с одной стороны, увеличением числа операций на одну итерацию из-за увеличения числа узлов, а с другой, — увеличением числа итераций из-за уменьшения отношения $\lambda_{min} / \lambda_{max}$.

4.4. Метод верхней релаксации при решении двумерного уравнения диффузии

Прежде чем сформулировать метод верхней релаксации в его современном виде, вкратце остановимся на его предшественниках. Однако, помня о сделанном в конце предыдущего раздела предостережении, не будем исходить из первоначальной дифференциальной формы уравнения диффузии, а сразу обратимся к его векторно-матричному аналогу. С точки зрения матричного формализма, основным в методе переменных направлений явилось разбиение матрицы \hat{L} на части таким образом, чтобы обращение этих частей было бы сравнительно простым. Но в таком случае проще всего выделить диагональ матрицы \hat{L} :

$$\hat{L} = \hat{D} - \hat{G} \quad (4.37)$$

где \hat{D} — либо диагональная матрица с элементами $[\hat{D}]_{ij} = b_{ij}$, либо блочная диагональная матрица с матричными элементами $[\hat{D}]_{jj} = \hat{b}_j$. Соответственно матрица $(-\hat{G})$ есть разность $\hat{L} - \hat{D}$. Тогда итерационный процесс решения уравнения $\hat{L}\vec{\varphi} = \vec{q}$ можно представить в виде

$$\vec{\varphi}^t = \hat{M}\vec{\varphi}^{t-1} + \hat{D}^{-1}\vec{q}, \quad (4.38)$$

где

$$\hat{M} = \hat{D}^{-1}\hat{G} \quad (4.39)$$

Если \hat{D} — диагональная матрица, то процесс (4.38) называют точечным методом Якоби [6], если \hat{D} — блочная диагональная матрица, то будем считать, что получаем блочный метод Якоби.

Отметим, что по определению все элементы матрицы \hat{G} неотрицательны и, следовательно, матрица \hat{M} — положительна, т.е. при положительных векторе источника \vec{q} и векторе начального распределения $\vec{\varphi}^0$ итерационный процесс (4.38) гарантирует положительность $\vec{\varphi}^t$ на любой итерации.

Кроме того, можно показать, что матрица \hat{M} обладает следующими спектральными свойствами:

- 1) все собственные значения μ матрицы \hat{M} действительны и расположены парами: $\pm\mu_n$;
- 2) спектральный радиус μ_0 матрицы \hat{M} меньше единицы.

Из второго свойства следует, что итерационный процесс (4.38) сходится к решению задачи. Вместе с тем, по сравнению с методом переменных направлений, итерации (4.38) явно будут проигрывать в скорости сходимости, так как из общих соображений ясно, что скорость сходимости метода будет тем выше, чем большую часть матрицы \hat{L} нам удастся непосредственно обращать, т.е. оставлять в левой части уравнения $\hat{L}\vec{\varphi} = \vec{q}$. Но итерации (4.38) можно сравнительно просто модернизировать, если матрицу \hat{G} в вы-

ражения (4.39) в свою очередь представить как сумму верхней и нижней треугольных матриц:

$$\hat{G} = \hat{C}_L + \hat{C}_U$$

и одну из них перенести в левую часть (4.38):

$$(\hat{D} - \hat{C}_L) \vec{\psi}^t = \hat{C}_U \vec{\psi}^{t-1} + \vec{q} \quad (4.40)$$

или

$$(\hat{D} - \hat{C}_U) \vec{\psi}^t = \hat{C}_L \vec{\psi}^{t-1} + \vec{q} \quad (4.41)$$

Процесс решения системы уравнений (4.40) или (4.41) почти так же прост, как и проведение итерации (4.38). Для этого только надо уравнения (4.40) решать последовательно, начиная с определения верхней компоненты вектора $\vec{\psi}^t$, а уравнения (4.41), наоборот, начинать решать с определения нижней компоненты вектора $\vec{\psi}^t$. Итерационный процесс (4.40) или (4.41) носит название метода Гаусса—Зейделя.

