

КР₁-СХЕМА УСКОРЕНИЯ ВНЕШНИХ ИТЕРАЦИЙ ПО ОБЛАСТИ ТЕРМАЛИЗАЦИИ НЕЙТРОНОВ И ПО ИСТОЧНИКУ ДЕЛЕНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ ПОДКРИТИЧЕСКОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ

© 2024 г. А. М. Волощенко^{1,*}¹125047 Москва, Миусская пл., 4, Институт прикладной математики РАН, Россия

*e-mail: volosch@kiam.ru

Поступила в редакцию 07.02.2024 г.

Переработанный вариант 22.02.2024 г.

Принята к публикации 03.04.2024 г.

Для уравнения переноса в трехмерной r, ϑ, z геометрии построена КР₁-схема ускорения сходимости внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической краевой задачи, согласованная с Weighted Diamond Differencing (WDD) схемой, а также рассмотрено ее обобщение на случай нодальных Linear Discontinues (LD) и Linear Best (LB)-схем 3-го и 4-го порядка точности по пространственным переменным. Для решения P_1 -системы для ускоряющих поправок использован алгоритм, основанный на использовании циклического метода расщепления, аналогичный использованному ранее при построении КР₁-схемы ускорения сходимости внутренних итераций. Рассмотрен алгоритм определения энергетической зависимости для ускоряющих поправок КР₁-схемы ускорения сходимости внешних итераций. Рассмотрен вопрос выбора критерия сходимости внешних итераций, предложен интегральный по рассеянным вверх по энергии тепловым нейтронам критерий сходимости внешних итераций по области термализации нейтронов. Рассмотрена модификация алгоритма на случай трехмерной x, y, z геометрии. Приведены численные примеры использования КР₁-схемы ускорения сходимости внешних итераций для решения характерных задач переноса нейтронов в трехмерной геометрии. Библ. 39. Фиг. 2. Табл. 7.

Ключевые слова: КР₁-схема ускорения внешних итераций, выбор спектральной функции и критерия сходимости внешних итераций, уравнение переноса.

DOI: 10.31857/S0044466924070127, EDN: xibspv

ВВЕДЕНИЕ

Ускорение внешних итераций, которые возникают, при наличии в матрице межгрупповых переходов вверх по группам, является существенным элементом численной методики решения многогруппового уравнения переноса нейтронов. Существуют достаточно важные и представительные классы задач, при решении которых для уменьшения вычислительных затрат необходимо уменьшить число внешних итераций по области термализации нейтронов (thermal up-scattering) и (или) по источнику деления (fission up-scattering).

Число внешних итераций по области термализации при наличии, например, в защитной композиции воды, разогретой до температуры порядка 600 K⁰ (реально реализуемая ситуация для водородных реакторов), может быть достаточно велико (порядка 70 при точности сходимости внешних итераций $\varepsilon_{upsc} = 10^{-3}$ и использовании пяти групп нейтронов с термализацией (для которых присутствуют переходы из нижерасположенных групп) константных систем¹ BUGLE96 [1] или BGL1000/440 [2]). При увеличении числа групп нейтронов в тепловой области, что имеет место при использовании мало- и мультигрупповых систем констант (V7-27N19G, V7-200N47G из SCALE-6.1 [3]; v7.1-200n47g, v7.0-238n, v7.1-252n из SCALE-6.2.4 [4]; мультигрупповые версии БНАБ-93 [5] и БНАБ-РФ [6], имеющие соответственно 13, 34, 36, 90, 97 и 73 групп с термализацией),

¹Под константной системой понимается библиотека многогрупповых сечений для нейтронов и фотонов для заданного набора нуклидов, полученная из файлов оцененных данных путем усреднения детального хода сечений на заданную энергетическую сетку.

число внешних итераций по области термализации также возрастает и, в зависимости от расчетной композиции, может достигать нескольких тысяч, что делает проблематичным проведение соответствующих расчетов без ускорения внешних итераций.

Другая область приложений, в которых алгоритм ускорения внешних итераций также очень важен — это ускорение внешних итераций по источнику деления при решении подкритических задач с заданным внешним источником. ADS (accelerator driven systems) системы, в которых поле нейтронов в подкритической системе поддерживается источником spallation нейтронов, т.е. вторичных нейтронов, возникающих при взаимодействии с мишенью пучка протонов высокой энергии, являются практически важным примером таких систем. Как показывают теоретические оценки и практические расчеты, число внешних итераций по источнику деления при расчете таких систем может быть достаточно велико (порядка 70 при $k_{eff} = 0.94$), и их число неограниченно возрастает при $k_{eff} \rightarrow 1$. Здесь и ниже k_{eff} — эффективный коэффициент размножения системы с делящимися нуклидами (см. [7], [8]). Таким образом, расчет систем, близких к критическим, в отсутствие эффективного алгоритма ускорения внешних итераций по источнику деления, представляет серьезную вычислительную проблему.

В настоящей работе мы рассмотрим обобщение KP_1 -схемы (см. [7], [9–17]) применительно к задаче ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов и по источнику деления при решении подкритической задачи. Эффективность и устойчивость данного алгоритма существенно зависят от выбора формы спектра для ускоряющих поправок. В [18–20] эффективность данного алгоритма была исследована на примере 1D геометрий. В [16], развитием которой является настоящая работа, были представлены дополнительные численные результаты по использованию алгоритма при решении практических задач в 1D, 2D и 3D геометриях в зависимости от выбора формы спектра для ускоряющих поправок и сформулирован вариант алгоритма ускорения внешних итераций, который, как показал опыт расчетов, обеспечивает необходимую эффективность при решении широкого класса практических задач. Данный алгоритм реализован в 1D, 2D и 3D S_n программах РОЗ-6, КАСКАД-С и КАТРИН, включенных в систему программ CNCSN-2009 (см. [21]), и оптимизирован в последних версиях этих программ. В [22] предложен Transport Two Grid (TTG) алгоритм ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов, являющийся обобщением Two Grids (TG) алгоритма, предложенного ранее в [18], а также приведены примеры его использования в x, y, z геометрии.

Последовательность изложения в настоящей работе следующая. В разд. 1–4 для случая r, ϑ, z геометрии будет построена KP_1 -схема для ускорения внешних итераций по области термализации и по источнику деления при решении подкритической задачи, согласованная с WDD схемой, а также рассмотрено обобщение алгоритма на случай x, y, z геометрии и нодальных схем². Разделы 5 и 6 посвящены описанию алгоритма определения вида спектра для корректирующих поправок KP_1 -схемы для гомогенной и гетерогенной сред. В разд. 7 приведены численные результаты по использованию KP_1 -схемы ускорения внешних итераций. Обсуждению полученных результатов посвящен разд. 8.

