



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 129 за 2020 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[А.В. Шильков](#)

Применение модельных
уравнений для
итерационного расчета
полей нейтронов и фотонов
в веществе

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Шильков А.В. Применение модельных уравнений для итерационного расчета полей нейтронов и фотонов в веществе // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 129. 36 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-129>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-129>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

А.В. Шильков

**Применение модельных уравнений
для итерационного расчета
полей нейтронов и фотонов в веществе**

Москва — 2020

Шильков А.В.

Применение модельных уравнений для итерационного расчета полей нейтронов и фотонов в веществе

Выведены модельные кинетические уравнения переноса нейтронов или фотонов в веществе с сильным рассеянием. Уравнения имеют относительно малые собственные интегральные источники частиц, что позволяет использовать их для независимого расчета низших угловых моментов распределений частиц в целях ускорения сходимости итераций, возникающих при решении уравнения переноса частиц.

Ключевые слова: уравнение переноса нейтронов или фотонов, итерационные методы, ускорение сходимости итераций

Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-01-00857-а.

Alexander Victorovich Shilkov

Application of model equations to iterative calculation of the neutron and photon distributions in matter

Model kinetic equations for transport of photons or neutrons in matter with strong scattering are derived. The equations have relatively small integral (intrinsic) sources of particles, which makes it possible to use them for independent calculation of the lowest-order angular momenta of particle distributions in order to accelerate the convergence of iterations that arise when solving the particle transport equation.

Key words: neutron transport equation, iteration methods, acceleration of iterations

The study was supported by a grant from the Russian Foundation for Basic Research, project No 18-01-00857-a

Оглавление

Введение	3
1. Сведения из теории переноса частиц	7
2. Модельные кинетические уравнения	19
3. Метод ускорения итераций с помощью модельных уравнений.....	23
4. Характеристическая конечно-аналитическая схема.....	24
Заключение.....	34
Список литературы.....	34

Введение

Целью работы является вывод модельных кинетических уравнений переноса нейтронов или фотонов в сильно рассеивающем веществе, которые можно применять для ускорения итераций, возникающих при решении уравнения переноса частиц. Результаты расчетных исследований скорости сходимости итераций будут изложены в последующих работах.

Во введении дана постановка элементарной одногрупповой задачи.

В первом разделе приводятся сведения из теории переноса частиц, полезные для понимания методов ускорения сходимости итераций с помощью решения вспомогательной задачи, а также развиваемого далее метода.

Во втором разделе выводится система нелинейных модельных кинетических уравнений, которая кладется в основу вспомогательной задачи. Обсуждаются свойства системы.

В третьем разделе излагается метод ускорения итераций.

В четвертом разделе предложена характеристическая конечно-аналитическая схема для решения модельных уравнений и уравнений одногрупповой задачи переноса частиц.

Одногрупповая задача. Проблемы моделирования распространения фотонов или нейтронов в веществе часто можно свести к элементарной задаче нахождения решения одногруппового уравнения переноса частиц (см. [1], [2]):

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Omega^i \frac{\partial}{\partial r^i} + \Sigma \right] \varphi = F(\varphi) + Q, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1)$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, t) = \Sigma^a(\mathbf{r}, t) + \Sigma^s(\mathbf{r}, t), \quad F(\varphi) = \frac{v(\mathbf{r}, t) \Sigma^s(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \int_{4\pi} W(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}',$$

$$\int_{-1}^1 W(\eta, \mathbf{r}, t) d\eta = 1, \quad \eta = \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}', \quad (-1 \leq \eta \leq 1), \quad Q = Q(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t), \quad v = \text{const}.$$

Здесь $\varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t)$ – искомая функция распределения частиц (другие названия – ток частиц, интенсивность пучка частиц) в некоторой группе (интервале энергий) частиц, индекс группы опущен; $v = \text{const}$ – модуль скорости, $\mathbf{r} = (r^1, r^2, r^3)$ – вектор координат, t – время, $\mathbf{\Omega} = (\Omega^1, \Omega^2, \Omega^3) = (\sqrt{1-\mu^2} \cos \alpha, \sqrt{1-\mu^2} \sin \alpha, \mu)$, $|\mathbf{\Omega}| = 1$ – единичный вектор направления полета частиц, $\Omega^3 = \mu$ ($-1 \leq \mu \leq 1$) – косинус угла между вектором $\mathbf{\Omega}$ и осью 3, α ($0 \leq \alpha < 2\pi$) – азимутальный угол,

отсчитываемый от оси 1 в плоскости $r^1 \times r^2$, $d\Omega = d\mu d\alpha$ – дифференциал телесного угла, $\Sigma(\mathbf{r}, t)$ – полное макроскопическое сечение реакций взаимодействия частиц с веществом, имеющее размерность обратной длины, Σ^a и Σ^s – сечения реакций гибели и реакций рассеяния-размножения частиц. Интеграл $F(\varphi)$ суть собственный источник частиц или скорость прихода частиц в пучок $\varphi(\Omega, \mathbf{r}, t)$ из пучков других направлений $\varphi(\Omega', \mathbf{r}, t)$ в результате рассеяния-размножения частиц в пределах энергетической группы, $W(\eta, \mathbf{r}, t)$ – индикатриса соответствующих реакций, $\eta = \Omega\Omega'$ – косинус угла реакций, $\nu(\mathbf{r}, t)$ – эффективная кратность внутригрупповых реакций. В типичных проблемах переноса фотонов $\nu = 1$ (если ограничиваться энергиями фотонов до 100 КэВ). В проблемах переноса нейтронов эффективная кратность может превышать единицу и меняться в пределах $0 < \nu < 3$. Приход нейтронов в данную группу из других групп (если он есть) считаем известным, и включаем в сторонний независимый от функции распределения источник $Q(\Omega, \mathbf{r}, t)$. Переходы частиц между группами вычисляются с помощью итераций, называемых итерациями большого круга. В этой работе они не рассматриваются.

Замечание. Наряду с многогрупповой дискретизацией шкалы энергий частиц к элементарному уравнению вида (1) приводит метод лебеговского осреднения функции распределения по энергии частиц [3], [4].

Характеристикой дифференциального оператора уравнения (1) называют прямой луч $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \Omega l$, проходящий через точку отсчета $\mathbf{r}_0 \in V$ в направлении $\Omega = \text{const}$ (см. Рис. 1).

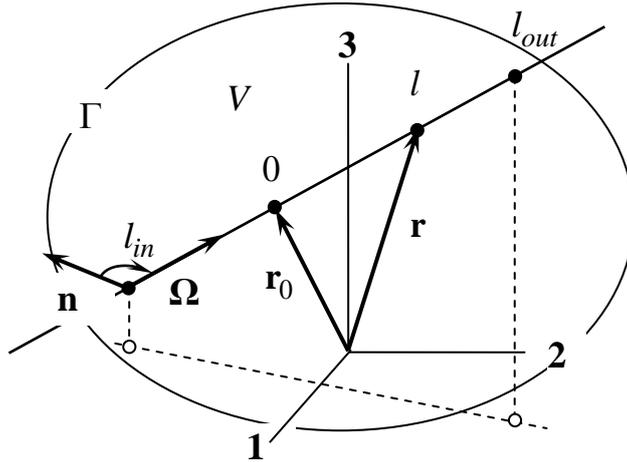


Рис. 1. Характеристика $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \Omega l$ задается точкой отсчета \mathbf{r}_0 , направлением Ω и лучевой координатой l – расстоянием от точки \mathbf{r}_0 до точки наблюдения \mathbf{r} ; l_{in} и l_{out} – координаты точки входа \mathbf{r}_{in} и точки выхода \mathbf{r}_{out} характеристики из тела.

Расстояние l , отсчитываемое вдоль луча от точки отсчета \mathbf{r}_0 до точки наблюдения \mathbf{r} , называется лучевой или характеристической координатой. Вектор $\mathbf{\Omega}$ можно переносить без изменения направления в любую точку прямого луча. На Рис. 1 его начало перенесено в точку входа луча в тело.

Если рассматривать лучевую координату l и время t как независимые переменные и учесть равенство $\partial\mathbf{r}/\partial l = \mathbf{\Omega}$, где $\partial/\partial l$ – производная по направлению $\mathbf{\Omega}$, то уравнение (1) можно записать в 1-ой характеристической форме

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial l} + \Sigma \right] \varphi = F(\varphi) + Q, \quad \frac{\partial}{\partial l} = \Omega^i \frac{\partial}{\partial r^i}, \quad (2)$$

Если связать l и t уравнениями свободного движения частицы

$$l = v[t - t_0], \quad \frac{\partial t}{\partial l} = \frac{1}{v}, \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial l} = \mathbf{\Omega}, \quad dl = v dt = \frac{dr^1}{\Omega^1} = \frac{dr^2}{\Omega^2} = \frac{dr^3}{\Omega^3},$$

то уравнение переноса (1), (2) записывается во 2-ой характеристической форме

$$\left[\frac{d}{dl} + \Sigma \right] \varphi = F(\varphi) + Q, \quad \frac{d}{dl} = \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial l} = \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Omega^i \frac{\partial}{\partial r^i}.$$

Полная производная $d\varphi/dl$ суть скорость изменения интенсивности пучка частиц при прохождении единичного расстояния в веществе в системе отсчета, движущейся вместе с пучком; $\Sigma\varphi$ – скорость выбытия частиц из пучка; $F(\varphi) + Q$ – полная скорость появления частиц в пучке.

На *внешней границе* $\Gamma(\mathbf{r}_\Gamma, t)$ тела $V(\mathbf{r}, t)$ на функцию распределения влетающих в тело частиц накладывается условие:

$$\varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \Big|_{\mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0} = S(\varphi) \Big|_{\mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0} + \varphi^{ent}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \Big|_{\mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0}, \quad \mathbf{r}_\Gamma \in \Gamma(\mathbf{r}_\Gamma, t). \quad (3)$$

$$S(\varphi) \Big|_{\mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0} = \int_{\mathbf{\Omega}'\mathbf{n} > 0} T(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \varphi(\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}_\Gamma, t) d\mathbf{\Omega}'.$$

Здесь $\mathbf{n}(\mathbf{r}_\Gamma, t)$ есть вектор внешней нормали к границе в точке \mathbf{r}_Γ . Частицы, движущиеся от границы вглубь тела, характеризуются условием $\mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0$, частицы, вылетающие из тела, – условием $\mathbf{\Omega}'\mathbf{n} > 0$. Интеграл $S(\varphi)$ есть собственный граничный источник частиц, $T(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t)$ – дифференциальное сечение отражения от границы или вероятность перехода частиц, падающих на

границу из глубины тела в пучок отраженных обратно частиц, φ^{ent} – функция распределения «внешних» частиц, прошедших сквозь границу извне вглубь тела (далее – сторонний граничный источник частиц).

Тело может быть неодносвязным (например, иметь тороидальную форму) и гетерогенным – состоять из пространственно разделенных зон, заполненных материалами с разными физическими свойствами. На *внутренних границах*, отделяющих зоны, коэффициенты и источники уравнения (1), (2) могут испытывать конечные разрывы.

Замечание. Решение *стационарной* задачи (1)-(3) при $\partial\varphi/\partial t = 0$, $\Sigma = \Sigma(\mathbf{r}), \dots$ в области фазового пространства $E_5 = \mathbf{r} \times \mathbf{\Omega}$, $\mathbf{r} \in V$, $|\mathbf{\Omega}| = 1$ существует не всегда. Так, в проблемах переноса нейтронов в теле с относительно большими размерами, высокой концентрацией ядер делящихся материалов и коэффициентом размножения $\nu(\mathbf{r}) > 1$ скорость реакций гибели нейтронов и потери частиц за счет вылета за границы тела не компенсируют скорость цепной реакции размножения нейтронов. В такой системе реализуется только нестационарный режим развития цепной реакции. Далее считаем, что при постановке стационарной задачи физические параметры вещества и геометрия тела подобраны так, что ее решение существует и оно единственное.

Простые итерации. Численное решение уравнений *нестационарой* и *стационарной* элементарной одnogрупповой задачи (1)-(3) ищется итерациями по значениям собственных интегральных источников частиц $F(\varphi)$ и $S(\varphi)$ – так называемыми итерациями малого круга.

В методе простых итераций собственные источники частиц на текущей итерации p вычисляются по значениям функции распределения, найденной на предыдущей итерации $p-1$: $F_p = F(\varphi_{p-1})$, $S_p = S(\varphi_{p-1})$. Доказательство сходимости простых итераций к решению задачи можно найти в [5].

Достоинства метода: (а) интегро-дифференциальное уравнение (1), (2) формально переходит в дифференциальное уравнение с заданной правой частью, а интегральное уравнение (3) – в алгебраическое уравнение; (б) имеется много схем пространственно-угловой дискретизации этих уравнений; (в) получаемая в результате дискретизации система алгебраических уравнений может быть решена *прямыми* экономичными алгоритмами «бегущего счета»; (г) метод прост для реализации в компьютерном коде.

Недостаток метода: если внутри тела имеются оптически толстые пространственные зоны, характеризующиеся сильным рассеянием и относительно малой вероятностью гибели частиц: $\Sigma^s \gg \Sigma^a, 1/L$, где L – характерный размер зоны, то простые итерации могут сходиться крайне медленно.

Для сокращения объема и времени компьютерных расчетов применяются различные методы *ускорения сходимости* простых итераций [5]-[19].

1. Сведения из теории переноса частиц

В разделе приведены сведения из теории переноса частиц, полезные для понимания методов ускорения сходимости итераций с помощью решения вспомогательной задачи [12]-[19], а также развиваемого в работе метода.