Чтобы понять идею дальнейшей модификации метода Гаусса—Зейделя, рассмотрим графики (рис. 4.3), иллюстрирующие две возможные схемы сходимости итерационных процессов к точному решению φ . Получение очередного приближения можно трактовать как добавление невязки $\Delta^t = \vec{\psi}^t - \vec{\psi}^{t-1}$ к предыдущему приближению $\vec{\psi}^{t-1}$. Из рис. 4.3, а видно, что в случае монотонной сходимости выгоднее прибавлять к $\vec{\psi}^{t-1}$ не

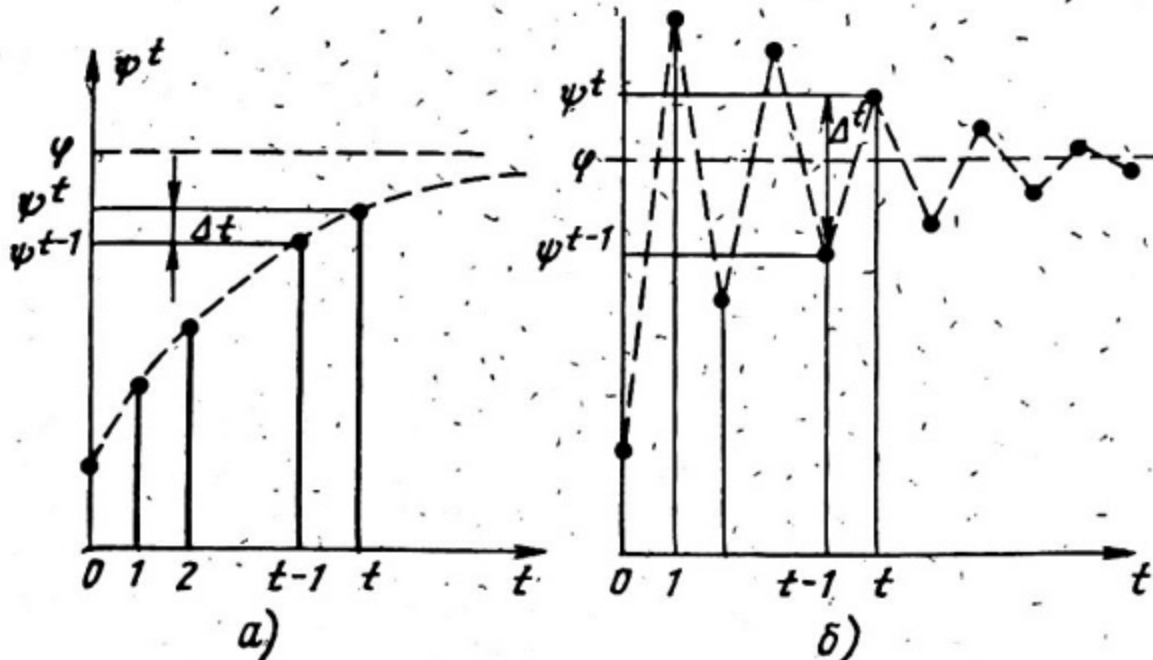


Рис. 4.3. Схемы сходимости итерационных процессов к точному решению φ

$\vec{\Delta}^t$, а $\omega \cdot \vec{\Delta}^t$, где ω — некоторый параметр, удовлетворяющий неравенству $1 < \omega < 2$. Ограничение $\omega < 2$ гарантирует итерационный процесс от нарушения сходимости. В другом случае (см. рис. 4.3, б) к предыдущей итерации выгоднее прибавлять величину меньшую невязки, т.е. $\omega \cdot \vec{\Delta}^t$, где $0 < \omega < 1$. В первом случае говорят о методе верхней релаксации, во втором — о методе нижней релаксации. Теперь вернемся к итерациям (4.40) (итерационный процесс (4.41) рассматривается совершенно аналогично). Невязка $\vec{\Delta}^t$ здесь определяется выражением

$$\vec{\Delta}^t = \hat{D}^{-1} [\hat{C}_L \vec{\psi}^t + \hat{C}_U \vec{\psi}^{t-1} + \vec{q}], - \vec{\psi}^{t-1},$$