1. WDD СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ТРЕХМЕРНОЙ R, Θ, Z ГЕОМЕТРИИ

В r, ϑ, z геометрии уравнение переноса имеет вид (см. [8])

$$\eta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \mu r \frac{\partial \psi}{\partial z} + \xi \frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - \frac{\partial}{\partial \varphi}(\mu\psi) + \sigma r\psi(r, \vartheta, z; \mu, \varphi) = rS(r, \vartheta, z; \mu, \varphi), \quad (1)$$

где ψ , σ и S — поток нейтронов (фотонов), полное сечение и источник в группе q (в разд. 1 и 2 индекс номера группы опускается); ξ , η и μ — направляющие косинусы единичного вектора Ω направления скорости частицы:

$$\xi = (\Omega \mathbf{n}_r) = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \quad \eta = (\Omega \mathbf{n}_\vartheta) = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \quad \mu = (\Omega \mathbf{n}_z) = \cos \theta, \quad (2)$$

который изменяется в пределах единичной сферы (восьми октантов): $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$, φ — азимутальный угол: $0 \leq \varphi \leq 2\pi$; переменные r , ϑ и z изменяются в пределах: $0 \leq r_{\text{int}} \leq r \leq r_{\text{ext}}$, $0 \leq \vartheta_0 \leq \vartheta \leq \vartheta_{\text{end}} \leq 2\pi$, $0 \leq z_{\text{bot}} \leq z \leq z_{\text{top}} = H$.

²В нодальных схемах для повышения порядка аппроксимации разностной схемы используются дополнительные пространственные моменты решения в разностной ячейке, а также дополнительные балансные уравнения.

Для граничных направлений $\varphi = \pi$ и $\varphi = 2\pi$, используемых для организации расчета ячеек в r , ϑ , z геометрии, уравнение (1) имеет вид

$$\mu r \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \xi \left[\frac{\partial}{\partial r} (r\Psi) - \Psi \right] + \sigma r \Psi(r, z, \mu, \varphi) = rS(r, z, \mu, \varphi). \quad (3)$$

К уравнению (1) следует также добавить граничные условия при $r = r_{\text{int}} \geq 0$, $r = r_{\text{ext}}$, $\vartheta = \vartheta_0$, $\vartheta = \vartheta_{\text{end}}$, $z = z_{\text{bot}}$, $z = z_{\text{top}}$.

Для аппроксимации интеграла рассеяния введем квадратуру на единичной сфере угловых направлений (8 октантов): $-1 \leq \xi, \eta, \mu \leq 1$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, следующего вида:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) &= \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) + \int_{-1}^1 d\mu \int_{\pi}^{2\pi} d\varphi f(\mu, \varphi) = \\ &= \sum_{l=1}^{L_1} \sum_{m=1}^{M_1^{(1)}} w_{l,m}^{(1)} f(\mu_l^{(1)}, \varphi_{l,m}^{(1)}) + \sum_{l=1}^{L_2} \sum_{m=1}^{M_1^{(2)}} w_{l,m}^{(2)} f(\mu_l^{(2)}, \varphi_{l,m}^{(2)}). \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом, для передней $0 < \varphi < \pi$ ($\mu_{l,m} > 0$) и задней $\pi < \varphi < 2\pi$ ($\mu_{l,m} < 0$) полусфер, вообще говоря, может использоваться различная квадратура. Квадратура, например, для передней полусферы (I, II, V и VI октанты) разбивает ее на L_1 полос по переменной μ веса $w_l^{(1)}$, а каждая полоса l , $l = 1, \dots, L_1$, дополнительно еще разбивается на $M_l^{(1)}$ секторов веса $w_{l,m}^{(1)}$, где индекс m на l -м слое пробегает значения $m = 1, \dots, M_l^{(1)}$. Нумерация узлов по φ на l -м слое соответствует возрастанию $\xi_{l,m}^{(1)}$ (убыванию $\varphi_{l,m}^{(1)}$ при $0 \leq \varphi \leq \pi$). Аналогично устроена квадратура и для задней полусферы (III, IV, VII и VIII октанты). Нумерация узлов по φ на l -м слое для нее соответствует возрастанию $\xi_{l,m}^{(2)}$ (и $\varphi_{l,m}^{(2)}$) при $\pi \leq \varphi \leq 2\pi$. Для обычно используемых симметричных квадратур квадратура для задней полусферы получается из квадратуры для передней полусферы путем зеркального отражения относительно плоскости $\varphi = \pi$. Ниже мы будем, как правило, опускать индекс полусферы.

Уравнение баланса нулевого порядка получается путем интегрирования уравнения (1) по разностной ячейке $(r_{i-1/2}, r_{i+1/2}) \cdot (\vartheta_{j-1/2}, \vartheta_{j+1/2}) \cdot (z_{k-1/2}, z_{k+1/2}) \cdot (\varphi_{l,m+1/2}, \varphi_{l,m-1/2}) \cdot (\mu_{l-1/2}, \mu_{l+1/2})$, $i = 1, \dots, I$, $j = 1, \dots, J$, $k = 1, \dots, K$ (ниже мы опускаем целые индексы, в том числе, номер группы, в тех случаях, когда это не вызывает недоразумений):

$$\begin{aligned} &|\eta| \Delta r v_z (\Psi_P - \Psi_F) + |\mu| v_r v_\vartheta (\Psi_T - \Psi_B) + v_z v_\vartheta \times \\ &\times \left[|\xi| (A^+ \Psi_R - A^- \Psi_L) + \frac{C}{w} (\alpha_{m+1/2} \Psi_{m+1/2} - \alpha_{m-1/2} \Psi_{m-1/2}) \right] + \sigma V \Psi = VS, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{l,m+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} &= w_{l,m} \xi_{l,m}, \quad \alpha_{l,1/2} = \alpha_{l,M_{l+1/2}} = 0, \quad m = 1, \dots, M_l, \quad l = 1, \dots, L, \\ A_{i\pm 1/2} &= r_{i\pm 1/2}, \quad v_{r,i} = \frac{1}{2} (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2), \quad C_i = r_{i+1/2} - r_{i-1/2} = \Delta r_i, \\ \Delta z_k &= v_{z,k} = z_{k+1/2} - z_{k-1/2}, \\ \Delta \vartheta_j &= v_{\vartheta,j} = \vartheta_{j+1/2} - \vartheta_{j-1/2}, \quad V_{i,j,k} = \Delta z_k v_{r,i} v_{\vartheta,j}, \\ \Delta \vartheta_j &= v_{\vartheta,j} = \vartheta_{j+1/2} - \vartheta_{j-1/2}, \quad V_{i,j,k} = \Delta z_k v_{r,i} v_{\vartheta,j}, \\ \Psi_{R(L)} \equiv \Psi_r^\pm &= \begin{cases} \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}, & \xi_{l,m} > 0, \\ \Psi_{i\mp 1/2,j,k,l,m}, & \xi_{l,m} < 0, \end{cases} \quad \Psi_{T(B)} \equiv \Psi_r^\pm = \begin{cases} \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}, & \mu_l > 0, \\ \Psi_{i,j,k\mp 1/2,l,m}, & \mu_l < 0, \end{cases} \\ A^\pm &= \begin{cases} A_{i\pm 1/2}, & \xi_{l,m} > 0, \\ A_{i\mp 1/2}, & \xi_{l,m} < 0, \end{cases} \quad \Psi_{P(F)} \equiv \Psi_\vartheta^\pm = \begin{cases} \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}, & \eta_{l,m} > 0, \\ \Psi_{i,j\mp 1/2,k,l,m}, & \eta_{l,m} < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\Psi_{R(L)}$, $\Psi_{P(F)}$ и $\Psi_{T(B)}$ — нулевые пространственные моменты потока на пространственных гранях ячейки.