Разложения источников частиц. Индикатрису рассеяния-размножения частиц $W(\eta, \mathbf{r}, t)$ удобно задавать и хранить в виде серии коэффициентов $\omega_n(\mathbf{r}, t)$, $0 \leq n \leq N$ ее разложения в ряд по многочленам Лежандра $P_n(\eta)$:

$$W(\eta, \mathbf{r}, t) \approx W_{0,N}(\eta, \mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{2} \omega_n(\mathbf{r}, t) \cdot P_n(\eta), \quad (4)$$

$$\omega_n(\mathbf{r}, t) = \int_{-1}^1 W(\eta, \mathbf{r}, t) P_n(\eta) d\eta, \quad (\omega_0 = 1),$$

где $\eta = \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}'$ – косинус угла реакций, $W_{0,N}$ – конечная сумма первых $N+1$ слагаемых, N – порядок разложения. Если применить теорему сложения сферических функций, то собственный источник частиц $F(\varphi)$ можно представить в виде разложения по сферическим функциям (см. [1], [2]).

В данной работе мы будем пользоваться альтернативными разложениями источника в ряды по сферическим тензорам Лежандра [20]

$$F(\varphi) \approx F_{0,N}(\varphi) = v(\mathbf{r}, t) \Sigma^s(\mathbf{r}, t) \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} \omega_n(\mathbf{r}, t) \Phi_n^{ij\dots q}(\mathbf{r}, t) \cdot P_n^{ij\dots q}(\mathbf{\Omega}) = \quad (5)$$

$$\approx v(\mathbf{r}, t) \Sigma^s(\mathbf{r}, t) \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} \omega_n(\mathbf{r}, t) M_n^{ij\dots q}(\mathbf{r}, t) \cdot \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots \Omega^q}_n =$$

$$\approx v(\mathbf{r}, t) \Sigma^s(\mathbf{r}, t) \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi a_n} \omega_n(\mathbf{r}, t) M_n^{ij\dots q}(\mathbf{r}, t) \cdot P_n^{ij\dots q}(\mathbf{\Omega}),$$

$$a_n = 2^n \Gamma(n+1/2) / [\Gamma(1/2) \Gamma(n+1)], \quad (a_0 = a_1 = 1, a_2 = 3/2, a_3 = 5/2, \dots),$$

$$\Phi_n^{ij\dots q} = \int_{4\pi} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots \Omega^q}_n \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \quad M_n^{ij\dots q} = \int_{4\pi} P_n^{ij\dots q}(\mathbf{\Omega}) \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}. \quad (6)$$

Тензор Лежандра $P_n^{ij\dots q}(\Omega)$ (см. Таблица 1) есть симметричная комбинация произведений координат единичного вектора и тензора Кронекера δ^{ij} , которая не меняется при перестановке любой пары индексов. Коэффициенты при одночленах тензора равны коэффициентам при степенях многочлена Лежандра порядка n , a_n – коэффициент при старшей степени многочлена. Коэффициенты первого разложения выражаются через *степенные угловые моменты* распределения частиц $\Phi_n^{ij\dots q}(\mathbf{r}, t)$, второго и третьего разложений – через *центральные угловые моменты* $M_n^{ij\dots q}(\mathbf{r}, t)$. Все три разложения эквивалентны.

Таблица 1. Сферические тензоры Лежандра

Многочлен Лежандра	Тензор Лежандра
$P_0(\eta) = 1$	$P_0(\Omega) = 1$
$P_1(\eta) = \eta$	$P_1^i(\Omega) = \Omega^i$
$P_2(\mu) = \frac{3}{2}\eta^2 - \frac{1}{2}$	$P_2^{ij}(\Omega) = \frac{3}{2}\Omega^i\Omega^j - \frac{\delta^{ij}}{2}$
$P_3(\mu) = \frac{5}{2}\eta^3 - \frac{3}{2}\eta$	$P_3^{ijk}(\Omega) = \frac{5}{2}\Omega^i\Omega^j\Omega^k - \frac{3}{2}\frac{\Omega^i\delta^{jk} + \Omega^j\delta^{ik} + \Omega^k\delta^{ij}}{3}$
$P_4(\eta) = \frac{35}{8}\eta^4 - \frac{30}{8}\eta^2 + \frac{3}{8}$	$P_4^{ijkl}(\Omega) = \frac{35}{8}\Omega^i\Omega^j\Omega^k\Omega^l - \frac{30}{8}\left[\frac{\Omega^i\Omega^j\delta^{kl} + \Omega^i\Omega^k\delta^{jl}}{6} + \frac{\Omega^i\Omega^l\delta^{jk} + \Omega^j\Omega^k\delta^{il} + \Omega^j\Omega^l\delta^{ik} + \Omega^k\Omega^l\delta^{ij}}{6}\right] + \frac{3}{8}\frac{\delta^{ij}\delta^{kl} + \delta^{ik}\delta^{jl} + \delta^{il}\delta^{jk}}{3}$

Свертка тензора Лежандра с единичным вектором понижает порядок тензора на единицу $\Omega^k P_n^{ijkl\dots} = P_{n-1}^{ijl\dots}$. Свертка тензора по любой паре индексов равна нулю $\delta^{ij} P_n^{ijk\dots} = \delta^{jk} P_n^{ijk\dots} = \dots = 0$. Свертка тензора центральных моментов по любой паре индексов равна нулю $\delta^{ij} M_n^{ijk\dots} = \delta^{jk} M_n^{ijk\dots} = \dots = 0$.

Степенные и центральные моменты выражаются друг через друга:

$$\Phi_0 = M_0, \quad \left\{ \begin{array}{l} \Phi_2^{ij} = \frac{2M_2^{ij} + M_0\delta^{ij}}{3} \\ M_2^{ij} = \frac{3\Phi_2^{ij} - \Phi_0\delta^{ij}}{2} \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \Phi_3^{ijk} = \frac{2M_3^{ijk} + M_1^i\delta^{jk} + M_1^j\delta^{ik} + M_1^k\delta^{ij}}{5} \\ M_3^{ijk} = \frac{5\Phi_3^{ijk} - \Phi_1^i\delta^{jk} - \Phi_1^j\delta^{ik} - \Phi_1^k\delta^{ij}}{2} \end{array} \right\}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \Phi_4^{ijkl} \\ M_4^{ijkl} \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} \frac{8M_4^{ijkl}}{35} \\ \frac{35\Phi_4^{ijkl}}{8} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \frac{2[M_2^{ij}\delta^{kl} + M_2^{ik}\delta^{jl} + M_2^{il}\delta^{jk} + M_2^{jk}\delta^{il} + M_2^{jl}\delta^{ik} + M_2^{kl}\delta^{ij}]}{21} \\ -\frac{5[\Phi_2^{ij}\delta^{kl} + \Phi_2^{ik}\delta^{jl} + \Phi_2^{il}\delta^{jk} + \Phi_2^{jk}\delta^{il} + \Phi_2^{jl}\delta^{ik} + \Phi_2^{kl}\delta^{ij}]}{8} \end{Bmatrix} + \\ &+ \begin{Bmatrix} M_0/15 \\ \Phi_0/8 \end{Bmatrix} \left[\delta^{ij}\delta^{kl} + \delta^{ik}\delta^{jl} + \delta^{il}\delta^{jk} \right], \dots \end{aligned}$$

Функция распределения и заданный сторонний источник частиц раскладываются в следующие ряды

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \\ Q(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} &\simeq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \begin{Bmatrix} \Phi_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ Q_n^{ijk\dots}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} P_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \begin{Bmatrix} \Phi_0 \\ Q_0 \end{Bmatrix} + \frac{3\mathbf{\Omega}^i}{4\pi} \begin{Bmatrix} \Phi_1^i \\ Q_1^i \end{Bmatrix} + \dots = \quad (8) \\ &\simeq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \begin{Bmatrix} M_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} \underbrace{\left\{ \frac{\Omega^i \Omega^j \dots}{n} \right\}}_n \simeq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi a_n} \begin{Bmatrix} M_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} P_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}), \end{aligned}$$

$$Q_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \simeq \int_{4\pi} \underbrace{\left\{ \frac{\Omega^i \Omega^j \dots}{n} \right\}}_n Q(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \quad H_n^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} P_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) Q(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}.$$

Степенные $Q_n^{ijk\dots}(\mathbf{r}, t)$ и центральные $H_n^{ijk\dots}(\mathbf{r}, t)$ моменты стороннего источника частиц связаны друг с другом соотношениями, аналогичными (7).

Разложения собственного граничного источника получаем подстановкой разложения функции распределения частиц (8) в (3)

$$\begin{aligned} S(\varphi)|_{\mathbf{\Omega}_n < 0} &\approx S_{0,N}(\varphi)|_{\mathbf{\Omega}_n < 0} = \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} \Phi_n^{ij\dots}(\mathbf{r}_\Gamma, t) T_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \quad (9) \\ &= \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi} M_n^{ijk\dots}(\mathbf{r}, t) S_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{4\pi a_n} M_n^{ij\dots}(\mathbf{r}_\Gamma, t) T_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t), \end{aligned}$$

$$\begin{Bmatrix} S_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \\ T_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \end{Bmatrix} = \int_{\mathbf{\Omega}'_n > 0} T(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \begin{Bmatrix} \underbrace{\left\{ \frac{\Omega'^i \Omega'^j \dots}{n} \right\}}_n \\ P_n^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}') \end{Bmatrix} d\mathbf{\Omega}'.$$

Уравнения для моментов внутри тела. Если интегрировать уравнение переноса частиц (1) по телесному углу 4π с произведениями направляющих косинусов $\Omega^i \Omega^j \Omega^k \dots$ или с тензором $P_n^{ijk\dots}(\Omega)$, то можно получить цепочки линейных дифференциальных уравнений, связывающих ряд угловых моментов функции распределения частиц [20]. Приведем здесь скалярное и векторное уравнения, возникающие при использовании весов 1 и Ω^i ($i = 1, 2, 3$) [1], [2]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_0}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_1^i}{\partial r^i} + \Sigma_0 \Phi_0 = Q_0, \quad (10)$$

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_1^i}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_2^{ij}}{\partial r^j} + \Sigma_1 \Phi_1^i = Q_1^i, \quad \text{или} \quad \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_1^i}{\partial t} + \frac{1}{3} \frac{\partial \Phi_0}{\partial r^i} + \frac{2}{3} \frac{\partial M_2^{ij}}{\partial r^j} + \Sigma_1 \Phi_1^i = Q_1^i, \quad (11)$$

$$\Sigma_0 = \Sigma - v\Sigma^s = \Sigma^a + [1 - v]\Sigma^s < 0, \quad \Sigma_1 = \Sigma - \omega_1 v \Sigma^s = \Sigma^a + [1 - \omega_1 v]\Sigma^s > 0.$$

В уравнения входят моменты функции распределения нулевого $\Phi_0 = M_0$, первого $\Phi_1^i = M_1^i$ и второго $\Phi_2^{ij} = [\Phi_0 \delta^{ij} + 2M_2^{ij}]/3$ порядков.

Уравнения для моментов на границе. Если интегрировать граничное условие для функции распределения (3) с весами $\Omega^i \Omega^j \Omega^k \dots$ или $P_n^{ijk\dots}(\Omega)$, то можно получать как линейные алгебраические уравнения, так и нелинейные функциональные уравнения, связывающие угловые моменты на границе тела. Выведем точное функциональное уравнение, связывающее моменты Φ_0 и Φ_1^i . Проинтегрируем (3) с весом $\mathbf{n}\Omega$ по полусфере, состоящей из направлений полета частиц, движущихся от границы вглубь тела $\mathbf{n}\Omega < 0$:

$$\int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \mathbf{n}\Omega [\varphi(\Omega) - \varphi^{ent}(\Omega)] d\Omega = \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \mathbf{n}\Omega \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} T(\Omega' \rightarrow \Omega) \varphi(\Omega') d\Omega' d\Omega, \quad (\mathbf{r}_\Gamma \in \Gamma).$$

Введем нормированный (дробно-линейный) функционал $\chi(\varphi) \geq 0$, имеющий смысл среднего коэффициента отражения частиц от поверхности тела

$$\chi(\varphi) = \chi(\mathbf{r}_\Gamma, t) = - \frac{\int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \mathbf{n}\Omega \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} T(\Omega' \rightarrow \Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) \varphi(\Omega', \mathbf{r}_\Gamma, t) d\Omega' d\Omega}{\int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} \mathbf{n}\Omega' \varphi(\Omega', \mathbf{r}_\Gamma, t) d\Omega'}. \quad (12)$$

Функционал относительно слабо зависит от вариаций функции распределения частиц. Если тело граничит с вакуумом, то $\chi = 0$. Перепишем соотношение в терминах коэффициента отражения

$$\int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \mathbf{n}\Omega [\varphi(\Omega) - \varphi^{ent}(\Omega)] d\Omega = -\chi \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} \mathbf{n}\Omega \varphi(\Omega) d\Omega.$$

Продолжим распределение падающих извне частиц (если они есть) на дополняющую полусферу $\Omega\mathbf{n} > 0$ четным образом

$$\varphi_0^{ent}(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \begin{cases} \varphi^{ent}(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t), & \Omega\mathbf{n} < 0 \\ \varphi^{ent}(-\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t), & \Omega\mathbf{n} > 0 \end{cases}. \quad (13)$$

Распространим интегралы на полный телесный угол

$$\int_{4\pi} \frac{\mathbf{n}\Omega - |\mathbf{n}\Omega|}{2} [\varphi(\Omega) - \varphi_0^{ent}(\Omega)] d\Omega = -\chi \int_{4\pi} \frac{\mathbf{n}\Omega + |\mathbf{n}\Omega|}{2} \varphi(\Omega) d\Omega, \quad \text{или}$$

$$-\int_{4\pi} \mathbf{n}\Omega \varphi(\Omega) d\Omega + \frac{1-\chi}{1+\chi} \int_{4\pi} |\mathbf{n}\Omega| \varphi(\Omega) d\Omega = \frac{1}{1+\chi} \int_{4\pi} |\mathbf{n}\Omega| \varphi_0^{ent}(\Omega) d\Omega.$$

Если ввести еще один слабо меняющийся нормированный функционал [12]

$$A(\varphi) = A(\mathbf{r}_\Gamma, t) = \int_{4\pi} |\mathbf{n}\Omega| \varphi(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) d\Omega \Big/ \int_{4\pi} \varphi(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) d\Omega \quad (14)$$

и воспользоваться определением угловых моментов (6), то мы получим точное граничное условие смешанного типа, связывающее моменты Φ_0 и Φ_1^i

$$-n_i \Phi_1^i(\mathbf{r}_\Gamma, t) + \frac{1-\chi}{1+\chi} A \Phi_0(\mathbf{r}_\Gamma, t) = \frac{B(\mathbf{r}_\Gamma, t)}{1+\chi}, \quad B(\mathbf{r}_\Gamma, t) = \int_{4\pi} |\mathbf{n}\Omega| \varphi_0^{ent}(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) d\Omega. \quad (15)$$

Здесь B – заданная функция, функционалы $\chi(\varphi)$ и $A(\varphi)$ вычисляются с помощью итераций по функции распределения на «хороших» пучках частиц, которые пересекают границу (не имеют касательных направлений). Если положить $A(\varphi) \approx A(1) = 1/2$ и $\chi(\varphi) = 0$ (граница с вакуумом), то (15) переходит в приближенное граничное условие Маршака (см. [1], [2]).