и соответствующий релаксационный процесс имеет вид

$$\vec{\psi}^t = (1 - \omega) \vec{\psi}^{t-1} + \omega \hat{D}^{-1} [\hat{C}_L \vec{\psi}^t + \hat{C}_U \vec{\psi}^{t-1} + \vec{q}] \quad (4.42)$$

или, переходя к традиционному представлению (4.1)

$$\vec{\psi}^t = \hat{B} \vec{\psi}^{t-1} + \vec{f},$$

получаем, что матрица \hat{B} , определяющая скорость сходимости итерационного процесса (4.42), выражается формулой

$$\hat{B}(\omega) = (\hat{E} - \omega \hat{D}^{-1} \hat{C}_L)^{-1} [\omega \hat{D}^{-1} \hat{C}_U + (1 - \omega) \hat{E}] \quad (4.43)$$

Математическая формулировка метода последовательной верхней релаксации, называемого иногда в честь его изобретателей методом Янга—Франкеля, звучит следующим образом. Найти такой ускоряющий параметр ω_0 , чтобы спектральный радиус матрицы $\hat{B}(\omega)$ был минимален. При этом оказывается, что

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_0^2}}, \quad (4.44)$$

где μ_0 — спектральный радиус матрицы \hat{M} . Таким образом, ω_0 действительно удовлетворяет неравенству $1 < \omega_0 < 2$, поскольку $\mu_0 < 1$. В иностранной литературе итерационный процесс (4.42) называют *successive overrelaxation* и обозначают *SOR* в том случае, если матрица \hat{D} — диагональная. Итерационный процесс (4.42) называют блочной или линейной релаксацией (*successive line overrelaxation*) и обозначают *SLOR*, если под матрицей \hat{D} мы подразумеваем блочную диагональную матрицу (заметим, что от вида \hat{D} зависят и матрицы \hat{C}_L и \hat{C}_U).

Скорость сходимости итераций (4.42) определяется спектральным радиусом матрицы $B(\omega_0)$, равным $\omega_0 - 1$. В том случае, если ω_0 не удается определить точно (4.44), оказывается полезной следующая оценка спектрального радиуса $B(\omega)$:

$$\begin{aligned} \|\hat{B}(\omega)\| &\leq \mu_0^2 \quad \text{при } 1 \leq \omega \leq \omega_0; \\ \|\hat{B}(\omega)\| &\leq \sqrt{\omega-1} \quad \text{при } \omega_0 \leq \omega \leq 2. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Рассматривая равенства $\hat{B}\vec{\psi}_\pi = \lambda_\pi \vec{\psi}_\pi$ и $\hat{M}\vec{\xi}_\pi = \mu_\pi \vec{\xi}_\pi$ как систему пятиточечных уравнений с учетом структуры матриц \hat{D} , \hat{C}_L и \hat{C}_U , можно вывести [5] соотношения, связывающие собственные числа λ_π и μ_π :

$$\lambda_\pi = \left[\frac{\omega \mu_\pi}{2} \pm \sqrt{\frac{(\omega \mu_\pi)^2}{4} - (\omega - 1)} \right]^2.$$

Это соотношение пригодится нам в дальнейшем при определении спектрального радиуса матрицы \hat{M} .

Метод, изложенный выше, базировался на итерационном процессе (4.40), однако точно так же можно было бы исходить из итерационного процесса (4.41). В этом случае говорят [6] об обратном методе последовательной верхней релаксации, в котором итерационный процесс имеет вид

$$\vec{\psi}^t = (1-\omega)\vec{\psi}^{t-1} + \omega \hat{D}^{-1} [\hat{C}_U \vec{\psi}^t + \hat{C}_L \vec{\psi}^{t-1} + \vec{q}], \quad (4.46)$$

а соответствующая ему матрица $\hat{B}(\omega)$ определяется следующим выражением:

$$\hat{B}(\omega) = (\hat{E} - \omega \hat{D}^{-1} \hat{C}_U)^{-1} [\omega \hat{D}^{-1} \hat{C}_L + (1-\omega) \hat{E}]. \quad (4.47)$$

Наконец, комбинируя методы (4.42) и (4.46) на каждом шаге итерационного процесса, получаем метод симметричной последовательной верхней релаксации, скорость сходимости которого при прочих равных условиях оказывается выше, чем скорость сходимости как метода последовательной верхней релаксации, так и обратного метода.