Для получения WDD схемы к уравнению баланса (5) следует добавить четыре дополнительных уравнения:

$$\begin{aligned}\psi_r^+ &= (1 + P_r) \psi - P_r \psi_r^-, \quad \psi_\vartheta^+ = (1 + P_\vartheta) \psi - P_\vartheta \psi_\vartheta^-, \quad \psi_z^+ = (1 + P_z) \psi - P_z \psi_z^-, \\ \psi_{m+1/2} &= (1 + P_\xi) \psi - P_\xi \psi_{m-1/2}, \quad 0 \leq P_r, P_\vartheta, P_z, P_\xi \leq 1,\end{aligned}\quad (7)$$

где P_r, P_ϑ, P_z и P_ξ — весовые коэффициенты WDD схемы. Для расчета весовых коэффициентов в программе используется адаптивная WDD (AWDD) схема (см. [23]– [26]), которая определяет эти веса в результате оценки градиентов решения по каждой из переменных. AWDD схема обеспечивает положительность и приемлемый (регулируемый) уровень монотонности разностного решения с сохранением достаточно высокой точности расчета интегральных величин, не препятствует сходимости внутренних итераций.

2. ПОСТРОЕНИЕ KP_1 -СХЕМЫ УСКОРЕНИЯ ВНУТРЕННИХ ИТЕРАЦИЙ В R, Θ, Z ГЕОМЕТРИИ

Перепишем уравнение баланса (5) и систему дополнительных уравнений WDD схемы (7) в r, ϑ, z геометрии на $(n + 1)$ -й внутренней итерации в более удобном для последующего изложения виде:

$$\begin{aligned}\eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k \left(\psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{n+1/2} \right) + \mu_l v_i \Delta \vartheta_j \left(\psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{n+1/2} - \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{n+1/2} \right) + \Delta z_k \Delta \vartheta_j \times \\ \times \left[\xi_{l,m} \left(A_{i+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} - A_{i-1/2} \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{C_i}{w_{l,m}} \left(\alpha_{l,m+1/2} \psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{n+1/2} \right) \right] +\end{aligned}\quad (8)$$

$$+ \sigma_l V_{i,j,k} \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = V_{i,j,k} \sum_{\kappa=0}^K \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{\nu,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m},$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = a_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} + \left(1 - a_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \right) \psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{n+1/2}, \quad a = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_r}, & \xi > 0, \\ \frac{1}{1 + P_r}, & \xi < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (9)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = b_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \left(1 - b_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \right) \psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{n+1/2}, \quad b = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_\vartheta}, & \eta > 0, \\ \frac{1}{1 + P_\vartheta}, & \eta < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_\vartheta \leq 1, \quad (10)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} = c_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{n+1/2} + \left(1 - c_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} \right) \psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{n+1/2}, \quad c = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_z}, & \mu > 0, \\ \frac{1}{1 + P_z}, & \mu < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_z \leq 1, \quad (11)$$

$$\psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{n+1/2} = (1 + P_\xi) \psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} - P_\xi \psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} d_{m'}^{l,m} \psi_{i,j,k,l,m'}^{n+1/2}, \quad 0 \leq P_\xi \leq 1. \quad (12)$$

В уравнении (8) $\sigma_{s,\kappa}$ — это κ -я гармоника заданной в P_K приближении индикатрисы рассеяния в группе, $F_{i,j,k,l,m}$ — заданный многогрупповой источник в группе; сферические гармоники $Y_{\kappa}^{\nu}(\mu, \varphi)$ и угловые моменты потока $\Phi_{\kappa,i,j,k}^{\nu,n}$ определены следующим образом:

$$Y_{\kappa}^{\nu}(\mu, \varphi) = \left[(2 - \delta_{0,\nu}) \frac{(\kappa - |\nu|)!}{(\kappa + |\nu|)!} \right]^{1/2} P_{\kappa}^{|\nu|}(\mu) \begin{cases} \sin |\nu| \varphi, & \nu = -\kappa, -\kappa + 1, \dots, -1, \\ \cos \nu \varphi, & \nu = 0, 1, \dots, \kappa, \end{cases} \quad \kappa = 0, 1, \dots, |\nu| \leq \kappa, \quad (13)$$

$$\Phi_{\kappa,i,j,k}^{\nu,n} = \sum_{l,m} w_{l,m} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \psi_{i,j,k,l,m}^n, \quad (14)$$

где $P_K^\nu(\nu)$ — это присоединенные полиномы Лежандра. Отметим здесь, что $Y_0^0 = 1$, $Y_1^{-1} = \eta$, $Y_1^0 = \mu$, $Y_1^1 = \xi$.

К системе уравнений (8)–(12) следует также добавить граничные условия при $r = r_{1/2} = r_{\text{int}} \geq 0$, $r = r_{I+1/2} = r_{\text{ext}}$, $\vartheta = \vartheta_{1/2} = \vartheta_0$, $\vartheta = \vartheta_{J+1/2} = \vartheta_{\text{end}}$, $z = z_{1/2} = z_{\text{bot}}$, $z = z_{K+1/2} = z_{\text{top}}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{\text{int}} + \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{int}} \Psi_{1/2,j,k,l',m'}^{n+1/2}, \quad \xi_{l,m} > 0, \\ \Psi_{I+1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{j,k,l,m}^{\text{ext}} + \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \Psi_{I+1/2,j,k,l',m'}^n, \quad \xi_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^0 + \sum_{\eta_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^0 \Psi_{i,1/2,k,l',m'}^{n+1/2}, \quad \eta_{l,m} > 0, \\ \Psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,k,l,m}^{\text{end}} + \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n, \quad \eta_{l,m} < 0, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j,1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,j,l,m}^{\text{bot}} + \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{bot}} \Psi_{i,j,1/2,l',m'}^{n+1/2}, \quad \mu_l > 0, \\ \Psi_{i,j,K+1/2,l,m}^{n+1/2} &= F_{i,j,l,m}^{\text{top}} + \sum_{\mu_{l'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{top}} \Psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^n, \quad \mu_l < 0. \end{aligned} \quad (17)$$