Методы ускорения сходимости итераций. За 70-летнюю практику численного решения проблем переноса частиц разработано много методов ускорения простых итераций – от простых до более сложных. Здесь можно назвать метод Зейделя, метод Люстерника [5], [6], методы ребаланса (fine-mesh rebalance, coarse-mesh rebalance) [7]–[10]. На текущий момент наибольшую эффективность в решении проблем с преобладающим рассеянием частиц ($\Sigma^s \gg \Sigma^a, 1/L$) показали методы, использующие решение вспомогательной задачи низкой размерности по угловым переменным [12]–[17] (см. также обзоры [18], [19]).

Для пояснения последних разобьем разложение собственных источников (5), (9) на главную часть и остаточный отрезок ряда

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} F_p(\varphi) \\ S_p(\varphi) \end{Bmatrix} &\approx \begin{Bmatrix} v\Sigma^s \\ 1 \end{Bmatrix} \left[\frac{\Phi_{0,(p-1/2)}}{4\pi} \begin{Bmatrix} 1 \\ T_0 \end{Bmatrix} + \frac{3\Phi_{1,(p-1/2)}^i}{4\pi} \begin{Bmatrix} \omega_1 \Omega^i \\ T_1^i \end{Bmatrix} + \frac{5\Phi_{2,(p-1/2)}^{ij}}{4\pi} \begin{Bmatrix} \omega_2 P_2^{ij} \\ T_2^{ij} \end{Bmatrix} \right] + \\ &+ \begin{Bmatrix} F_{3,N}(\varphi_{p-1}) \\ S_{3,N}(\varphi_{p-1}) \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} \mathbf{r} \in V \\ \mathbf{r}_\Gamma \in \Gamma, \Omega \mathbf{n} < 0 \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\Phi_{2,(p-1/2)}^{ij} = D^{ij}(\varphi_{p-1})\Phi_{0,(p-1/2)}, \quad D^{ij}(\varphi) = D^{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{\int \Omega^i \Omega^j \varphi(\Omega, \mathbf{r}, t) d\Omega}{\int \varphi(\Omega, \mathbf{r}, t) d\Omega}. \quad (17)$$

Здесь p и $p-1$ – индексы текущей и предыдущей итерации для задачи решения уравнения переноса частиц (1)–(3); $p-1/2$ – индекс текущей итерации для решения вспомогательной задачи низкой размерности. Главная часть разложений есть линейная комбинация скалярного и векторного угловых моментов $\Phi_{0,(p-1/2)}$ и $\Phi_{1,(p-1/2)}^i$. Момент второго порядка $\Phi_{2,(p-1/2)}^{ij}$ выражается через $\Phi_{0,(p-1/2)}$ и $D^{ij}(\varphi_{p-1})$ по формуле (17), где $D^{ij}(\varphi)$ – нормированный (дробно-линейный) функционал ($D^{ij} = D^{ji}$, $\text{Sp}D^{ij} = D^{ij}\delta_{ij} = 1$), который слабо зависит от вариаций функции распределения частиц. Для ускорения сходимости собственных источников моменты $\Phi_{0,(p-1/2)}$ и $\Phi_{1,(p-1/2)}^i$ вычисляются независимым способом по решению вспомогательной задачи. Остаточные отрезки разложений $F_{3,N}(\varphi_{p-1})$, $S_{3,N}(\varphi_{p-1})$ и функционал $D^{ij}(\varphi_{p-1})$ вычисляются по функции распределения, найденной на предыдущей итерации $p-1$.

В методе квазидиффузии [12] (первый и один из лучших методов рассматриваемой группы) вспомогательная задача низкой размерности для

независимого вычисления $\Phi_{0,(p-1/2)}$ и $\Phi_{1,(p-1/2)}^i$ составляется из уравнений для угловых моментов (10), (11), (15) и алгебраического уравнения (17)

$$\begin{cases} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_{0,(p-1/2)}}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_{1,(p-1/2)}^i}{\partial r^i} + \Sigma_0 \Phi_{0,(p-1/2)} = Q_0, & (\mathbf{r} \in V), \\ \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_{1,(p-1/2)}^i}{\partial t} + \frac{\partial [D^{ij}(\varphi_{p-1}) \Phi_{0,(p-1/2)}]}{\partial r^j} + \Sigma_1 \Phi_{1,(p-1/2)}^i = Q_1^i, \end{cases} \quad (18)$$

$$-n_i \Phi_{1,(p-1/2)}^i(\mathbf{r}_\Gamma, t) + \frac{1 - \chi(\varphi_{p-1})}{1 + \chi(\varphi_{p-1})} A(\varphi_{p-1}) \Phi_{0,(p-1/2)}(\mathbf{r}_\Gamma, t) = \frac{B(\mathbf{r}_\Gamma, t)}{1 + \chi(\varphi_{p-1})}.$$

Система линейных уравнений (18) замкнута. Входящие в нее нормированные (дробно-линейные) функционалы $D^{ij}(\varphi)$, $\chi(\varphi)$, $A(\varphi)$ вычисляются по φ_{p-1} . Схема одного шага итераций при решении методом квазидиффузии стационарной задачи приведена на Рис. 2.

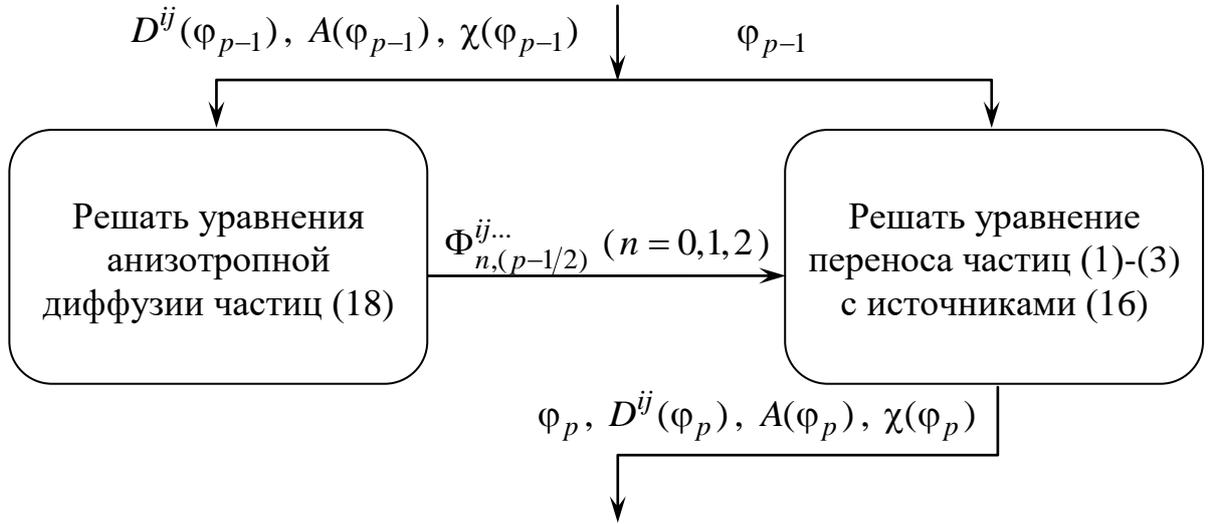


Рис. 2. Обмен данными на шаге итераций между вспомогательной и основной задачами в методе квазидиффузии. Решается стационарная проблема нахождения функции распределения частиц.

Нормированные функционалы слабо зависят от вариаций распределения частиц и сходятся к истинным значениям гораздо быстрее моментов $\Phi_n^{ij...}(\varphi)$ – линейных функционалов. Именно это обстоятельство обеспечивает сильное ускорение сходимости совместных итераций основной и вспомогательной задач. Если положить $\partial \Phi_1^i / \partial t \approx 0$, $D^{ij}(\varphi) \approx D^{ij}(1) = \delta^{ij}/3$, $\chi = 0$ (граница с вакуумом), $A(\varphi) \approx A(1) = 1/2$, то (18) переходит в уравнения диффузионного

приближения для переноса частиц. Отсюда появилось название – метод квазидиффузии.

В других методах [13], [14], [17]-[19] уравнения вспомогательной задачи низкой размерности для независимого вычисления угловых моментов низкого порядка формулируются другими способами. Часто их получают из дискретных уравнений разностной схемы уравнения переноса частиц (1) и граничного условия (3) интегрированием по угловым переменным в пределах единичной сферы, двух полусфер или октантов сферы. В разложении источников (16) независимо вычисляемые моменты нулевого и первого порядков записывают в форме итерационных поправок. Моменты второго порядка обычно не вычисляют, а включают их в остаточные отрезки рядов $F_{2,N}(\varphi_{p-1})$, $S_{2,N}(\varphi_{p-1})$.

Достоинства методов ускорения внутренних итераций с помощью решения вспомогательной задачи низкой размерности:

(а) универсальность, широта применимости – итерации сходятся, в том числе при решении «тяжелых» задач с преобладающим рассеянием частиц (если конечно задача имеет решение, см. замечание во введении);

(б) быстрая сходимость итераций. Например, метод квазидиффузии обеспечивает точность сходимости, достаточную для численного моделирования практических проблем за 1-4 итерации [12], [15], [16];

(в) экономия памяти компьютера для хранения данных при решении нестационарных задач. Пункт применим для метода квазидиффузии. Пусть прикладная проблема требует находить только угловые моменты функции распределения $\Phi_n^{ij\dots}$ ($0 \leq n \leq N$). Задача (18) использует для нахождения главных моментов $\Phi_{n,(p-1)/2}^{ij\dots}$ ($n = 0, 1, 2$) уточняемые не зависящие от Ω значения нормированных функционалов D^{ij} , A , χ , поставляемые задачей (1)-(3). Пользуясь слабой зависимостью функционалов от φ , поменяем акцент важности задач и заменим задачу (1)-(3) приближенной стационарной задачей ($\partial\varphi/\partial t = 0$) или задачей для λ -режима ($\partial\varphi/\partial t \approx \lambda\varphi$, $\lambda(\mathbf{r}, t) = \partial \ln \Phi_0 / \partial t$). Тогда отпадает необходимость в хранении многомерных распределений частиц с предыдущей итерации $\varphi_{p-1}(\mathbf{r}, \Omega, t)$ и с предыдущего шага по времени $\varphi(\mathbf{r}, \Omega, t - \tau)$, τ – величина шага. В случае относительно небольшого шага τ можно вообще обойтись без итераций.

Недостатки методов:

(а) Вспомогательная задача имеет гиперболический тип или параболический тип ($\partial\Phi_1^i/\partial t \approx 0$) в пространстве $E_4 = \mathbf{r} \times t$, или эллиптический тип ($\partial\Phi_0/\partial t \approx 0$, $\partial\Phi_1^i/\partial t \approx 0$) в пространстве E_3 . В результате дискретизации уравнений вспомогательной задачи *низкой размерности* по угловым переменным возникает система алгебраических уравнений *большой размерности* по про-

пространственным переменным. Для ее решения применяются «свои» итерационные методы вычислительной алгебры: прогонки по направлениям [15], методы расщепления [17], [18], метод трехслойной экстраполяции многочленами Чебышева, метод минимальных невязок и другие [21]-[23]. Исключение составляют задачи с плоской, цилиндрической или сферической пространственной симметрией. В них размерность системы алгебраических уравнений невелика. Решение можно искать прямыми методами: алгоритмом исключения Гаусса с выбором максимального элемента или алгоритмом прогонки – экономичным алгоритмом «бегущего счета» для трехдиагональных матриц.

(б) Относительная сложность реализации методов в компьютерном коде в сравнении с методом простых итераций.