4.5. Аналитические и итерационно-численные оценки спектральных границ матриц

Для практической реализации методов переменных направлений и верхней релаксации необходимо уметь оценивать спектральные границы соответствующих матриц, входящих в выражения для ускоряющих параметров.

Что касается $\lambda_0(\hat{L}^I)$ и $\lambda_0(\hat{L}^{II})$, то для их определения можно использовать обычный степенной метод, в то время как $\lambda_{\min}(\hat{L}^I)$ и $\lambda_{\min}(\hat{L}^{II})$ определяются как величины, обратные к β_0^I и β_0^{II} , где β_0^I и β_0^{II} есть максимальные собственные числа матриц, обратных к \hat{L}^I и \hat{L}^{II} соответственно, т.е. определяются в следующих итерационных процессах:

$$\hat{L}^I \tilde{\psi}^t = \tilde{\psi}^{t-1} ; \quad \beta^t = \|\tilde{\psi}^t\| ; \quad (4.48)$$

$$\tilde{\psi}^t = \tilde{\psi}^t / \beta^t ; \quad \beta_0^I = \lim_{t \rightarrow \infty} \beta^t ,$$

и аналогично для \hat{L}^{II} и β_0^{II} . Причем, как было показано ранее, нет необходимости вычислять спектральные границы с большой точностью из-за сравнительно слабой чувствительности скорости сходимости метода переменных направлений к вычислению ω^I и ω^{II} .

Что касается вычисления μ_0 в методе верхней релаксации, то его определение облегчается возможностью использовать соотношение (4.45), анализ которого позволяет использовать степенной метод применительно к матрице $\hat{B}(\omega=1)$ для поиска μ_0 , так как

$$\rho(\hat{B}(\omega=1)) = \mu_0^2 .$$

Заметим, что применение степенного метода непосредственно к матрице \hat{M} возможно, но с небольшой поправкой: собственное число должно вычисляться как отношение норм векторов не соседних итераций, а через одну:

$$\mu_0^2 = \|\tilde{\psi}^{t+1}\| / \|\tilde{\psi}^{t-1}\| .$$

В ряде случаев можно ограничиться аналитической оценкой спектральных границ. Продемонстрируем, как это можно сделать на примере матрицы \hat{L}^I в методе переменных направлений.

С одной стороны, собственные числа матрицы \hat{L}_i заключены в объединении кругов Гершгорина, т.е.

$$\min_i \frac{\rho_i}{2} \leq \lambda \leq \max_i \left(\frac{\rho_i}{2} + 2a_i + 2c_i \right) . \quad (4.49)$$

Для граничных точек ($i=1, I$) коэффициенты c_i или a_i должны быть заменены соответствующими граничными условиями. С другой стороны, в силу кусочно-постоянных свойств среды для матрицы \hat{L}_i^I можно указать ряд последовательных индексов "i", для которых значения коэффициентов a_i , c_i и $d_i = \frac{\rho_i}{2} + a_i + c_i$ совпадают в том смысле, что $a_i = c_i = a$; $d_i = d$. Но в таком случае для трехдиагональной матрицы порядка N с постоянными коэффициентами существуют аналитические формулы для