При использовании периодических граничных условий, например, по переменной ϑ , что имеет место при наличии поворотной симметрии для сектора симметрии $(\vartheta_0, \vartheta_{\text{end}})$, граничные условия (16) заменяются следующими:

$$\begin{aligned} \Psi_{i,1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= \Psi_{i,J+1/2,k,l,m}^n, \quad \eta_{l,m} > 0, \\ \Psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{n+1/2} &= \Psi_{i,1/2,k,l,m}^n, \quad \eta_{l,m} < 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Для ускорения сходимости внутренних итераций в КР₁-схеме используются линейные поправки к нулевому и первым угловым моментам решения следующего вида:

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j,k,l,m}^{n+1} &= \Psi_{i,j,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,j,k}^r + 3\eta_{l,m} f_{i,j,k}^\vartheta + 3\mu_l f_{i,j,k}^z), \\ \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{n+1} &= \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i\pm 1/2,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i\pm 1/2,j,k}^r), \\ \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{n+1} &= \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,j\pm 1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,j\pm 1/2,k}^\vartheta), \\ \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{n+1} &= \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{n+1/2} + \frac{1}{4\pi} (f_{i,j,k\pm 1/2}^0 + 3\mu_l f_{i,j,k\pm 1/2}^z). \end{aligned} \quad (19)$$

Для получения системы уравнений для определения ускоряющих поправок f^0 , f^r , f^ϑ и f^z воспользуемся следующей процедурой, близкой к “4-step” процедуре Ларсена (см. [27], [12], а также [13]). Прежде всего, подействуем на уравнение баланса (8) операторами проектирования $\hat{L}_0$, $\hat{L}_r$, $\hat{L}_\vartheta$ и $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned} L_0 \Psi &= \sum_{l,m} w_{l,m} \Psi_{i,j,k,l,m}, \quad L_r \Psi = \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} \Psi_{i,j,k,l,m}, \\ L_\vartheta \Psi &= \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} \Psi_{i,j,k,l,m}, \quad L_z \Psi = \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l \Psi_{i,j,k,l,m}, \end{aligned} \quad (20)$$

где суммирование производится по восьми октантам. В предположении, что используемая квадратура достаточно точно интегрирует соответствующие сферические гармоники, получим

$$\begin{aligned} \Delta r_i \Delta z_k &\left(f_{i,j+1/2,k}^\vartheta + f_{i,j-1/2,k}^\vartheta \right) + v_i \Delta \vartheta_j \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right) + \\ &+ \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^r \right) + \sigma^0 V_{i,j,k} f_{i,j,k}^0 = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^0 \right) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j f_{i,j,k}^0 + \\
& \quad + (\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_r C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j) f_{i,j,k}^r = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^r, \\
& \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) + (\sigma^{11} V_{i,j,k} + M_\vartheta C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j) f_{i,j,k}^\vartheta = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^\vartheta, \\
& \frac{1}{3} v_i \Delta \vartheta_j \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right) + \sigma^{11} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^z = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^z,
\end{aligned} \tag{21}$$

где

$$\begin{aligned}
Q_{i,j,k}^0 &= \sigma_{s,0} \left(\Phi_{i,j,k}^{0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{0,n} \right), \quad Q_{i,j,k}^r = \sigma_{s,1} \left(\Phi_{i,j,k}^{r,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{r,n} \right), \quad Q_{i,j,k}^\vartheta = \sigma_{s,1} \left(\Phi_{i,j,k}^{\vartheta,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{\vartheta,n} \right), \\
Q_{i,j,k}^z &= \sigma_{s,1} \left(\Phi_{i,j,k}^{z,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{z,n} \right), \quad \sigma^{00} = \sigma - \sigma_{s,0}, \quad \sigma^{11} = \sigma - \sigma_{s,1}, \\
\Phi_{i,j,k}^0 &\equiv \Phi_{0,i,j,k}^0, \quad \Phi_{i,j,k}^r \equiv \Phi_{1,i,j,k}^1, \quad \Phi_{i,j,k}^\vartheta \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{-1}, \quad \Phi_{i,j,k}^z \equiv \Phi_{1,i,j,k}^0,
\end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
M_r &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} \xi_{l,m} \left(\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^r - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^r \right), \\
M_\vartheta &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} \eta_{l,m} \left(\alpha_{l,m+1/2} \pi_{l,m+1/2}^\vartheta - \alpha_{l,m-1/2} \pi_{l,m-1/2}^\vartheta \right).
\end{aligned} \tag{23}$$

Величины $\pi_{l,m\pm 1/2}^r$, $\pi_{l,m\pm 1/2}^\vartheta$ в (23) могут быть вычислены с помощью следующих рекуррентных соотношений:

$$\begin{aligned}
\pi_{l,m\pm 1/2}^r &= \left(1 + P_{l,m}^\xi \right) \xi_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^r, \quad \pi_{l,1/2}^r = \xi_{l,1/2}, \\
\pi_{l,m\pm 1/2}^\vartheta &= \left(1 + P_{l,m}^\xi \right) \eta_{l,m} - P_{l,m}^\xi \pi_{l,m-1/2}^\vartheta, \quad \pi_{l,1/2}^\vartheta = \eta_{l,1/2} = 0.
\end{aligned} \tag{24}$$

В систему из четырех уравнений (21) входит десять неизвестных величин: $f_{i,j,k}^0$, $f_{i,j,k}^r$, $f_{i,j,k}^\vartheta$, $f_{i,j,k}^z$, $f_{i\pm 1/2,j,k}^0$, $f_{i\pm 1/2,j,k}^r$, $f_{i,j\pm 1/2,k}^0$, $f_{i,j\pm 1/2,k}^\vartheta$, $f_{i,j,k\pm 1/2}^0$ и $f_{i,j,k\pm 1/2}^z$. Для замыкания системы (21) к ней необходимо добавить шесть дополнительных уравнения, а также граничные условия. Искомые дополнительные уравнения можно получить из естественного требования (см. [13]) инвариантности системы (21) при заменах в уравнении баланса (1.11.3):

$$\psi \rightarrow a\psi_{i+1/2} + (1-a)\psi_{i-1/2}, \quad \psi \rightarrow b\psi_{j+1/2} + (1-b)\psi_{j-1/2}, \quad \psi \rightarrow c\psi_{k+1/2} + (1-c)\psi_{k-1/2}. \tag{25}$$