Несмотря на недостаток (а) (при решении многомерных задач), суммарная эффективность методов остается высокой.

Система четно-нечетных уравнений переноса частиц. Наряду с обычной формулировкой уравнения переноса частиц (1), (2) иногда удобно пользоваться эквивалентной формулировкой в виде системы четно-нечетных уравнений переноса. Впервые четно-нечетные уравнения были записаны и применены в [5], [24]. Введем четную φ^+ и нечетную φ^- части функции распределения относительно направления полета частиц Ω :

$$\varphi^\pm(\Omega, \mathbf{r}, t) = \frac{\varphi(\Omega, \mathbf{r}, t) \pm \varphi(-\Omega, \mathbf{r}, t)}{2}, \quad \varphi(\Omega, \mathbf{r}, t) = \varphi^+(\Omega, \mathbf{r}, t) + \varphi^-(\Omega, \mathbf{r}, t). \quad (19)$$

Интегро-дифференциальные уравнения для четной и нечетной частей функций распределения следуют из уравнения (1) в результате сложения и вычитания с этим же уравнением, записанным для противоположного пучка частиц:

$$\begin{cases} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma \right] \varphi^+ + \Omega^i \frac{\partial \varphi^-}{\partial r^i} = F^+(\varphi^+) + Q^+, \\ \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma \right] \varphi^- + \Omega^i \frac{\partial \varphi^+}{\partial r^i} = F^-(\varphi^-) + Q^-, \end{cases} \quad (20)$$

$$F^\pm(\varphi^\pm) = \frac{F(\Omega, \mathbf{r}, t) \pm F(-\Omega, \mathbf{r}, t)}{2} = \frac{v(\mathbf{r}, t) \Sigma^s(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \int_{4\pi} W^\pm(\Omega \Omega', \mathbf{r}, t) \varphi^\pm(\Omega', \mathbf{r}, t) d\Omega',$$

$$\begin{cases} W^\pm(\eta, \mathbf{r}, t) \\ Q^\pm(\Omega, \mathbf{r}, t) \end{cases} = \frac{1}{2} \begin{cases} W(\eta, \mathbf{r}, t) \pm W(-\eta, \mathbf{r}, t) \\ Q(\Omega, \mathbf{r}, t) \pm Q(-\Omega, \mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (\eta = \Omega \Omega').$$

Вследствие свойств четности распределений φ^\pm и источников F^\pm , Q^\pm их разложения (5), (8) содержат только четные или только нечетные гармоники:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} \varphi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \\ F^+(\varphi^+) \\ Q^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+1}{4\pi} \left\{ \begin{array}{l} \Phi_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m} \Phi_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ Q_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} P_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) = \\ & \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+1}{4\pi} \left\{ \begin{array}{l} M_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m} M_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m} \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+1}{4\pi a_{2m}} \left\{ \begin{array}{l} M_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m} M_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} P_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}), \\ & \left\{ \begin{array}{l} \varphi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \\ F^-(\varphi^-) \\ Q^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+3}{4\pi} \left\{ \begin{array}{l} \Phi_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m+1} \Phi_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ Q_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} P_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) = \\ & \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+3}{4\pi} \left\{ \begin{array}{l} M_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m+1} M_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m+1} \approx \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4m+3}{4\pi a_{2m+1}} \left\{ \begin{array}{l} M_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ v\Sigma^s \omega_{2m+1} M_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ H_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} P_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}). \end{aligned}$$

Входящие сюда угловые моменты четного порядка можно вычислять по четным распределениям, а нечетного порядка – по нечетным. Например,

$$\left[\begin{array}{l} \Phi_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right] = \int_{4\pi} \left[\begin{array}{l} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m} \\ \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m+1} \end{array} \right] \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega} \equiv \int_{4\pi} \left[\begin{array}{l} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m} \varphi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \\ \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m+1} \varphi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) \end{array} \right] d\mathbf{\Omega}.$$

Отметим, что уравнения для угловых моментов четного порядка, в частности скалярное уравнение (10), есть следствия первого (четного) уравнения системы (20). Уравнения для угловых моментов нечетного порядка, в частности векторное уравнение (11), суть следствия второго (нечетного) уравнения.

Граничное условие. Пусть вектор $\mathbf{\Omega}$ ориентирован по отношению к поверхности следующим образом $\mathbf{\Omega} \mathbf{n} < 0$. Данная полусфера направлений совпадает с направлениями пучков частиц, двигающихся от границы вглубь

тела. Для них справедливо условие (3) в неизменном виде. Если вектор $\mathbf{\Omega}$ ориентирован противоположным образом $\mathbf{\Omega}\mathbf{n} > 0$, то в записи условия (3) следует выполнить замену $\mathbf{\Omega} \rightarrow -\mathbf{\Omega}$.

Введем коэффициент «отражения назад», равный отношению интенсивности пучка, отраженного от границы внутрь тела в направлении $\mathbf{\Omega}$ к интенсивности падающего на границу пучка противоположного направления $-\mathbf{\Omega}$:

$$\gamma(\varphi) = \gamma(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathbf{\Omega}'\mathbf{n} > 0} T(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \varphi(\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}_\Gamma, t) d\mathbf{\Omega}' / \varphi(-\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0 \\ \int_{\mathbf{\Omega}'\mathbf{n} < 0} T(\mathbf{\Omega}' \rightarrow -\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) \varphi(\mathbf{\Omega}', \mathbf{r}_\Gamma, t) d\mathbf{\Omega}' / \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} > 0 \end{array} \right\}.$$

Коэффициент суть нормированный функционал, который относительно слабо меняется при вариациях распределения частиц. Запишем граничное условие (3) в терминах коэффициента отражения и четно-нечетных распределений (19)

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \gamma \cdot \varphi(-\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) + \varphi^{ent}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0 \\ \varphi(-\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \gamma \cdot \varphi(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) + \varphi^{ent}(-\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} > 0 \end{array} \right\},$$

$$\text{или} \left\{ \begin{array}{l} \varphi^+(\mathbf{\Omega}) + \varphi^-(\mathbf{\Omega}) = \gamma \cdot [\varphi^+(\mathbf{\Omega}) - \varphi^-(\mathbf{\Omega})] + \varphi^{ent}(\mathbf{\Omega}), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} < 0 \\ \varphi^+(\mathbf{\Omega}) - \varphi^-(\mathbf{\Omega}) = \gamma \cdot [\varphi^+(\mathbf{\Omega}) + \varphi^-(\mathbf{\Omega})] + \varphi^{ent}(-\mathbf{\Omega}), \quad \mathbf{\Omega}\mathbf{n} > 0 \end{array} \right\},$$

$$\text{или} -\frac{\mathbf{n}\mathbf{\Omega}}{|\mathbf{n}\mathbf{\Omega}|} \varphi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} \varphi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \frac{\varphi_0^{ent}(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}_\Gamma, t)}{1+\gamma}. \quad (21)$$

Функция φ_0^{ent} определена в (13). Граничное условие суть условие смешанного типа (сравни с (15)). Значения коэффициента отражения $\gamma(\varphi)$ уточняются при выполнении итераций. Если тело граничит с вакуумом, то $\gamma = 0$.

Характеристическая форма. Система четно-нечетных уравнений (20), (21) допускает запись в 1-ой характеристической форме

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma \right] \varphi^+ + \frac{\partial \varphi^-}{\partial l} = F^+(\varphi^+) + Q^+ \\ \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma \right] \varphi^- + \frac{\partial \varphi^+}{\partial l} = F^-(\varphi^-) + Q^- \end{array} \right. \quad (22)$$

$$\Phi_{in}^- + \frac{1-\gamma_{in}}{1+\gamma_{in}} \Phi_{in}^+ = \frac{\Phi_{0,in}^{ent}}{1+\gamma_{in}}, \quad -\Phi_{out}^- + \frac{1-\gamma_{out}}{1+\gamma_{out}} \Phi_{out}^+ = \frac{\Phi_{0,out}^{ent}}{1+\gamma_{out}}, \quad (23)$$

где индексом *in* обозначены величины, относящиеся к точке входа характеристики в тело, индексом *out* – к точке выхода из тела (Рис. 1).

Приближение коллинеарного рассеяния. Аппроксимируем индикатрису рассеяния индикатрисой коллинеарного рассеяния частиц вперед-назад

$$W(\eta, \mathbf{r}, t) \approx \frac{1+\omega_1}{2} \delta(\eta-1) + \frac{1-\omega_1}{2} \delta(\eta+1), \quad \begin{cases} W^+(\eta) \\ W^-(\eta) \end{cases} \approx \frac{1}{2} \begin{cases} \delta(\eta-1) + \delta(\eta+1) \\ \omega_1 [\delta(\eta-1) - \delta(\eta+1)] \end{cases}.$$

Система четно-нечетных уравнений (20) перейдет в приближенную систему

$$\begin{cases} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_0 \right] \Phi^+ + \Omega^i \frac{\partial \Phi^-}{\partial r^i} = Q^+, & \Sigma_0 = \Sigma - v \Sigma^s, \\ \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \Phi^- + \Omega^i \frac{\partial \Phi^+}{\partial r^i} = Q^-, & \Sigma_1 = \Sigma - \omega_1 v \Sigma^s, \end{cases} \quad (24)$$

где сечения Σ_0 и Σ_1 равны сечениям в уравнениях для угловых моментов (10) и (11). Система (24) не содержит собственных источников частиц $F^\pm(\phi^\pm)$ и для ее решения не требуется выполнять итерации по значениям этих источников. Если проинтегрировать уравнения по телесному углу с весами 1 и Ω^i , то мы получим уравнения для угловых моментов, формально совпадающие с (10) и (11). В действительности векторное уравнение, конечно отличается от (11). Дело в том, что уравнения (10) и (11) не составляют замкнутую систему относительно Φ_0 и Φ_1^i . Входящий в (11) центральный момент второго порядка $M_2^{ij}(\phi^+)$ вычисляется по истинному распределению ϕ^+ и в общем случае он не равен моменту $M_2^{ij}(\phi^+)$, который вычислен по приближенному распределению ϕ^+ . Моменты будут близки в двух случаях: в пределе слабого рассеяния-размножения частиц $v \Sigma^s \ll \Sigma^a$ и в случае, когда распределение частиц близко к изотропному $M_2^{ij}(\phi^+) \approx M_2^{ij}(\phi^+) \approx 0$.

Приближение коллинеарного рассеяния (24) пригодно для моделирования проблем переноса частиц в веществе, если процессы гибели частиц преобладают над процессами их рассеяния и размножения $v \Sigma^s \leq \Sigma^a$.

2. Модельные кинетические уравнения

Модельные распределения. Введем четное и нечетное модельные распределения частиц $\psi^\pm(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) = \pm\psi^\pm(-\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t)$, которые отличаются от истинных четно-нечетных распределений (19), но имеют одинаковую с ними нормировку

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \psi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega} &= \Psi_0(\mathbf{r}, t) = \Phi_0(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} \varphi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \\ \int_{4\pi} \Omega^i \psi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega} &= \Psi_1^i(\mathbf{r}, t) = \Phi_1^i(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} \Omega^i \varphi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}. \end{aligned} \quad (25)$$

где $\Psi_0 = \Phi_0$, и $\Psi_1^i = \Phi_1^i$ – скалярные и векторные угловые моменты. Остальные моменты модельных распределений определим обычным образом (6)

$$\Psi_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m} \psi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \quad N_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} P_{2m}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) \psi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \quad (26)$$

$$\Psi_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} \underbrace{\Omega^i \Omega^j \dots}_{2m+1} \psi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}, \quad N_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{r}, t) = \int_{4\pi} P_{2m+1}^{ij\dots}(\mathbf{\Omega}) \psi^-(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega},$$

$$(m = 0, 1, 2, \dots), \quad (N_0 = \Psi_0 = \Phi_0 = M_0, \quad N_1^i = \Psi_1^i = \Phi_1^i = M_1^i).$$

Степенные $\Psi_n^{ij\dots}$ и центральные $N_n^{ij\dots}$ моменты связаны друг с другом соотношениями, аналогичными (7). По аналогии с (17) выразим тензоры моментов второго порядка через скалярный момент Ψ_0 и нормированный симметричный тензор-функционал $D^{ij}(\psi^+) = C^{ij}$ от модельного распределения

$$\Psi_2^{ij}(\mathbf{r}, t) = D^{ij}(\psi^+) \Psi_0(\mathbf{r}, t) = C^{ij} \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad N_2^{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{3C^{ij} - \delta^{ij}}{2} \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (27)$$

$$D^{ij}(\psi^+) = C^{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{\int_{4\pi} \Omega^i \Omega^j \psi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}}{\int_{4\pi} \psi^+(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{\Omega}}.$$

Обозначение тензора-функционала другой буквой C^{ij} здесь и далее применяется при краткой записи, в которой опускается аргумент функционала ψ^+ .