определения минимального и максимального собственных чисел:

$$\lambda_{\min} = \frac{\rho}{2} + 4a \sin^2 \frac{\pi}{2(N+1)}; \quad (4.50)$$

$$\lambda_{\max} = \frac{\rho}{2} + 4a \cos^2 \frac{\pi}{(N+1)}$$

Объединяя (4.49) с (4.50), находим

$$\begin{aligned} \min_i \frac{\rho_i}{2} \leq \lambda_{\min}(\hat{L}_j^I) \leq \min \left\{ \frac{\rho}{2} + 4a \sin^2 \frac{\pi}{2(N+1)} \right\}; \\ \max \left\{ \frac{\rho}{2} + 4a \cos^2 \frac{\pi}{2(N+1)} \right\} \leq \lambda_{\max}(\hat{L}_j^I) \leq \\ \leq \max_i \left\{ \frac{\rho_i}{2} + 2\alpha_i + 2c_i \right\}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Если исходная задача обладает центральной симметрией, т.е. на одной из границ задано краевое условие второго рода, то при соответствующей аппроксимации в матрице \hat{L}_j^I можно выделить матрицу $\hat{\mathcal{P}}$ порядка N :

$$\hat{\mathcal{P}} = \begin{vmatrix} d_2 & -a & & & & \\ -a & d & & & & \\ & & d & & & \\ & & & d & & \\ & & & & d & \\ & & & & & d \end{vmatrix}, \quad \begin{aligned} d_2 &= \frac{\rho}{2} + a; \\ d &= \frac{\rho}{2} + 2a \end{aligned}$$

Спектр $\hat{\mathcal{P}}$ также определяется аналитически. В этом случае можно утверждать, что

$$\lambda_{\min}(\hat{L}_j^I) \leq \min_{\hat{\mathcal{P}}} \left\{ \frac{\rho}{2} + 4a \sin^2 \frac{\pi}{4(N+1)} \right\}; \quad (4.52)$$

$$\lambda_{\max}(\hat{L}_j^I) \geq \max_{\hat{\mathcal{P}}} \left\{ \frac{\rho}{2} + 4a \cos^2 \frac{3\pi}{4(N+1)} \right\}.$$

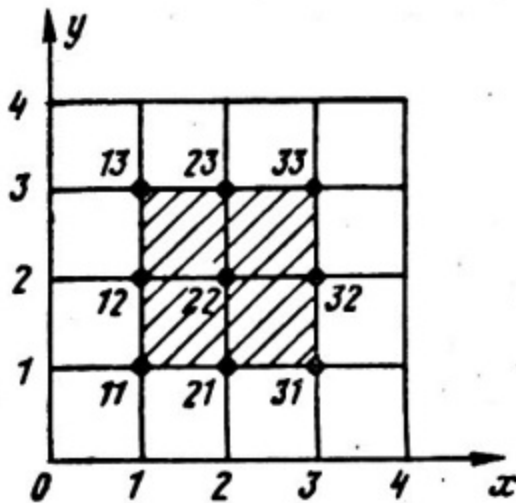
Из рассмотрения (4.51) и (4.52) видно, что при больших значениях N нижняя и верхняя оценки спектральных границ различаются несильно, и в качестве границ можно использовать средние арифметические значения этих величин. Практика расчетов показывает, что применение аналитических формул для оценки спектральных границ не замедляет сходимости.

Список использованной литературы

1. Хромов В. В., Кашутин А. А. Диффузия и замедление нейтронов в неразмножающих средах. М.: МИФИ, 1982.
2. Вейнберг А., Вигнер Е. Физическая теория ядерных реакторов. М.: ИЛ, 1961.
3. Шихов С. Б., Троянский В. Б. Теория ядерных реакторов: Учебник для вузов в 2-х т. Т. 2. Газокинетическая теория. М.: Энергоатомиздат, 1983.
4. Орлов В. В. Статика однородного реактора без отражателя. М.: МИФИ, 1986.
5. Шишков Л. К. Методы решения диффузионных уравнений двумерного ядерного реактора. М.: Атомиздат, 1976.
6. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы/Пер. с англ. М.: Мир, 1986.