Если используемая квадратура достаточно точна, то полученные таким образом соотношения совпадают с теми, которые получаются применением операторов $\hat{L}_0$ и $\hat{L}_r$ к уравнению (9), операторов $\hat{L}_0$ и $\hat{L}_\vartheta$ к уравнению (10) и операторов $\hat{L}_0$ и $\hat{L}_z$ к уравнению (11) (как это рекомендуется в “4-step” процедуре Ларсена, [27], [12]):

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= A_{i,j,k}^0 f_{i+1/2,j,k}^0 + \left(1 - A_{i,j,k}^0 \right) f_{i-1/2,j,k}^0 + A_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^r - f_{i-1/2,j,k}^r \right), \\
f_{i,j,k}^r &= A_{i,j,k}^2 f_{i+1/2,j,k}^r + \left(1 - A_{i,j,k}^2 \right) f_{i-1/2,j,k}^r + A_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^0 - f_{i-1/2,j,k}^0 \right) / 3,
\end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= B_{i,j,k}^0 f_{i,j+1/2,k}^0 + \left(1 - B_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j-1/2,k}^0 + B_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^\vartheta - f_{i,j-1/2,k}^\vartheta \right), \\
f_{i,j,k}^\vartheta &= B_{i,j,k}^2 f_{i,j+1/2,k}^\vartheta + \left(1 - B_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j-1/2,k}^\vartheta + B_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) / 3,
\end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^0 &= C_{i,j,k}^0 f_{i,j,k+1/2}^0 + \left(1 - C_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j,k-1/2}^0 + C_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right), \\
f_{i,j,k}^z &= C_{i,j,k}^2 f_{i,j,k+1/2}^z + \left(1 - C_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j,k-1/2}^z + C_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right) / 3,
\end{aligned} \tag{28}$$

где

$$\begin{aligned} A_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} a_{i,j,k,l,m}, & A_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m} a_{i,j,k,l,m}, & A_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{l,m}^2 a_{i,j,k,l,m}, \\ B_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} b_{i,j,k,l,m}, & B_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} b_{i,j,k,l,m}, & B_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m}^2 b_{i,j,k,l,m}, \\ C_{i,j,k}^0 &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} c_{i,j,k,l,m}, & C_{i,j,k}^1 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_{l,m} c_{i,j,k,l,m}, & C_{i,j,k}^2 &= \frac{3}{4\pi} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_{l,m}^2 c_{i,j,k,l,m}. \end{aligned} \quad (29)$$

Для получения граничных условий для P_1 системы для ускоряющих поправок воспользуемся следующей процедурой, обобщающей использованную ранее для случая одномерных (см. [19], [28]) и двумерных (см. [15]) геометрий. Домножим уравнения (15), определяющие закон отражения при $r = r_{\text{int}}$ и $r = r_{\text{ext}}$, на $w_{l,m} \xi_{l,m}$ и просуммируем их по направлениям $\xi_{l,m} > 0$ и $\xi_{l,m} < 0$ соответственно. С учетом вида поправок (19), получим

$$l_0^r f_{1/2,j,k}^0 + 3l_1^r f_{1/2,j,k}^r = 0, \quad m_0^r f_{I+1/2,j,k}^0 + 3m_1^r f_{I+1/2,j,k}^r = \lambda_{j,k}^r, \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} l_p^r &= \sum_{\xi_{l,m} > 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \left(\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{int}} \right), \\ m_p^r &= \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \left(\xi_{l,m}^p - \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \xi_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \right), \\ p = 0, 1, \quad \lambda_{j,k}^r &= 4\pi \sum_{\xi_{l,m} < 0} w_{l,m} \xi_{l,m} \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{ext}} \left(\Psi_{I+1/2,j,k,l',m'}^{n+1/2} - \Psi_{I+1/2,j,k,l',m'}^n \right). \end{aligned} \quad (31)$$

Для определения граничных условий для поправок на границах $\vartheta = \vartheta_0$ и $\vartheta = \vartheta_{\text{end}}$ домножим уравнения (16), определяющие закон отражения на этих границах, на $w_{l,m} \eta_{l,m}$ и просуммируем их по направлениям $\eta_{l,m} > 0$ и $\eta_{l,m} < 0$ соответственно. С учетом вида поправок (19), получим

$$l_0^\vartheta f_{i,1/2,k}^0 + 3l_1^\vartheta f_{i,1/2,k}^\vartheta = 0, \quad m_0^\vartheta f_{i,J+1/2,k}^0 + 3m_1^\vartheta f_{i,J+1/2,k}^\vartheta = \lambda_{i,k}^\vartheta, \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} l_p^\vartheta &= \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\eta_{l,m}^p - \sum_{\eta_{l',m'} < 0} w_{l',m'} \eta_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^0 \right), \\ m_p^\vartheta &= \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\eta_{l,m}^p - \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} \eta_{l',m'}^p R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \right), \\ p = 0, 1, \quad \lambda_{i,k}^\vartheta &= 4\pi \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{\text{end}} \left(\Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n \right). \end{aligned} \quad (33)$$

При использовании по переменной ϑ периодических граничных условий, применяя аналогичную процедуру к уравнениям (18), получим

$$\begin{aligned} l_0^\vartheta \left(f_{i,1/2,k}^0 - f_{i,J+1/2,k}^0 \right) + 3l_1^\vartheta \left(f_{i,1/2,k}^\vartheta - f_{i,J+1/2,k}^\vartheta \right) &= \lambda_{i,k}^{\vartheta,\text{end}}, \\ m_0^\vartheta \left(f_{i,J+1/2,k}^0 - f_{i,1/2,k}^0 \right) + 3m_1^\vartheta \left(f_{i,J+1/2,k}^\vartheta - f_{i,1/2,k}^\vartheta \right) &= \lambda_{i,k}^{\vartheta,0}, \end{aligned} \quad (34)$$

где

$$l_p^\vartheta = \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \eta_{l,m}^p, \quad m_p^\vartheta = \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \eta_{l,m}^p, \quad p = 0, 1,$$

$$\begin{aligned}\lambda_{i,k}^{\vartheta,0} &= 4\pi \sum_{\eta_{l,m} < 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\Psi_{i,1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \Psi_{i,1/2,k,l',m'}^n \right), \\ \lambda_{i,k}^{\vartheta,end} &= 4\pi \sum_{\eta_{l,m} > 0} w_{l,m} \eta_{l,m} \left(\Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{n+1/2} - \Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^n \right).\end{aligned}\quad (35)$$

Для определения граничных условий для поправок на границах $z = z_{bot}$ и $z = z_{top}$ домножим уравнения (18), определяющие закон отражения на этих границах, на $w_{l,m}\mu_l$ и просуммируем их по направлениям $\mu_l > 0$ и $\mu_l < 0$ соответственно. С учетом вида поправок (19), получим

$$l_0^z f_{i,j,1/2}^0 + 3l_1^z f_{i,j,1/2}^z = 0, \quad m_0^z f_{i,j,K+1/2}^z + 3m_1^z f_{i,j,K+1/2}^z = \lambda_{i,j}^z, \quad (36)$$