Модельные кинетические уравнения. Будем находить модельные распределения ψ^\pm из системы четно-нечетных кинетических уравнений

$$\begin{cases} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_0 \right] \Psi^+ + \Omega^i \frac{\partial \Psi^-}{\partial r^i} = \frac{Q_0}{4\pi}, \\ G \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \Psi^- + \Omega^j \frac{\partial \Psi^+}{\partial r^j} = \frac{3\Omega^l}{4\pi} [C^{kl} D_{jk} Q_1^j + K^l], \end{cases} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_0 &= \Sigma - v\Sigma^s = \Sigma^a + [1 - v]\Sigma^s \quad \langle 0, & \Sigma_1 &= \Sigma - \omega_1 v \Sigma^s = \Sigma^a + [1 - \omega_1 v]\Sigma^s \quad > 0, \\ G &= [5D_{ik} C^{jk} \Omega^i \Omega^j - D_{pq} C^{pq}] / 2 \quad \langle 0, & D_{kj} D^{ik} &= D^{ik} D_{kj} = \delta_j^i. \end{aligned}$$

Система (28) отличается от системы четно-нечетных уравнений (20) для истинных распределений φ^\pm коэффициентами, источниками и наличием слабой нелинейности. Большую схожесть она имеет с уравнениями приближения коллинеарного рассеяния (24). Сечения Σ_0 и Σ_1 равны сечениям в моментных уравнениях (10) и (11). Нормированный функционал $G(\varphi^+, \psi^+) = G(\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, t)$ вычисляется через компоненты единичного вектора, тензор $C^{ik} = D^{ik}(\psi^+)$ и симметричный положительный котензор $D_{ij}(\varphi^+)$ (обратный тензор) тензора $D^{ij}(\varphi^+)$. Если тензоры моментов второго порядка истинного и модельного распределений равны $\Phi_2^{ij} = \Psi_2^{ij}$ ($D^{ij} = C^{ij}$), то функционал равен единице $G = 1$. Величины Q_0 и Q_1^i суть скалярный и векторный моменты стороннего источника (8), $K^i(\mathbf{r}, t)$ – корректирующий угловой момент.

Нетрудно увидеть, что вследствие нормировки (25) первое (четное) уравнение системы (28) согласовано с уравнением (10) для угловых моментов Φ_0 , Φ_1^i , т.е. из четного уравнения следует (10) в результате интегрирования по телесному углу. Согласуем второе (нечетное) уравнение (28) с уравнением (11) для моментов Φ_1^i , Φ_2^{ij} . Подберем корректирующий момент $K^i(\mathbf{r}, t)$ так, чтобы результат интегрирования нечетного уравнения с весом Ω^i давал (11):

$$\int_{4\pi} \Omega^i G(\mathbf{\Omega}) \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \Psi^- d\mathbf{\Omega} + \int_{4\pi} \Omega^i \Omega^j \frac{\partial \Psi^+}{\partial r^j} d\mathbf{\Omega} = C^{ik} D_{jk} Q_1^j + K^i.$$

Пользуясь определением моментов (26), (27), запишем соотношение в виде

$$\frac{5}{2} D_{jl} C^{kl} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \Psi_3^{ijk} - \frac{D_{pq} C^{pq}}{2} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \Psi_1^i + \frac{\partial [C^{ij} \Psi_0]}{\partial r^j} = C^{ik} D_{jk} Q_1^j + K^i,$$

$$\text{или } D_{jk}C^{ik} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial \Psi_1^j}{\partial t} + \Sigma_1 \Psi_1^j - Q_1^j \right] + D_{jl}C^{kl} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] N_3^{ijk} + \frac{\partial [C^{ij} \Psi_0]}{\partial r^j} = K^i.$$

Применяя равенство

$$\frac{\partial [C^{il} \Psi_0]}{\partial r^l} = \frac{\partial [C^{ik} D_{jk} D^{jl} \Psi_0]}{\partial r^l} = C^{ik} D_{jk} \frac{\partial [D^{jl} \Psi_0]}{\partial r^l} + D^{jl} \Psi_0 \frac{\partial [C^{ik} D_{jk}]}{\partial r^l}$$

и формулы (17), (27), получим

$$D_{jk}C^{ik} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi_1^j}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_2^{jl}}{\partial r^l} + \Sigma_1 \Phi_1^j - Q_1^j \right] + \\ + D^{jl} \frac{\partial [C^{ik} D_{jk}]}{\partial r^l} \Psi_0 + D_{jl}C^{kl} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] N_3^{ijk} = K^i.$$

Из последнего следует (11), если задать корректирующий момент как

$$K^i(\psi^\pm, \varphi^+) = K^i(\mathbf{r}, t) = D^{jl} \frac{\partial [C^{ik} D_{jk}]}{\partial r^l} \Psi_0 + D_{jl}C^{kl} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] N_3^{ijk}. \quad (29)$$

Момент K^i выражается через скалярный момент Ψ_0 , центральный момент третьего порядка N_3^{ijk} и нормированные тензоры $D_{ij}(\varphi^+)$, $D^{ij}(\psi^+) = C^{ij}$.

Граничное условие. На внешней границе тела на решения системы модельных кинетических уравнений (28) наложим условие

$$-\frac{\mathbf{n}\Omega}{|\mathbf{n}\Omega|} \psi^-(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) + \frac{1 - \chi(\varphi)}{1 + \chi(\varphi)} \frac{A(\varphi^+)}{A(\psi^+)} \psi^+(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t) = \frac{\varphi_0^{ent}(\Omega, \mathbf{r}_\Gamma, t)}{1 + \chi(\varphi)}. \quad (30)$$

Функционалы A , χ и функция φ_0^{ent} определяются формулами (12)-(14). В сравнении с условием (21) для истинных распределений здесь функционал χ не зависит от Ω и имеет смысл среднего коэффициента отражения поверхности. Результат интегрирования (30) по телесному углу с весом $|\mathbf{n}\Omega|$ воспроизводит граничное условие (15), связывающее угловые моменты Φ_0 и Φ_1^i .

Свойства модельных уравнений. (а) Из системы модельных уравнений (28) и граничного условия (30) следуют уравнения (10), (11), (15), связывающие угловые моменты Φ_0 , Φ_1^i , Φ_2^{ij} истинного распределения частиц. Поэтому скалярный Φ_0 и векторный Φ_1^i моменты можно вычислять по решению системы ψ^\pm пользуясь формулами нормировки распределений (25).

(б) Первое уравнение системы (28) не содержит собственных источников частиц и является линейным дифференциальным уравнением. Второе уравнение, являясь нелинейным интегро-дифференциальным уравнением, во многом проявляет свойства линейного дифференциального уравнения. Нормированные функционалы $C^{ik} = D^{ik}(\psi^+)$, $G(\varphi^+, \psi^+)$, $A(\psi^+)$ (они входят в коэффициенты уравнения) слабо меняются как при локальных вариациях ψ^+ , так и в пространстве-времени. Корректирующий момент K^i (29) (он формирует собственный интегральный источник частиц) относительно мал вследствие малости производных $\partial[C^{ik} D_{jk}]/\partial r^l \approx 0$, где $C^{ik} D_{jk} \sim \delta_j^i$, и малости свертки $D_{jl} C^{kl} N_3^{ijk}$, где $D_{jl} C^{kl} \sim \delta_j^k$, $\delta_j^k N_3^{ijk} = 0$. (При решении многих практических задач возможно использование приближения $K^i \approx 0$.) Поэтому решение системы ψ^\pm можно находить с помощью *простых итераций*, т.к. они быстро сходятся.

(в) Система модельных уравнений (28), (30) допускает запись в 1-ой характеристической форме

$$\begin{cases} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_0 \right] \psi^+ + \frac{\partial \psi^-}{\partial l} = \frac{Q_0}{4\pi}, \\ G \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_1 \right] \psi^- + \frac{\partial \psi^+}{\partial l} = \frac{3\Omega^i}{4\pi} [C^{ik} D_{jk} Q_1^j + K^i], \end{cases} \quad (31)$$

$$\psi_{in}^- + \frac{1 - \chi_{in}}{1 + \chi_{in}} \frac{A(\varphi_{in}^+)}{A(\psi_{in}^+)} \psi_{in}^+ = \frac{\Phi_{0,in}^{ent}}{1 + \chi_{in}}, \quad -\psi_{out}^- + \frac{1 - \chi_{out}}{1 + \chi_{out}} \frac{A(\varphi_{out}^+)}{A(\psi_{out}^+)} \psi_{out}^+ = \frac{\Phi_{0,out}^{ent}}{1 + \chi_{out}}. \quad (32)$$

Здесь, как в (23) и на Рис. 1, индексами *in* и *out* обозначены величины, относящиеся к точке входа и к точке выхода характеристики из тела.

Переход к лучевой (характеристической) переменной l понижает размерность пространства, в котором ищется решение на 4 единицы. Вследствие свойства (б) решения из разных пространств (с разных характеристик) связаны друг с другом слабо. (Для сравнения, переход к характеристической форме уравнения переноса (2) или к системе четно-нечетных уравнений в форме (22) тоже понижает размерность пространства на 4. Но, интенсивности пуч-

ков частиц с разных характеристик остаются сильно связанными, если велик собственный источник частиц $F(\varphi)$). Система уравнений (31), (32) имеет гиперболический тип или параболический тип ($\partial\psi^-/\partial t = 0$) в пространстве $E_2 = l \times t$, или эллиптический тип ($\partial\psi^\pm/\partial t = 0$) в пространстве E_1 . В результате дискретизации уравнений возникает система алгебраических уравнений относительно малой размерности. Решение уравнений может быть найдено прямым (без итераций) алгоритмом исключения Гаусса или алгоритмом прогонки. Напомним, что в итерационных методах, использующих вспомогательную задачу низкой размерности по угловым переменным, размерность пространства, в котором ищется решение последней, понижается на 2 единицы (см. недостаток (а) итерационных методов, стр. 14).

3. Метод ускорения итераций с помощью модельных уравнений

Схема метода изображена на Рис. 3. Она аналогична схеме методов, использующих вспомогательную задачу низкой размерности по угловым переменным (Рис. 2) с тем отличием, что вспомогательная задача состоит в решении модельных кинетических уравнений (28)-(30) или тех же уравнений в характеристической форме (31), (32).

Как и ранее, представим разложения собственных источников в виде (16), (17). Индексами p и $p-1$ обозначаются величины, относящиеся к текущей и предыдущей итерации основной задачи (1)-(3); индексами $p-1/2$ и $p-3/2$ – величины, относящиеся к итерациям вспомогательной задачи.

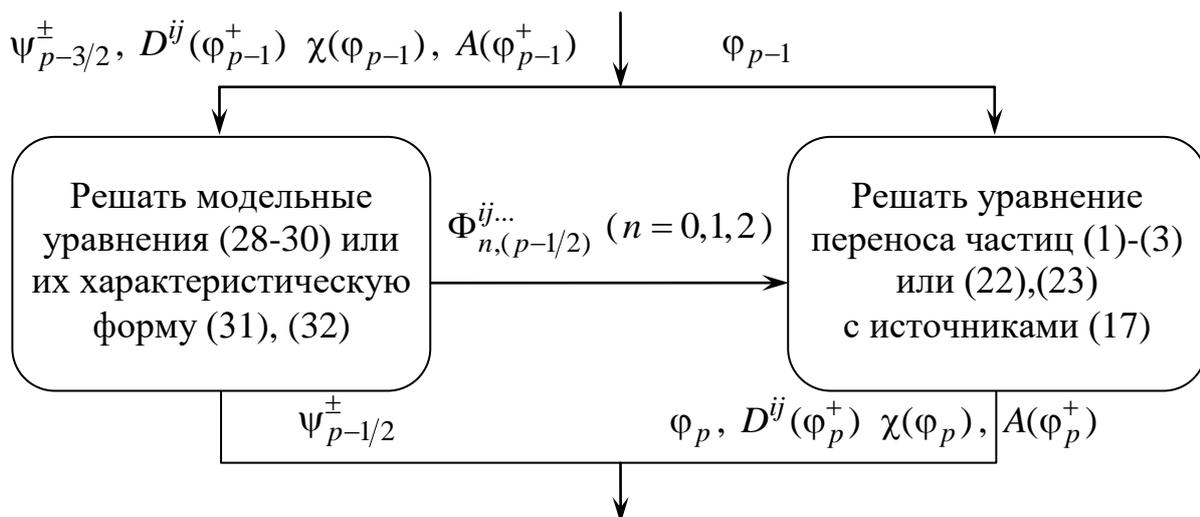


Рис. 3. Обмен данными на шаге итераций между вспомогательной и основной задачами метода модельных уравнений. Решается стационарная проблема нахождения функции распределения частиц.

Пользуясь свойством (а) модельных уравнений (28)-(30) (или (31), (32)), составим из них с помощью замены $\psi^\pm \rightarrow \psi_{p-1/2}^\pm$ систему линейных дифференциальных уравнений в целях независимого расчета $\Phi_{0,(p-1/2)}$, $\Phi_{1,(p-1/2)}^i$, $\Phi_{2,(p-1/2)}^{ij} = D^{ij}(\varphi_{p-1})\Phi_{0,(p-1/2)}$ и ускорения сходимости источников (16). Значения входящих в систему нормированных функционалов $D_{ij}(\varphi_{p-1})$, $D^{ij}(\psi_{p-3/2}^+) = C^{ij}$, $G(\psi_{p-3/2}^+, \varphi_{p-1}^+)$, $\chi(\varphi_{p-1})$, $A(\varphi_{p-1}^+)$, $A(\psi_{p-3/2}^+)$ и малый корректирующий момент $K^i(\psi_{p-3/2}^\pm, \varphi_{p-1}^+)$ берутся с предыдущей итерации.

Решение вспомогательной задачи $\psi_{p-1/2}^\pm$ и его моменты $\Phi_{0,(p-1/2)}$, $\Phi_{1,(p-1/2)}^i$ быстро сходятся к точному решению с ростом p (свойство (б) уравнений). Это обеспечивает быструю общую сходимость совместных итераций основной и вспомогательной задач к своим точным решениям. Для ускорения итераций используются те же нормированные функционалы, что и в методе квазидиффузии [12], [15], [16]. Поэтому мы ожидаем от данного нелинейного метода сопоставимо высокой скорости сходимости итераций.