Расчетная модель

Рассматриваемая двухзонная система в (x, y) -геометрии представлена на рис. П.1. Система состоит из двух физически различных зон: внутренней с $\Sigma_1 = 0,1$ и внешней с $\Sigma_2 = 0,06$. Значения коэффициентов диффузии одинаковы: $D_1 = D_2 = 1$. Координатные линии конечно-разностной сетки нанесены с равномерным шагом: $\Delta x_i = \Delta y_i = 1$. На всех внешних границах системы плотность потока нейтронов равна нулю, что дает возможность рассматривать только внутренние узлы конечно-разностной сетки. Нумерация узлов представлена на рисунке ($I = J = 3$). Для выбранной расчетной конечно-разностной модели значения коэффициентов, определяемые формулами (3.8), следующие:



формулами (3.8), следующие: $a_{ij} = c_{ij} = d_{ij} = e_{ij} = -1$; $b_{11} = b_{31} = b_{13} = b_{33} = 4,04$; $b_{21} = b_{12} = b_{32} = b_{23} = 4,06$; $b_{22} = 4,1$. Значения коэффициентов ρ_{ij} — это диагональные элементы представленной

Рис. П.1. Конечно-разностная сетка расчетной модели

ниже матрицы \hat{P} . Векторно-матричное уравнение $\hat{L}\vec{\psi} = \vec{q}$ имеет точное решение $\vec{\psi}_T = (2\ 3\ 2\ 3\ 5\ 3\ 2\ 3\ 2)$ при следующем векторе правой части $\vec{q} = (2,08\ 3,18\ 2,08\ 3,18\ 8,5\ 3,18\ 2,08\ 3,18\ 2,08)$. Если рассматривать матрицу \hat{L} в виде блочной трехдиагональной матрицы (3.15), то ее элементы-подматрицы имеют вид:

$$\hat{e}_j = \hat{d}_j = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}; \quad \hat{b}_1 = \hat{b}_3 = \begin{vmatrix} 4,04 & -1 & 0 \\ -1 & 4,06 & -1 \\ 0 & -1 & 4,04 \end{vmatrix};$$

$$\hat{b}_2 = \begin{vmatrix} 4,06 & -1 & 0 \\ -1 & 4,1 & -1 \\ 0 & -1 & 4,06 \end{vmatrix}$$

Соответствующие подвекторы $\vec{\psi}_{Tj}$ и \vec{q}_j имеют вид:

$$\vec{\psi}_{T1} = \vec{\psi}_{T3} = \begin{vmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{vmatrix}; \quad \vec{\psi}_{T2} = \begin{vmatrix} 3 \\ 5 \\ 3 \end{vmatrix}; \quad \vec{q}_1 = \vec{q}_3 = \begin{vmatrix} 2,08 \\ 3,18 \\ 2,08 \end{vmatrix}; \quad \vec{q}_2 = \begin{vmatrix} 3,18 \\ 8,5 \\ 3,18 \end{vmatrix}.$$

Полностью структура матрицы \hat{L} представлена ниже:

$$\hat{L} = \begin{array}{c|cccccc|ccc} 4,04 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4,06 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4,04 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & 4,06 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4,1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4,06 & 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4,04 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4,06 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4,04 \end{array}$$

Так как вышеприведенная матрица \hat{L} соответствует только внутренним узлам конечно-разностной сетки расчетной модели, то при подсчете коэффициентов ρ_{ij} учитывались значения коэффициентов a_{ij} , c_{ij} , d_{ij} и e_{ij} , выходящие за пределы матрицы \hat{L} . Таким образом, матрица \hat{p} принимает следующий вид:

$$\hat{p} = \begin{array}{c|cccccc|ccc} 2,04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1,06 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2,04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1,06 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1,06 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2,04 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1,06 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2,04 \end{array}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Метод переменных направлений

А. Физическая постановка задачи (без итерационных параметров)