где

$$\begin{aligned}l_p^z &= \sum_{\mu_l > 0} w_{l,m} \mu_l \left(\mu_l^p - \sum_{\mu_{l'},m' < 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{bot} \right), \\ m_p^z &= \sum_{\mu_l < 0} w_{l,m} \mu_l \left(\mu_l^p - \sum_{\mu_{l'},m' > 0} w_{l',m'} \mu_{l'}^p R_{lm,l'm'}^{top} \right), \\ p = 0, 1, \quad \lambda_{i,k}^z &= 4\pi \sum_{\mu_l < 0} w_{l,m} \mu_l \sum_{\mu_{l'},m' > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{top} \left(\Psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^{n+1/2} - \Psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^n \right).\end{aligned}\quad (37)$$

Следует отметить, что в уравнениях (30), (32), (34) и (36) величины $\lambda_{j,k}^r$, $\lambda_{i,k}^{\vartheta}$, $\lambda_{i,k}^{\vartheta,0}$, $\lambda_{i,k}^{\vartheta,end}$ и $\lambda_{i,j}^z$ стремятся к нулю по мере сходимости итераций. По этой причине возможно использование также и упрощенных граничных условий на границах $r = r_{ext}$, $\vartheta = \vartheta_0$, $\vartheta = \vartheta_{end}$ и $z = z_{top}$, отличающихся от вышеприведенных тем, что правые части в них полагаются равными нулю:

$$\lambda_{j,k}^r = \lambda_{i,k}^{\vartheta} = \lambda_{i,j}^z = 0, \quad \lambda_{i,k}^{\vartheta,0} = \lambda_{i,k}^{\vartheta,end} = 0. \quad (38)$$

В частности, условия поворотной симметрии (34) по переменной ϑ приобретают вид

$$f_{i,1/2,k}^0 = f_{i,J+1/2,k}^0, \quad f_{i,1/2,k}^{\vartheta} = f_{i,J+1/2,k}^{\vartheta}. \quad (39)$$

Использование упрощенных граничных условий, в свою очередь, позволяет упростить постановку граничных условий в методе расщепления (МР) (см. [30], [16], [17]), используемому для нахождения решения KP_1 -системы для ускоряющих поправок.

Учитывая, что в 2D и 3D геометриях в задачах с существенной ролью анизотропии рассеяния, когда выполняется неравенство

$$\lambda = \frac{\mu_0 c}{1 - \mu_0 c} > 1, \quad \text{где} \quad \mu_0 = \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{s0}}, \quad c = \frac{\sigma_{s0}}{\sigma_t}, \quad (40)$$

сходимость KP_1 -схемы нарушается (см. [7], [29]), для обеспечения сходимости KP_1 -схемы в задачах переноса нейтронов и фотонов нами используется следующий простой прием (см. [14], [15]): на четных внутренних итерациях ускоряющая коррекция в соответствии с (19) производится для четырех угловых моментов решения, включая нулевой, на нечетных — только для скалярного потока. Ясно, что такое решение не является оптимальным, но оно обеспечивает сходимость KP_1 -схемы в неоднородных геометриях для широкого класса практических задач.

P_1 система для ускоряющих поправок для KP_1 -схемы в r , ϑ , z геометрии состоит из четырех балансных уравнений (21), шести дополнительных уравнений (26)–(29) и граничных условий (31)–(37). Эта система может быть решена итерационно с использованием, например, метода расщепления (см. [30], [16], [17]).

Односкоростное уравнение переноса в x , y , z геометрии имеет вид

$$\begin{aligned}\xi \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \mu \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \sigma \Psi(x, y, z; \theta, \varphi) &= S(x, y, z; \theta, \varphi), \\ x_{left} \leq x \leq x_{right}, \quad y_{front} \leq y \leq x_{back}, \quad z_{bot} \leq z \leq z_{top},\end{aligned}\quad (41)$$

где ξ , η и μ — направляющие косинусы единичного вектора Ω направления скорости частицы:

$$\xi = (\Omega \mathbf{n}_x) = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \quad \eta = (\Omega \mathbf{n}_y) = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \quad \mu = (\Omega \mathbf{n}_z) = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \theta, \quad (42)$$

которые изменяются в тех же пределах, что и в случае r , ϑ , z геометрии: $-1 \leq \xi, \eta, \mu \leq 1$. Все расчетные формулы КР₁-схемы для x , y , z геометрии получаются из соответствующих формул для r , ϑ , z геометрии путем замены:

$$r \rightarrow x, \quad \vartheta \rightarrow y, \quad A_{i\pm 1/2} \rightarrow 1, \quad C_1 \rightarrow 0, \quad v_i \rightarrow \Delta x_i, \quad M_r \rightarrow 0, \quad M_\vartheta \rightarrow 0. \quad (43)$$

3. КР₁-СХЕМА ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ВНЕШНИХ ИТЕРАЦИЙ ПО ОБЛАСТИ ТЕРМАЛИЗАЦИИ НЕЙТРОНОВ

Обозначим через $\mathfrak{T}$ интервал групп, в котором имеются переходы вверх по группам за счет термализации нейтронов. Группа $q \in \mathfrak{T}$, если в эту группу имеются переходы из нижерасположенных групп. Мы будем исходить из системы балансных соотношений для интервала групп $\mathfrak{T}$ в r , ϑ , z геометрии:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k \left(\Psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} - \Psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \mu_l v_i \Delta \vartheta_j \left(\Psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} - \Psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \Delta z_k \Delta \vartheta_j \times \\ & \quad \times \left[\xi_{l,m} \left(A_{i+1/2} \Psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - A_{i-1/2} \Psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{C_i}{w_{l,m}} \left(\alpha_{l,m+1/2} \Psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} - \alpha_{l,m-1/2} \Psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2} \right) \right] + \\ & \quad + \sigma_t^q V_{i,j,k} \Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - V_{i,j,k} \sum_{p \leq q} \sum_{\kappa=0}^K \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n+1/2} = \\ & = V_{i,j,k} \sum_{p > q} \sum_{\kappa} \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m}^q, \quad q, p \in \mathfrak{T}, \end{aligned} \quad (44)$$