Если проводить дискретизацию вспомогательной задачи с помощью характеристических схем, то для решения серии систем алгебраических уравнений малой размерности (по системе на характеристику) можно пользоваться алгоритмом исключения Гаусса или алгоритмом прогонки. В целях унификации компьютерного кода дискретизацию основной задачи тоже можно проводить с помощью характеристических схем для уравнения переноса (2) или для четно-нечетных уравнений в форме (22).

4. Характеристическая конечно-аналитическая схема

Дискретизация четно-нечетных уравнений может выполняться разными способами. В данном разделе построена «точная» конечно-аналитическая схема дискретизации системы модельных уравнений (31) и четно-нечетных уравнений (22) на луче-характеристике. Схема использует аналитические формулы решений дифференциальных уравнений внутри ячеек и сшивку решений на границах ячеек. В первых работах [25], [26] конечно-аналитические схемы назывались «точными». Термин конечно-аналитическая схема был введен позднее по аналогии с термином конечно-разностная схема. Последняя строится с помощью сшивки конечных разностей решения на границах ячеек. Изложенный ниже материал базируется на работе автора [27].

Аппроксимация зависимости от времени. Опуская у искомым функций индексы итераций, аппроксимируем производные по времени методом прямых $\partial\psi^\pm/\partial t \approx [\psi^\pm(t) - \psi^\pm(t - \tau)]/\tau$. Тогда на луче $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{\Omega}l$ ($\mathbf{r}_0, \mathbf{\Omega} = \text{const}$) система

модельных уравнений (31) примет формальный вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно $\psi^\pm(l, t)$

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi^-}{\partial l} + \sigma_0 \psi^+ = q^+, & q^+ = \frac{Q_0}{4\pi} + \frac{\psi^+(t-\tau)}{v\tau}, \\ \frac{\partial \psi^+}{\partial l} + \sigma_1 \psi^- = q^-, & q^- = \frac{3\Omega^i}{4\pi} [C^{ik} D_{jk} Q_1^j + K^i] + G \frac{\psi^-(t-\tau)}{v\tau}, \end{cases} \quad (33)$$

$$\sigma_0 = \Sigma_0 + 1/v\tau = \Sigma^a + [1 - v]\Sigma^s + 1/v\tau \quad \langle 0,$$

$$\sigma_1 = G[\Sigma_1 + 1/v\tau] = G[\Sigma^a + [1 - \omega_1 v]\Sigma^s + 1/v\tau] \quad \langle 0,$$

$$G = [5D_{ik} C^{jk} \Omega^i \Omega^j - D_{pq} C^{pq}] / 2 \quad \langle 0, \quad D_{kj} D^{ik} = D^{ik} D_{kj} = \delta_j^i.$$

Зависимость искомым функций ψ^\pm от времени t понимается как параметрическая зависимость, которая проявляется через зависимость от времени коэффициентов, источников и геометрии тела. Граничное условие (32) в точке входа l_{in} и в точке выхода l_{out} характеристики из тела перепишем в виде

$$\theta_{in} \psi_{in}^- + \psi_{in}^+ = \psi_{in}^{ent}, \quad -\theta_{out} \psi_{out}^- + \psi_{out}^+ = \psi_{out}^{ent}, \quad (34)$$

$$\theta_{in,out} = \frac{1 + \chi_{in,out}}{1 - \chi_{in,out}} \frac{A(\psi_{in,out}^+)}{A(\varphi_{in,out}^+)}, \quad \psi_{in,out}^{ent} = \frac{A(\psi_{in,out}^+)}{A(\varphi_{in,out}^+)} \frac{\Phi_{0;in,out}^{ent}}{1 - \chi_{in,out}}. \quad (35)$$

Если исходная задача (31), (32) решается в параболическом приближении $\partial \psi^- / \partial t = 0$, то в коэффициенте σ_1 и нечетном источнике q^- выполняется переход к пределу $\tau \rightarrow \infty$: $\sigma_1 \rightarrow G \Sigma_1$, $q^- \rightarrow 3\Omega^i [C^{ik} D_{jk} Q_1^j + K^i] / 4\pi$. Если решается стационарная задача, то такой переход также выполняется в коэффициенте σ_0 и четном источнике q^+ .

К уравнениям вида (33), (34) приводится и система четно-нечетных кинетических уравнений (22), (23), если поменять обозначения искомым функций $\psi^\pm \rightarrow \varphi^\pm$ и выполнить замену источников и коэффициентов:

$$q^\pm = F^\pm(\varphi^\pm) + Q^\pm + \psi^\pm(t-\tau)/v\tau, \quad \sigma_0 = \Sigma + 1/v\tau > 0, \quad \sigma_1 = \Sigma + 1/v\tau > 0, \quad (36)$$

$$\theta_{in,out} = [1 + \gamma_{in,out}] / [1 - \gamma_{in,out}], \quad \psi_{in,out}^{ent} = \Phi_{0;in,out}^{ent} / [1 - \gamma_{in,out}].$$

Краевая задача на луче-характеристике. Тело, в котором происходит перенос частиц, может быть гетерогенным – состоять из пространственно разделенных зон, заполненных материалами с разными физическими свойствами. На внутренних границах, отделяющих зоны, коэффициенты и источники уравнений могут испытывать конечные разрывы. Разобьем тело V на ячейки V_α , $\alpha = 1, \dots, A$ так, что поверхности разрывов (если такие есть) проходят по границам ячеек. Граница ячейки Γ_α состоит из гладких поверхностей, на которых вектор внешней нормали \mathbf{n}_α меняется непрерывно. Из точек гладкой поверхности ячейка видна под телесным углом 2π , равным половине полного угла 4π . Из точек пересечения поверхностей ячейка видна под углом, который больше числа b_ω и меньше $4\pi - b_\omega$. Границы ячеек, совпадающие с внешней границей тела Γ , будем называть *внешними границами*, а не совпадающие – *внутренними границами* ячейки и тела.

Пусть l_α , ($in \leq \alpha \leq out$) суть лучевые координаты точек пересечения луча с границами ячеек \mathbf{r}_α . Порядок нумерации точек согласован с направлением роста лучевой переменной. На луче противоположного направления $-\Omega$ точки нумеруются в обратном порядке. Направленный отрезок луча $l_{\alpha-1} \leq l \leq l_\alpha$, ($in + 1 \leq \alpha \leq out$) будем называть хордой. Вследствие разрывности коэффициентов и источников системы (33) говорить о ее классическом решении в общем случае можно только на хорде.

(Обобщенным) решением краевой задачи (33)-(35) на луче-характеристике будем называть две непрерывные функции $\psi^\pm(l)$, удовлетворяющие уравнениям (33) на хордах, условиям сшивки

$$\psi^\pm(l_\alpha - 0) = \psi^\pm(l_\alpha + 0) = \psi_\alpha^\pm, \quad (in + 1 \leq \alpha \leq out - 1) \quad (37)$$

на внутренних границах и условию (34), (35) на внешней границе тела.

Классификация хорд. Коэффициенты $\sigma_0(l, t)$, $\sigma_1(l, t)$, (36) четно-нечетных уравнений для истинных распределений частиц всегда больше нуля. Коэффициенты модельных уравнений (33) могут быть положительными и отрицательными. В проблемах переноса фотонов коэффициент σ_0 первого модельного уравнения больше нуля, так как $\nu = 1$. В проблемах переноса нейтронов коэффициент может быть положительным и отрицательным (как и соответствующий коэффициент Σ_0 в уравнении для моментов (10)). Коэффициент $\sigma_1(l, t)$ второго модельного уравнения (33) обычно принимает положительные значения, так как $\Sigma_1 > 0$, а функционал $G = [5D_{ik}C^{jk}\Omega^j\Omega^k - D_{pq}C^{pq}]/2$ варьируется вблизи единицы и не переходит через ноль $G > 0$. Такие задачи переноса нейтронов и фотонов будем называть типичными задачами. Нетипичными или

«аномальными» задачами будем называть задачи, в которых модельное распределение частиц будет чрезмерно сильно отличаться от истинного распределения так, что функционал G и вслед за ним коэффициент σ_1 будут принимать отрицательные значения на отдельных хордах тела – в некоторых ячейках и на некоторой совокупности лучей. (Вопрос о существовании и условиях возникновения аномальных задач оставим открытым).

Исходя из коэффициентов, хорду можно отнести к одному из пяти типов:

- (I) хорды с коэффициентами одного знака $\sigma_0\sigma_1 > 0$, в которых выполняется неравенство $\sigma_0/\sigma_1 > a$ или неравенство $\sigma_1/\sigma_0 > a$, где a ($0 < a \ll 1$) – малое положительное число;
- (II) хорды с коэффициентами разного знака $\sigma_0\sigma_1 < 0$ и неравенством $|\sigma_0/\sigma_1| > a$ или неравенством $|\sigma_1/\sigma_0| > a$;
- (III) вырожденные хорды, в которых $|\sigma_0/\sigma_1| \leq a$ и решение уравнений близко к решению вырожденной системы (33) при $\sigma_0 = 0$;
- (IV) вырожденные хорды, в которых $|\sigma_1/\sigma_0| \leq a$ и решение близко к решению вырожденной системы (33) при $\sigma_1 = 0$;
- (V) дважды вырожденные хорды, в которых решение близко к решению системы (33) при $\sigma_0 = \sigma_1 = 0$.

Для того чтобы удовлетворить и условиям сшивки и граничному условию, поставим в начале и в конце хорды смешанное граничное условие, аналогичное условию на внешней границе (34), но без конкретизации параметров θ_α , ψ_α^{ent}

$$\begin{aligned} \theta_{\alpha-1}\psi^-(l_{\alpha-1}+0) + \psi^+(l_{\alpha-1}+0) &= \psi_{\alpha-1}^{ent}, \\ -\theta_\alpha\psi^-(l_\alpha-0) + \psi^+(l_\alpha-0) &= \psi_\alpha^{ent}. \end{aligned} \quad (in+1 \leq \alpha \leq out) \quad (38)$$

Параметры принимают значения (35), (36), если начало и/или конец хорды лежат на внешней границе тела, т.е. $\alpha-1 = in$ и/или $\alpha = out$. Если начало и/или конец хорды лежат на внутренней границе ячейки, то будем переходить в этих точках к частному случаю условия (38) – условию Дирихле. Если хорда начинается на внутренней границе ячейки, то параметрам присваиваются значения

$$\theta_{\alpha-1} = 0, \quad \psi_{\alpha-1}^{ent} = \psi^+(l_{\alpha-1}-0) \quad (in+2 \leq \alpha \leq out). \quad (39)$$

Тогда (38) переходит в условие $\psi^+(l_{\alpha-1}+0) = \psi^+(l_{\alpha-1}-0)$. Если хорда заканчивается на внутренней границе, то полагаем

$$\theta_\alpha = 0, \quad \psi_\alpha^{ent} = \psi^+(l_\alpha+0) \quad (in+1 \leq \alpha \leq out-1).$$

Тогда (38) переходит в условие $\psi^+(l_\alpha - 0) = \psi^+(l_\alpha + 0)$. Тем самым мы удовлетворяем условия сшивки (37) в части четных распределений. Далее мы увидим, что сшивка на внутренних границах нечетных распределений $\psi^-(l_\alpha - 0) = \psi^-(l_\alpha + 0)$ даст замкнутые уравнения конечно-аналитической схемы на луче.

Исключение из правил сделаем для вырожденной хорды (IV) ($\sigma_1 \approx 0$), начало и конец которой лежат на внутренней границе ячейки. Для таких хорд задача Дирихле решения не имеет. Поэтому в этих точках мы будем ставить условия Неймана, присваивая параметрам значения

$$\theta_{\alpha-1}, \theta_\alpha \rightarrow \infty, \quad \psi_{\alpha-1}^{ent} = \theta_{\alpha-1} \psi^-(l_{\alpha-1} - 0), \quad \psi_\alpha^{ent} = -\theta_\alpha \psi^-(l_\alpha + 0). \quad (40)$$

Тогда в начале и конце хорды (IV), пересекающей внутренние границы ячеек, условия (38) перейдут в условия сшивки (37) для нечетных распределений.

Решение на хорде. Введем на рассматриваемом луче-характеристике безразмерную лучевую координату – так называемую оптическую толщину

$$\xi(l, t) = \xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, t) = \int_0^l \sigma(\mathbf{r}', t) dl', \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r}_0 + \boldsymbol{\Omega} l',$$

$$\sigma(\mathbf{r}, t) = \left\{ \begin{array}{l} \sqrt{|\sigma_0 \sigma_1|}, \quad \text{хорды (I) и (II)} \\ |\sigma_1|, \quad \text{вырожденная хорда (III)} \\ |\sigma_0|, \quad \text{вырожденная хорда (IV)} \end{array} \right\}, \quad \sigma > 0. \quad (41)$$

Здесь σ – положительный коэффициент, равный геометрическому среднему $|\sigma_0|$ и $|\sigma_1|$ на хордах (I) и (II). На вырожденных хордах полагаем $\sigma = |\sigma_{1,0}|$. В терминах оптической толщины система (33) становится системой обыкновенных дифференциальных уравнений с (почти) постоянными коэффициентами

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi^-}{\partial \xi} + \frac{\sigma_0}{\sigma} \psi^+ = \frac{q^+}{\sigma}, \\ \frac{\partial \psi^+}{\partial \xi} + \frac{\sigma_1}{\sigma} \psi^- = \frac{q^-}{\sigma}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \sigma_0/\sigma \approx \text{const}, \\ \sigma_1/\sigma \approx \text{const}. \end{array} \quad (42)$$

В самом деле, из формул (33), (36) следует, что на невырожденных хордах (I) и (II) коэффициенты меняются подобно или почти подобно друг другу. Пусть на хордах (I) и (II) производные отношения коэффициентов удовлетворяют хотя бы одному из неравенств

$$\left| \frac{\partial}{\partial l} \left[\frac{\sigma_0(l,t)}{\sigma_1(l,t)} \right] \right| \leq b_\alpha \sigma_1(l,t), \quad \text{или} \quad \left| \frac{\partial}{\partial l} \left[\frac{\sigma_1(l,t)}{\sigma_0(l,t)} \right] \right| \leq b_\alpha \sigma_0(l,t), \quad \mathbf{r} \in V_\alpha, \quad (43)$$

где b_α ($0 < b_\alpha < 0.3$) малая постоянная. Во многих задачах выполнения необременительного условия (43) можно добиться некоторым уменьшением размера ячеек и/или шага по времени.