Ниже приведены матрицы \hat{L}^I и $\hat{L}^{\bar{I}}$, определяемые структурой (4.11), а также нормы матрицы \hat{B} и вектора \hat{f} , соответствующих итерационному процессу (4.12)–(4.13):

$$\hat{L}^I = \begin{array}{c|cccccc|ccc} -2,02 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2,53 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2,02 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1,53 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2,05 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1,53 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2,02 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2,53 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2,02 \end{array}$$

$$\hat{L}^{\bar{I}} = \begin{bmatrix} 2,02 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1,53 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2,02 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 2,53 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 2,05 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2,53 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2,02 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1,53 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2,02 \end{bmatrix};$$

$$\|\hat{B}\| = 0,8934; \quad \|\hat{F}\| = 0,5672.$$

Сходимость процесса, обусловленная неравенством $\|\hat{B}\| < 1$, иллюстрируется векторами $\vec{\psi}^t$ при различных значениях номера итерации t :

$$\vec{\psi}^0 = \begin{bmatrix} 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^1 = \begin{bmatrix} 1,915 \\ 3,242 \\ 1,915 \\ 3,567 \\ 4,751 \\ 3,567 \\ 1,915 \\ 3,242 \\ 1,915 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^2 = \begin{bmatrix} 1,958 \\ 2,157 \\ 1,958 \\ 3,263 \\ 4,872 \\ 3,263 \\ 1,958 \\ 2,157 \\ 1,958 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^3 = \begin{bmatrix} 1,973 \\ 2,086 \\ 1,973 \\ 3,154 \\ 4,918 \\ 3,154 \\ 1,973 \\ 2,086 \\ 1,973 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^4 = \begin{bmatrix} 1,989 \\ 2,031 \\ 1,989 \\ 3,064 \\ 4,983 \\ 3,0164 \\ 1,989 \\ 2,031 \\ 1,989 \end{bmatrix}$$

Б. Математическая постановка задачи (с ускоряющими параметрами)

Ниже приведены минимальные и максимальные собственные числа матриц $\hat{L}^{\bar{I}}$ и $\hat{L}^{\bar{II}}$ (совпадение собственных чисел для $\hat{L}^{\bar{I}}$ и $\hat{L}^{\bar{II}}$ обусловлено тем, что матрицы $\hat{L}^{\bar{I}}$ и $\hat{L}^{\bar{II}}$ подобны, следовательно параметр $\theta = D$), а также значение ускоряющих параметров ω ; $\lambda_{max}^{\bar{I}} = \lambda_{max}^{\bar{II}} = 3,711$; $\lambda_{min}^{\bar{I}} = \lambda_{min}^{\bar{II}} = 0,352$; $\omega_1 = \omega_2 = 1,143$. Точное значение нормы матрицы \hat{B} , определяемой формулой (4.18): $\|\hat{B}\| = 0,248$, а оценка нормы матрицы \hat{B} по формуле (4.27): $\|\hat{B}\|_{оцл} = 0,2799$, что говорит о возможности использования этой оценки при предварительном подсчете необходимого числа итераций для достижения заданной точности расчета. Ясно, что сходимость итерационного процесса (4.16)–(4.17) должна быть значительно выше сходимости итераций без использования ускоряющих параметров, что подтверждается приведенными ниже векторами $\vec{\psi}^t$ при начальных значениях номеров итераций t :

$$\vec{\psi}^0 = \begin{bmatrix} 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \\ 3,00 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^1 = \begin{bmatrix} 1,953 \\ 3,148 \\ 1,953 \\ 3,159 \\ 4,921 \\ 3,159 \\ 1,953 \\ 3,148 \\ 1,953 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^2 = \begin{bmatrix} 1,978 \\ 3,059 \\ 1,978 \\ 3,052 \\ 4,986 \\ 3,052 \\ 1,978 \\ 3,059 \\ 1,978 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^3 = \begin{bmatrix} 1,991 \\ 3,024 \\ 1,991 \\ 3,023 \\ 4,991 \\ 3,023 \\ 1,991 \\ 3,024 \\ 1,991 \end{bmatrix}; \quad \vec{\psi}^5 = \begin{bmatrix} 1,997 \\ 3,011 \\ 1,997 \\ 3,015 \\ 4,997 \\ 3,015 \\ 1,997 \\ 3,011 \\ 1,997 \end{bmatrix}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Метод верхней релаксации