дополнительных уравнений

$$\Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = a_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \Psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + \left(1 - a_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) \Psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2}, \quad a = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_r}, & \xi > 0, \\ \frac{1}{1 + P_r}, & \xi < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_r \leq 1, \quad (45)$$

$$\Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = b_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \Psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} + \left(1 - b_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) \Psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2}, \quad b = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_\vartheta}, & \eta > 0, \\ \frac{1}{1 + P_\vartheta}, & \eta < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_\vartheta \leq 1, \quad (46)$$

$$\Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = c_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \Psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} + \left(1 - c_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) \Psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2}, \quad c = \begin{cases} \frac{1}{1 + P_z}, & \mu > 0, \\ \frac{1}{1 + P_z}, & \mu < 0, \end{cases} \quad 0 \leq P_z \leq 1, \quad (47)$$

$$\Psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} = \left(1 + P_{\xi,i,j,k,l,m}^q \right) \Psi_{i,j,k,l,m}^q \Psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2} = \sum_{m'=1/2,1,\dots,m} d_{m'}^{q,l,m} \Psi_{i,j,k,l,m'}^{q,n+1/2}, \quad 0 \leq P_\xi \leq 1, \quad (48)$$

и граничных условий при $r = r_{1/2} = r_{\text{int}} \geq 0$, $r = r_{I+1/2} = r_{\text{ext}}$, $\vartheta = \vartheta_{1/2} = \vartheta_0$, $\vartheta = \vartheta_{J+1/2} = \vartheta_{\text{end}}$, $z = z_{1/2} = z_{\text{bot}}$, $z = z_{K+1/2} = z_{\text{top}}$:

$$\Psi_{1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = F_{j,k,l,m}^{q,\text{int}} + \sum_{\xi_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,\text{int}} \Psi_{1/2,j,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \xi_{l,m} > 0,$$

$$\Psi_{I+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} = F_{j,k,l,m}^{q,ext} + \sum_{\xi_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,ext} \Psi_{I+1/2,j,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \xi_{l,m} < 0, \quad (49)$$

$$\Psi_{i,1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} = F_{i,k,l,m}^{q,0} + \sum_{\eta_{l',m'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,0} \Psi_{i,1/2,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \eta_{l,m} > 0,$$

$$\Psi_{i,J+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} = F_{i,k,l,m}^{q,end} + \sum_{\eta_{l',m'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,end} \Psi_{i,J+1/2,k,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \eta_{l,m} < 0, \quad (50)$$

$$\Psi_{i,j,1/2,l,m}^{q,n+1/2} = F_{i,k,l,m}^{q,bot} + \sum_{\mu_{l'} < 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,bot} \Psi_{i,j,1/2,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \mu_l > 0,$$

$$\Psi_{i,j,K+1/2,l,m}^{q,n+1/2} = F_{i,k,l,m}^{q,top} + \sum_{\mu_{l'} > 0} w_{l',m'} R_{lm,l'm'}^{q,top} \Psi_{i,j,K+1/2,l',m'}^{q,n+1/2}, \quad \mu_l < 0. \quad (51)$$

В уравнениях (44)–(51) индекс $n + 1/2$ обозначает результат решения многогрупповой системы кинетических уравнений (44)–(51) с правой частью, полученной на n -й внешней итерации.

В KP_1 -схеме ускорения внешних итераций ищутся поправки к нулевому и первому угловым моментам решения в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1} &= \Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} (f_{i,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i,j,k}^r + 3\eta_{l,m} f_{i,j,k}^{\theta} + 3\mu_l f_{i,j,k}^z), \\ \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,n+1} &= \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} (f_{i\pm 1/2,j,k}^0 + 3\xi_{l,m} f_{i\pm 1/2,j,k}^r), \\ \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,n+1} &= \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} (f_{i,j\pm 1/2,k}^0 + 3\eta_{l,m} f_{i,j\pm 1/2,k}^{\theta}), \\ \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,n+1} &= \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} (f_{i,j,k\pm 1/2}^0 + 3\mu_l f_{i,j,k\pm 1/2}^z). \end{aligned} \quad (52)$$

В уравнения (52) входит функция ε_{β}^q , которая определяет энергетическую зависимость ускоряющих поправок для материала $\beta = 1, \dots, NK$, где NK — число материалов в защитной композиции. Предполагается, что функция ε_{β}^q , которую мы также будем называть спектральной функцией, нормирована на единицу:

$$\sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon_{\beta}^q = 1. \quad (53)$$

Пространственная зависимость спектральной функции ε_{β}^q имеет место только на границах различных материалов. Однако, как показывает численный эксперимент [18], этой зависимостью можно пренебречь.

Возможен также выбор спектральной функции, которая не зависит от номера материала β , а выбирается в зависимости от свойств гомогенизированной защитной композиции (см. [16]). Однако такой выбор, как показал численный эксперимент, несколько снижает эффективность алгоритма ускорения внешних итераций.

Форма ускоряющих поправок с факторизованной энергетической зависимостью позволяет построить арифметически простую схему ускорения внешних итераций, согласованную с используемой разностной аппроксимацией уравнения переноса (см. [19]). Эффективность и устойчивость этой схемы существенно зависит от выбора спектральной функции ε^q . В [19] была использована простейшая плоская (т.е. независимая от энергии) форма спектральной функции $\varepsilon^q = 1/G$. Однако этот выбор ε^q не является оптимальным. Использование в качестве ε^q распределения Максвелла с характерной температурой среды является более адекватным выбором в данной задаче. В этом случае величины ε^q вычисляются путем усреднения спектра Максвелла по энергетическому интервалу q -й группы $\{E_{q+1/2}, E_{q-1/2}\}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^q &: \frac{1}{\Delta E_q} \int_{E_{q+1/2}}^{E_{q-1/2}} E \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE, \quad \Delta E_q = E_{q-1/2} - E_{q+1/2}, \quad k = 8.617385 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ/К}, \\ &\sum_{q \in \mathfrak{I}} \varepsilon^q = 1. \end{aligned} \quad (54)$$

Более общий алгоритм определения формы спектра для ускоряющих поправок ϵ^q основан на оценке энергетической зависимости собственной функции, отвечающей наиболее медленно убывающей фурье-гармонике ошибки итерационного метода Гаусса—Зейделя (т.е. чистых, неускоренных внешних итераций) для рассматриваемой задачи (см. [18]). Данный алгоритм определения ϵ^q рассмотрен ниже в разд. 5 и 6.