Введем на хорде $\xi_{\alpha-1} \leq \xi \leq \xi_\alpha$ элементарные функции:

$$s_\alpha^l(\xi) = \frac{\sigma_1(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh(\xi - \xi_{\alpha-1})}{\sin(\xi - \xi_{\alpha-1})} \right\} + \theta_{\alpha-1} \left\{ \frac{\cosh(\xi - \xi_{\alpha-1})}{\cos(\xi - \xi_{\alpha-1})} \right\}, \quad \frac{\partial s_\alpha^l}{\partial \xi} \approx \frac{\sigma_1}{\sigma} c_\alpha^l, \quad (44)$$

$$s_\alpha^r(\xi) = \frac{\sigma_1(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh(\xi_\alpha - \xi)}{\sin(\xi_\alpha - \xi)} \right\} + \theta_\alpha \left\{ \frac{\cosh(\xi_\alpha - \xi)}{\cos(\xi_\alpha - \xi)} \right\}, \quad \frac{\partial s_\alpha^r}{\partial \xi} \approx -\frac{\sigma_1}{\sigma} c_\alpha^r,$$

$$c_\alpha^l(\xi) = \left\{ \frac{\cosh(\xi - \xi_{\alpha-1})}{\cos(\xi - \xi_{\alpha-1})} \right\} + \theta_{\alpha-1} \frac{\sigma_0(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh(\xi - \xi_{\alpha-1})}{\sin(\xi - \xi_{\alpha-1})} \right\}, \quad \frac{\partial c_\alpha^l}{\partial \xi} \approx \frac{\sigma_0}{\sigma} s_\alpha^l,$$

$$c_\alpha^r(\xi) = \left\{ \frac{\cosh(\xi_\alpha - \xi)}{\cos(\xi_\alpha - \xi)} \right\} + \theta_\alpha \frac{\sigma_0(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh(\xi_\alpha - \xi)}{\sin(\xi_\alpha - \xi)} \right\}, \quad \frac{\partial c_\alpha^r}{\partial \xi} \approx -\frac{\sigma_0}{\sigma} s_\alpha^r,$$

$$\frac{1}{e_\alpha(\xi)} = s_\alpha^l(\xi) c_\alpha^r(\xi) + s_\alpha^r(\xi) c_\alpha^l(\xi) = \frac{\sigma_1(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh \Delta \xi_\alpha}{\sin \Delta \xi_\alpha} \right\} +$$

$$+ [\theta_{\alpha-1} + \theta_\alpha] \left\{ \frac{\cosh \Delta \xi_\alpha}{\cos \Delta \xi_\alpha} \right\} + \theta_{\alpha-1} \theta_\alpha \frac{\sigma_0(\xi)}{\sigma(\xi)} \left\{ \frac{\sinh \Delta \xi_\alpha}{\sin \Delta \xi_\alpha} \right\} \approx \text{const}.$$

Верхняя строка относится к хорде типа (I) ($\sigma_0 \sigma_1 > 0$), нижняя – к хорде (II) ($\sigma_0 \sigma_1 < 0$); $\Delta \xi_\alpha = \xi_\alpha - \xi_{\alpha-1}$ – длина хорды. В формулах для производных поставлены знаки приближенного равенства, т.к. следуя (43), мы пренебрегаем производными отношений коэффициентов. На вырожденной хорде (III) ($\sigma_0 \approx 0$) элементарные функции (44) непрерывно переходят в функции

$$s_\alpha^l(\xi) = \frac{\sigma_1}{\sigma} [\xi - \xi_{\alpha-1}] + \theta_{\alpha-1}, \quad s_\alpha^r(\xi) = \frac{\sigma_1}{\sigma} [\xi_\alpha - \xi] + \theta_\alpha, \quad (45)$$

$$c_{\alpha}^l(\xi) = c_{\alpha}^r(\xi) = 1, \quad \frac{1}{e_{\alpha}} = \theta_{\alpha-1} + \theta_{\alpha} + \frac{\sigma_1}{\sigma} \Delta \xi_{\alpha} = \text{const},$$

где оптическая толщина ξ вычисляется по коэффициенту $\sigma = |\sigma_1|$ (см. (41)). На хорде (IV) ($\sigma_1 \approx 0$) функции (44) переходят в функции

$$s_{\alpha}^l(\xi) = \theta_{\alpha-1}, \quad s_{\alpha}^r(\xi) = \theta_{\alpha}, \quad c_{\alpha}^l(\xi) = 1 + \theta_{\alpha-1} \frac{\sigma_0}{\sigma} [\xi - \xi_{\alpha-1}], \quad (46)$$

$$c_{\alpha}^r(\xi) = 1 + \theta_{\alpha} \frac{\sigma_0}{\sigma} [\xi_{\alpha} - \xi], \quad \frac{1}{e_{\alpha}} = \theta_{\alpha-1} + \theta_{\alpha} + \theta_{\alpha-1} \theta_{\alpha} \frac{\sigma_0}{\sigma} \Delta \xi_{\alpha} = \text{const},$$

где оптическая толщина ξ вычисляется по коэффициенту $\sigma = |\sigma_0|$.

Общее решение краевой задачи (42), (38) на хордах (I)-(IV) имеет вид [27]

$$\psi^{+}(\xi) \approx e_{\alpha}(\xi) \left[s_{\alpha}^r(\xi) [\psi_{\alpha-1}^{ent} + J_{\alpha}^l(\xi)] + s_{\alpha}^l(\xi) [\psi_{\alpha}^{ent} + J_{\alpha}^r(\xi)] \right], \quad (47)$$

$$\psi^{-}(\xi) \approx e_{\alpha}(\xi) \left[c_{\alpha}^r(\xi) [\psi_{\alpha-1}^{ent} + J_{\alpha}^l(\xi)] - c_{\alpha}^l(\xi) [\psi_{\alpha}^{ent} + J_{\alpha}^r(\xi)] \right], \quad (48)$$

$$J_{\alpha}^l(\xi) = \int_{\xi_{\alpha-1}}^{\xi} [s_{\alpha}^l q^{+} + c_{\alpha}^l q^{-}] \frac{d\xi'}{\sigma}, \quad J_{\alpha}^r(\xi) = \int_{\xi}^{\xi_{\alpha}} [s_{\alpha}^r q^{+} - c_{\alpha}^r q^{-}] \frac{d\xi'}{\sigma}, \quad (49)$$

где $\psi_{\alpha-1}^{ent}$ и $J_{\alpha}^l(\xi)$ суть вклады граничных и распределенных источников с отрезка $\xi_{\alpha-1} \leq \xi' < \xi$, а ψ_{α}^{ent} , $J_{\alpha}^r(\xi)$ – вклады источников с отрезка $\xi < \xi' \leq \xi_{\alpha}$. В справедливости (47), (48) можно убедиться подстановкой формул в уравнения (42), (38). Проверка предоставляется читателю. При дифференцировании функций лучевой переменной (44) следует пользоваться условием (43) и пренебрегать производными отношения коэффициентов в сравнении с остальными функциями. На хордах (I), (II) формулы (47), (48) дают приближенное решение, которое сходится к точному решению при уменьшении постоянной b_{α} в (43). Модуль погрешности равномерно стремится к нулю в пределе $b_{\alpha} \rightarrow 0$. При $b_{\alpha} = 0$ приближенные равенства переходят в точные равенства. На вырожденных хордах (III), (IV) решение является точным.

Приведем форму записи общего решения (47), (48) в «исключительном» случае, когда на вырожденной хорде (IV) ставятся условия Неймана (40), (46)

$$\Psi^+(\xi) \approx \frac{\sigma_0}{\sigma \Delta \xi_\alpha} \left[\Psi_{\alpha-1}^- - \Psi_\alpha^- + \frac{J_\alpha^l(\xi)}{\theta_{\alpha-1}} + \frac{J_\alpha^r(\xi)}{\theta_\alpha} \right], \quad (50)$$

$$\Psi^-(\xi) \approx \frac{1}{\Delta \xi_\alpha} \left[[\xi_\alpha - \xi] \left[\Psi_{\alpha-1}^- + \frac{J_\alpha^l(\xi)}{\theta_{\alpha-1}} \right] + [\xi - \xi_{\alpha-1}] \left[\Psi_\alpha^- - \frac{J_\alpha^r(\xi)}{\theta_\alpha} \right] \right],$$

$$\frac{J_\alpha^l(\xi)}{\theta_{\alpha-1}} = \int_{\xi_{\alpha-1}}^{\xi} \left[q^+ + \frac{\sigma_0}{\sigma} [\xi' - \xi_{\alpha-1}] q^- \right] \frac{d\xi'}{\sigma}, \quad \frac{J_\alpha^r(\xi)}{\theta_\alpha} = \int_{\xi}^{\xi_\alpha} \left[q^+ - \frac{\sigma_0}{\sigma} [\xi_\alpha - \xi'] q^- \right] \frac{d\xi'}{\sigma}.$$

Элементы схемы. Построим конечно-аналитическую схему для нахождения решения семейства краевых задач (33), (34), (37) на совокупности лучей-характеристик, пронизывающих тело – по одной задаче на каждую характеристику. Как и другие дискретные схемы (схемы конечных разностей, конечных элементов), конечно-аналитическая схема имеет шаблон. Шаблон есть набор точек, расположенных на гладких участках границы ячейки и внутри ячейки. Точки внутри ячейки будем называть «центральными» точками, точки на внешней границе тела (если ячейка примыкает к границе) – «внешними» точками. Центральные и внешние точки принадлежат шаблону только одной ячейки. Кроме этих точек в шаблоне есть «внутренние» точки, расположенные на гладких участках внутренних границ ячеек и тела. Любая внутренняя точка входит в состав двух шаблонов смежных ячеек.

Через точки шаблонов всех ячеек проходит совокупность лучей, составляющих сетку характеристик. Через одну точку шаблона проходит несколько лучей. Желательно подобрать направление и число лучей так, чтобы обеспечить расчет угловых моментов $\Phi_n^{ij\dots}$, $\Psi_n^{ij\dots}$, $0 \leq n \leq N$ в точке шаблона с точностью, удовлетворяющей требованиям решаемой задачи. Расчет угловых моментов выполняется с помощью квадратурной формулы, определенной на поверхности единичной сферы. Для расчета моментов во всех точках всех шаблонов строится совокупность «типичных» квадратурных формул.

Один луч пересекает границы ячеек в серии точек. Желательно подобрать форму ячеек и разместить точки шаблонов так, чтобы в серии точек было как можно меньше «дополнительных» точек, не являющихся точками шаблонов.

В численном моделировании переноса частиц длинные лучи, пронизывающие тело целиком, принято называть длинными характеристиками. Наилучшими пространственно-угловыми сетками с длинными характеристиками в смысле минимальности числа «дополнительных» точек и минимальности числа «типичных» квадратурных формул являются регулярные сетки, построенные на ячейках правильной симметричной формы. Это правильные тетраэдры, правильные призмы, в основании которых лежит правильный шестиугольник, пря-

моугольник, треугольник, и другие. Однако с помощью регулярных сеток часто не удается передать положение разрывов коэффициентов и источников задачи, а также положение внешней границы тела. Поэтому наряду с регулярными сетками применяются и нерегулярные сетки.

Также в элементы схемы входят формулы, аппроксимирующие интегралы от распределенных источников вдоль лучей $J_\alpha^{l,r}$ (49).