Ниже приведены матрицы \hat{C}_L , \hat{C}_U и \hat{D} , определяющие итерационный процесс (4.40)–(4.41) – метод Гаусса–Зейделя:

$$\hat{C}_L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \hat{C}_U = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$\hat{D} = \begin{bmatrix} 4,04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4,06 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4,04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4,06 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4,1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,06 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,04 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,06 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,04 \end{bmatrix}.$$

Таким образом матрица \hat{M} , определяемая формулой (4.37), имеет следующий вид:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1/4,04 & 0 & 1/4,04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4,06 & 0 & 1/4,06 & 0 & 1/4,06 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4,04 & 0 & 0 & 0 & 1/4,04 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4,06 & 0 & 0 & 0 & 1/4,06 & 0 & 1/4,06 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4,1 & 0 & 1/4,1 & 0 & 1/4,1 & 0 & 1/4,1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4,06 & 0 & 1/4,06 & 0 & 0 & 0 & 1/4,06 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4,04 & 0 & 0 & 0 & 1/4,04 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4,06 & 0 & 1/4,06 & 0 & 1/4,06 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4,04 & 0 & 1/4,04 & 0 \end{pmatrix}$$

Ее спектральный радиус $\mu_0 = 0,862$. Соответствующее значение ускоряющего параметра (4.44) $\omega_0 = 1,327$, а норма матрицы $\hat{B}(\omega_0)$

$$\|\hat{B}(\omega_0)\| = 0,324.$$

Следовательно, итерационный процесс (4.42) метода верхней релаксации имеет сходимость, лучшую, чем сходимость метода переменных направлений без использования ускоряющих параметров (физическая постановка), и несколько худшую по сравнению со сходимостью метода переменных направлений с использованием оптимальных значений ускоряющих параметров ω .

0

О Г Л А В Л Е Н И Е

<i>Глава 1.</i> Общие принципы расчета нейтронных полей.....	3
1.1. Введение	3
1.2. Классификация методов решения уравнения переноса нейтронов	6
1.3. Виды итераций при решении различных форм уравнения переноса	12
<i>Глава 2.</i> Степенные методы решения уравнений переноса в опера- торной форме	16
2.1. Степенной метод решения однородного уравнения ...	16
2.2. Степенной метод решения неоднородного уравнения ..	21
2.3. Организация итераций при определении высших гармо- ник однородного уравнения и в частном случае неодно- родного уравнения	25
<i>Глава 3.</i> Конечно-разностное представление уравнения диффузии. .	29
3.1. Конечно-разностные сетки и переход к системе алгебраи- ческих уравнений в конечно-разностном представлении двумерных уравнений диффузии	29
3.2. Структура матричных операторов для простых сеток в прямоугольной и гексагональной геометриях	38
3.3. Свойства матричных операторов конечно-разностного представления двумерных уравнений диффузии	42
3.4. Метод матричной факторизации при решении двумер- ного уравнения диффузии	44
<i>Глава 4.</i> Итерационные методы решения двумерного уравнения диффузии в его векторно-матричном представлении ...	47
4.1. Оценка погрешности итерационных методов	47
4.2. Метод переменных направлений. Принципиальная схе- ма и выбор ускоряющих параметров	49
4.3. Расчетные формулы и оценка скорости сходимости метода переменных направлений	55
4.4. Метод верхней релаксации при решении двумерного уравнения диффузии	59
4.5. Аналитические и итерационно-численные оценки спектральных границ матриц	62
Список использованной литературы	65
Приложение 1. Расчетная модель	66
Приложение 2. Метод переменных направлений	67
Приложение 3. Метод верхней релаксации	69

Алексей Михайлович Сироткин

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ

Редактор *Е.Г. Станкевич*
Техн. редактор *З.И. Хазова*
Корректор *Г.А. Станкевич*

Тем. план 1989 г., поз. 9

Л.-21774	Подписано в печать 25.12.89г.	Формат 60x84 1/16
Объем 4,5 п.л.	Уч.-изд.л. 4,25	Тираж 150 экз.
Цена 25 коп.	Заказ 2426	Изд. № 081-1

Московский инженерно-физический институт. Типография МИФИ.
115409, Москва, Каширское шоссе, 31