Уравнения конечно-аналитической схемы. Луч $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \Omega l$ пересекает границы ячеек в точках шаблонов и дополнительных точках (если они есть): l_α , $\xi_\alpha = \xi_\alpha(l_\alpha)$ ($in \leq \alpha \leq out$). Решение на хордах дается формулами (47), (48). Напомним, что поставив условие Дирихле (38), (39), мы сшили в точках внутренних границ четные распределения в соответствии с условиями сшивки (37). (Если записать формулу (47) для четного распределения $\psi^+(\xi)$ в начале $\xi_{\alpha-1}$ или в конце ξ_α хорды, то мы воспроизведем (37).) Запишем формулу (48) для нечетного распределения $\psi^-(\xi)$ в начале $\xi_{\alpha-1}$ и в конце ξ_α каждой хорды. Сошьем в точках внутренних границ нечетные распределения, выходящие из соседних хорд $\psi^-(\xi_\alpha - 0) = \psi^-(\xi_\alpha + 0) = \psi_\alpha^-$. В результате мы получим уравнения конечно-аналитической схемы на луче, связывающие значения решения во внутренних точках, в которых луч пересекает внутренние границы ячеек

$$\begin{cases} \psi_\alpha^- = -[e_\alpha^l + k_\alpha^l] \psi_\alpha^+ + R_\alpha^l, \\ \psi_\alpha^- = [e_{\alpha+1}^r + k_{\alpha+1}^r] \psi_\alpha^+ - e_{\alpha+1}^r \psi_{\alpha+1}^+ - R_{\alpha+1}^r, \end{cases} \quad (\alpha = in + 1), \quad (51)$$

$$\begin{cases} \psi_\alpha^- = e_\alpha^l \psi_{\alpha-1}^+ - [e_\alpha^l + k_\alpha^l] \psi_\alpha^+ + R_\alpha^l, \\ \psi_\alpha^- = [e_{\alpha+1}^r + k_{\alpha+1}^r] \psi_\alpha^+ - e_{\alpha+1}^r \psi_{\alpha+1}^+ - R_{\alpha+1}^r, \end{cases} \quad (in + 2 \leq \alpha \leq out - 2),$$

$$\begin{cases} \psi_\alpha^- = e_\alpha^l \psi_{\alpha-1}^+ - [e_\alpha^l + k_\alpha^l] \psi_\alpha^+ + R_\alpha^l, \\ \psi_\alpha^- = [e_{\alpha+1}^r + k_{\alpha+1}^r] \psi_\alpha^+ - R_{\alpha+1}^r, \end{cases} \quad (\alpha = out - 1),$$

где $e_\alpha^{l,r}$, $k_\alpha^{l,r}$, $R_\alpha^{l,r}$ ($in + 1 \leq \alpha \leq out$) – коэффициенты и свободные члены схемы:

$$\begin{aligned} e_\alpha^l &= e_\alpha(\xi_\alpha), & k_\alpha^l &= e_\alpha^l [c_\alpha^l(\xi_\alpha) - 1], & R_\alpha^l &= e_\alpha^l [J_\alpha^l(\xi_\alpha) + \psi_{in}^{ent} \delta_{\alpha, in+1}], \\ e_\alpha^r &= e_\alpha(\xi_{\alpha-1}), & k_\alpha^r &= e_\alpha^r [c_\alpha^r(\xi_{\alpha-1}) - 1], & R_\alpha^r &= e_\alpha^r [J_\alpha^r(\xi_{\alpha-1}) + \psi_{out}^{ent} \delta_{\alpha, out}]. \end{aligned} \quad (52)$$

Уравнения (51) автоматически удовлетворяют условиям на внешней границе (34), т.к. параметры (35), (36) входят в коэффициенты (52) в крайних точках

$\alpha = in + 1, out$. Исключением потоков ψ_{α}^{-} уравнения преобразуются в замкнутую систему алгебраических уравнений относительно ψ_{α}^{+} с квадратной трехдиагональной матрицей $n \times n$, где $n = out - in - 1$ – размерность системы или число внутренних точек сшивки решений. Размерность системы мала.

Если в аномальной задаче на луче встретятся хорды (IV), концы которых лежат на внутренних границах, то уравнения (51) заменяются на уравнения (50)

$$\psi_{\alpha-1}^{+} \approx \frac{\sigma_0}{\sigma \Delta \xi_{\alpha}} \left[\psi_{\alpha-1}^{-} - \psi_{\alpha}^{-} + \frac{J_{\alpha}^r(\xi_{\alpha-1})}{\theta_{\alpha}} \right], \quad \psi_{\alpha}^{+} = \frac{\sigma_0}{\sigma \Delta \xi_{\alpha}} \left[\psi_{\alpha-1}^{-} - \psi_{\alpha}^{-} + \frac{J_{\alpha}^l(\xi_{\alpha})}{\theta_{\alpha-1}} \right],$$

или
$$[\psi_{\alpha}^{+} - \psi_{\alpha-1}^{+}] \approx \frac{\sigma_0}{\sigma \Delta \xi_{\alpha}} \left[\frac{J_{\alpha}^l(\xi_{\alpha})}{\theta_{\alpha-1}} - \frac{J_{\alpha}^r(\xi_{\alpha-1})}{\theta_{\alpha}} \right] = \int_{\xi_{\alpha-1}}^{\xi_{\alpha}} q^{-} \frac{d\xi'}{\sigma}.$$

Последнее суть условие разрешимости задачи Неймана. При выполнении расчета хорды (IV) можно «исключать» из луча – «сжимать» в одну расчетную точку, в которой ставится конечный скачок четного распределения ψ_{α}^{+} .

Нахождение решения. Пусть система алгебраических уравнений (51), (52) разрешима. После расчета распределений ψ_{α}^{\pm} в точках, в которых луч пересекает внутренние границы ячеек, найдем решение в точках внешней границы $\alpha = in, out$, в центральных точках ячеек и в точках континуума луча (если требуется). Восстановление решения выполняется по формулам (47), (48), (50). Аналогичные системы (дискретные краевые задачи на луче) решаются на всех лучах, составляющих пространственно-угловую сетку задачи.

Замечание. Вопрос разрешимости системы (51), (52) тесно связан с существованием классических решений на хордах. Имеет место утверждение. Если луч состоит только из хорд типа (I) и (III) (на них всегда существует единственное решение неоднородной краевой задачи, детали см. в [27]), то система уравнений разрешима алгоритмом прогонки. В самом деле, на хордах (I), (III) выполняются неравенства $e_{\alpha}^{l,r} > 0$, $k_{\alpha}^{l,r} \geq 0$. Эти же неравенства суть достаточное условие устойчивости алгоритма.

Далее в точках шаблонов всех ячеек с помощью квадратурных формул выполняется расчет моментов распределений $\Phi_n^{ij\dots}$, $\Psi_n^{ij\dots}$, уточняются значения нормированных функционалов D_{ij} , C^{ij} , A , χ , γ и собственных источников частиц. На этом шаг итерации заканчивается. Итерации по уточнению моментов, функционалов и источников выполняются до достижения точности, требуемой для решения проблемы.

Заключение

Ожидается, что эффективность изложенного выше нелинейного метода ускорения итераций с помощью решения модельных кинетических уравнений должна быть высокой. Для ускорения итераций используются свойства быстрой сходимости нормированных функционалов, которые хорошо себя зарекомендовали в применениях метода квазидиффузии.

Окончательные суждения о пригодности и эффективности метода в решении проблем переноса нейтронов и фотонов в веществе с преобладающим рассеянием частиц можно будет сделать только после проведения вычислительных экспериментов в целях измерения скорости сходимости.

Список литературы

- [1] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. – М.: Атомиздат, 1960; (<https://www.twirpx.com/file/2501787/>)
Davison B., and Sykes J. B., Neutron transport theory. – Oxford: Clarendon Press, 1958. (<https://www.twirpx.com/file/530751/>)
- [2] Белл Д., Глестон С. Теория ядерных реакторов. – М.: Атомиздат, 1974; (<https://www.twirpx.com/file/59588/>)
Bell G.I., and Glasstone S., Nuclear reactor theory. – New York: Van Nostrand Reinhold, 1970. (<https://www.osti.gov/biblio/4074688>)
- [3] *Shilkov A.V., Generalized multigroup approximation and Lebesgue averaging method in particle transport problems // Transp. Theory and Stat. Physics, 1994, v.23(6), p.781-814.* (<http://arch.neicon.ru/xmlui/handle/123456789/1697260?show=full>)
- [4] *Шильков А.В. Метод лебеговых моментов для решения уравнения переноса нейтронов // Матем. моделирование, 2020, т. 32(5), с. 59-94.* (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=4181>)
- [5] *Владимиров В.С. Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Труды Мат. ин-та им.В.А. Стеклова (МИАН СССР), 1961, т. 61, с. 3-158; (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=tm&paperid=1576>)*
Vladimirov V.S., Mathematical problems in the one-velocity theory of particle transport. – Ontario: Atomic Energy of Canada, 1963. (https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:43103493)
- [6] *Люстерник Л.А. Замечания к численному решению краевых задач уравнения Лапласа и вычислению собственных значений методом сеток // Труды Мат. ин-та им.В.А. Стеклова (МИАН СССР), 1947, т. 20, с. 49-64.* (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?jrnid=tm&wshow=issue&bshow=contents&series=0&year=1947&volume=20>)
- [7] *Карлсон Б., Белл Дж. Решение транспортного уравнения Sn-методом / Труды второй межд. конф. по мирному исп. атомной энергии. Избр. докл. иностр. ученых, т. 3. – М.: Атомиздат, 1959.*
- [8] *Морозов В.Н. О решении кинетических уравнений с помощью Sn-метода / Теория и методы расчета ядерных реакторов. Под ред. Г.И. Марчука, с. 91. – М.: Госатомиздат, 1962. (<https://www.twirpx.com/file/1398223/>)*

- [9] *Reed W.H.*, The effectiveness of acceleration techniques for iterative methods in transport theory // J. Nucl. Sci. and Eng., 1971, v. 45(3), p. 245-254. (http://www.ans.org/pubs/journals/nse/a_19077)
- [10] *Lewis E.E., and Miller W.F. Jr.*, Computational methods of neutron transport. – Wiley-Interscience Publ., 1984. (<https://www.twirpx.com/file/1105219/>)
- [11] *Cefus G.R., and Larsen E.W.*, Stability analysis of coarse-mesh rebalance // J. Nucl. Sci. Eng., 1990, v. 105(1), p. 31-39. (http://www.ans.org/pubs/journals/nse/a_19210)
- [12] *Гольдин В.Я.* Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения. // Ж. выч. мат. и мат. физики. 1964, т. 4(6), с. 1078-1087; (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=7676>)
Gol'din V.Ya., A quasi-diffusion method of solving the kinetic equation // USSR Comp. Math. and Math. Physics, 1964. v. 4(6), p. 136-149. (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0041555364900850>)
- [13] *Лебедев В.И.* О нахождении решений кинетических задач // Ж. выч. мат. и мат. физики, 1966, т. 6(5), с. 895-912; (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=7447>)
Lebedev V.I., On finding solutions of kinetic problems // USSR Comp. Math. and Math. Physics, 1966. v. 6(5), p. 152-177. (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0041555366901200?via%3Dihub>)
- [14] *Alcouffe R.E.*, Diffusion synthetic acceleration methods for the diamond-differenced discrete-ordinates equations // J. Nucl. Sci. and Eng., 1977, v. 64(2), p. 344-355. (http://www.ans.org/pubs/journals/nse/a_27375)
- [15] *Четверушкин Б.Н.* Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. – М.: Наука, 1985. (<https://www.twirpx.com/file/1442442/>)
- [16] *Аристова Е.Н.* Моделирование взаимодействия излучения с веществом. Применение метода квазидиффузии. – Saabrucken: Lambert Acad. Publ., 2011. (<https://www.twirpx.com/file/1348491/>)
- [17] *Волощенко А.М.* КР1-схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в трехмерной геометрии, согласованная с нодальными схемами. I Основные уравнения и численные результаты. II. Метод расщепления для решения P1-системы для ускоряющих поправок // Ж. выч. мат. и мат. физики, 2019, т. 59(3), с. 441-464; т. 59(5), с. 796-821. (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=10863>)
- [18] *Марчук Г.И., Лебедев В.И.* Численные методы в теории переноса нейтронов, 2-изд. – М.: Атомиздат, 1981; (<https://www.twirpx.com/file/1205303/>)
Marchuk G.I., Lebedev V.I., Numerical methods in the theory of neutron transport. – London: Harwood Academic Publ., 1986.
- [19] *Adams M.L., and Larsen E.W.*, Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // J. Progress in Nucl. Energy, 2002, v. 40(1), p. 3-159. (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0149197001000233>)
- [20] *Шильков А.В.* Тензорные разложения углового распределения частиц // Матем. моделирование, 2020, т. 32(3), с. 61-80. (<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=4163>)
- [21] *Wachspress E.L.*, Iterative solution of elliptic systems and applications to the neutron diffusion equations of reactor physics. – Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1968.

- tice-Hall, 1966.
- [22] Деммель Дж., Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. – М.: Мир, 2001; (<http://www.twirpx.com/file/525565/>)
Demmel J.W., Applied numerical linear algebra. – Philadelphia, PA: SIAM, 1997. (<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9781611971446.bm>)
- [23] Varga R.S., Matrix iterative analysis, 2-nd ed. – Heidelberg: Springer-Verlag, 2000. (<https://www.twirpx.com/file/1255791/>)
- [24] Кузнецов Е.С. Об установлении баланса лучистой энергии в поглощающей и рассеивающей атмосфере // Изв. АН СССР, Географ. и Геофиз., 1940, т. 4(6), с. 813-842; Статья приведена в издании Кузнецов Е.С. Избранные научные труды. – М.: Физматлит. 2003. (<https://www.twirpx.com/file/2483095/>)
- [25] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Однородные разностные схемы высокого порядка точности на неравномерных сетках // Ж. выч. мат. и мат. физики, 1961, т.1(3), с.425-440;
(<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=7969>)
Tikhonov A.N., and Samarskii A.A., Homogeneous difference schemes of a high degree of accuracy on non-uniform nets // USSR Comp. Math. and Math. Physics, 1962, v.1(3), p.465-486.
(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0041555363901484?via%3Dihub>)
- [26] Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971.
(<http://eqworld.ipmnet.ru/ru/library/mathematics/numerics.htm>)
- [27] Шильков А.В. О решении линейных эллиптических уравнений второго порядка // Матем. моделирование, 2019, т. 31(6), с. 55-81.
(<http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=4080>)
Shilkov A.V., On solving second-order linear elliptic equations // Math. Models and Comp. Simulations, 2020, v. 12(4), p. 597-612.
(<https://link.springer.com/article/10.1134/S2070048220040171>)