Для нахождения ускоряющих поправок в уравнении (52) подействуем на балансное уравнение (44) и (аналогично “4-step” процедуре [27]) на дополнительные соотношения (44)–(46) операторами проектирования $\hat{\mathfrak{L}}_0$, $\hat{\mathfrak{L}}_r$, $\hat{\mathfrak{L}}_\vartheta$ и $\hat{\mathfrak{L}}_z$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathfrak{L}}_0\Psi &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{l,m} w_{l,m} \Psi_{i,j,k,l,m}^q, & \hat{\mathfrak{L}}_r\Psi &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{l,m} w_{l,m} \xi_{i,m} \Psi_{i,j,k,l,m}^q, \\ \hat{\mathfrak{L}}_\vartheta\Psi &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{l,m} w_{l,m} \eta_{l,m} \Psi_{i,j,k,l,m}^q, & \hat{\mathfrak{L}}_z\Psi &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{l,m} w_{l,m} \mu_l \Psi_{i,j,k,l,m}^q,\end{aligned}\quad (55)$$

где суммирование проводится по энергетическому диапазону $q \in \mathfrak{T}$ и по восьми октантам единичной сферы угловых направлений. В итоге получим

$$\begin{aligned}& \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^\vartheta - f_{i,j-1/2,k}^\vartheta \right) + v_i \Delta \vartheta_j \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right) + \\& + \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^r - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^r \right) + \sum^{00} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^0 = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^0, \\& \frac{1}{3} \Delta z_k \Delta \vartheta_j \left(A_{i+1/2} f_{i+1/2,j,k}^0 - A_{i-1/2} f_{i-1/2,j,k}^0 \right) - \frac{1}{3} C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j f_{i,j,k}^0 + \\& + \left(\sum^{11} V_{i,j,k} + \mathfrak{M}_r C - i \Delta z_k \Delta \vartheta_j \right) f_{i,j,k}^r = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^r, \\& \frac{1}{3} \Delta r_i \Delta z_k \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right) + \left(\sum^{11} V_{i,j,k} + \mathfrak{M}_\vartheta C_i \Delta z_k \Delta \vartheta_j \right) f_{i,j,k}^\vartheta = V_{i,j,k} Q_{i,j,k}^\vartheta, \\& \frac{1}{3} v_i \Delta \vartheta_j \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right) + \sum^{11} V_{i,j,k} f_{i,j,k}^0 Q_{i,j,k}^z,\end{aligned}\quad (56)$$

где

$$\begin{aligned}\sum^{00} &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \left\{ \epsilon_\beta^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{T}} \epsilon_\beta^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \right\}, & \sum^{11} &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \left\{ \epsilon_\beta^q \sigma^q - \sum_{p \in \mathfrak{T}} \epsilon_\beta^p \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \right\}, \\ Q_{i,j,k}^0 &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{p > q} \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \left(\Phi_{i,j,k}^{p,0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,0,n} \right), & Q_{i,j,k}^\alpha &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{p > q} \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \left(\Phi_{i,j,k}^{p,\alpha,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,\alpha,n} \right), \quad \alpha = r, \vartheta, z, \\ \Phi_{i,j,k}^{q,0} &\equiv \Phi_{0,i,j,k}^{q,0}, & \Phi_{i,j,k}^{q,r} &\equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,1}, \quad \Phi_{i,j,k}^{q,\vartheta} \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,-1}, \quad \Phi_{i,j,k}^{q,z} \equiv \Phi_{1,i,j,k}^{q,0},\end{aligned}\quad (57)$$

а дополнительные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned}f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{V}_{i,j,k}^0 f_{i+1/2,j,k}^0 + \left(1 - \mathfrak{V}_{i,j,k}^0 \right) f_{i-1/2,j,k}^0 + \mathfrak{V}_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^r - f_{i-1/2,j,k}^r \right), \\ f_{i,j,k}^r &= \mathfrak{V}_{i,j,k}^2 f_{i+1/2,j,k}^r + \left(1 - \mathfrak{V}_{i,j,k}^2 \right) f_{i-1/2,j,k}^r + \frac{\mathfrak{V}_{i,j,k}^1 \left(f_{i+1/2,j,k}^0 - f_{i-1/2,j,k}^0 \right)}{3},\end{aligned}\quad (58)$$

$$\begin{aligned}f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{B}_{i,j,k}^0 f_{i,j+1/2,k}^0 + \left(1 - \mathfrak{B}_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j-1/2,k}^0 + \mathfrak{B}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^\vartheta - f_{i,j-1/2,k}^\vartheta \right), \\ f_{i,j,k}^\vartheta &= \mathfrak{B}_{i,j,k}^2 f_{i,j+1/2,k}^\vartheta + \left(1 - \mathfrak{B}_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j-1/2,k}^\vartheta + \frac{\mathfrak{B}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j+1/2,k}^0 - f_{i,j-1/2,k}^0 \right)}{3},\end{aligned}\quad (59)$$

$$\begin{aligned}f_{i,j,k}^0 &= \mathfrak{C}_{i,j,k}^0 f_{i,j,k+1/2}^0 + \left(1 - \mathfrak{C}_{i,j,k}^0 \right) f_{i,j,k-1/2}^0 + \mathfrak{C}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^z - f_{i,j,k-1/2}^z \right), \\ f_{i,j,k}^z &= \mathfrak{C}_{i,j,k}^2 f_{i,j,k+1/2}^z + \left(1 - \mathfrak{C}_{i,j,k}^2 \right) f_{i,j,k-1/2}^z + \frac{\mathfrak{C}_{i,j,k}^1 \left(f_{i,j,k+1/2}^0 - f_{i,j,k-1/2}^0 \right)}{3}.\end{aligned}\quad (60)$$

Здесь величины $\mathbb{M}_r$, $\mathbb{M}_\vartheta$, $\mathbb{A}_x$, $\mathbb{B}_x$ и $\mathbb{C}_x$, $x = 0, 1, 2$, представляют собой усредненные по группам $q \in \mathfrak{T}$ с весом ε_β^q значения соответствующих групповых величин, определенных уравнениями (23) и (29):

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_r &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q M_r^q, \quad \mathbb{M}_\vartheta = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q M_\vartheta^q, \quad \mathbb{A}_{i,j,k}^x = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q A_{i,j,k}^{x,q}, \quad \mathbb{B}_{i,j,k}^x = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q B_{i,j,k}^{x,q}, \\ \mathbb{C}_{i,j,k}^x &= \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q C_{i,j,k}^{x,q}, \quad x = 0, 1, 2. \end{aligned} \quad (61)$$

Для получения граничных условий для системы (56)–(60) повторим процедуру получения граничных условий (30)–(37) для алгоритма ускорения внутренних итераций, дополнив ее усреднением по группам $q \in \mathfrak{T}$ с весом ε_β^q граничных условий (49)–(51). С учетом вида используемых поправок (52), получим

$$\begin{aligned} l_0^r f_{1/2,j,k}^0 + 3l_1^r f_{1/2,j,k}^r &= 0, \quad m_0^r f_{I+1/2,j,k}^0 + 3m_1^r f_{I+1/2,j,k}^r = 0, \\ l_0^\vartheta f_{i,1/2,k}^0 + 3l_1^\vartheta f_{i,1/2,k}^\vartheta &= 0, \quad m_0^\vartheta f_{i,J+1/2,k}^0 + 3m_1^\vartheta f_{i,J+1/2,k}^\vartheta = 0, \\ l_0^z f_{i,j,1/2}^0 + 3l_1^z f_{i,j,1/2}^z &= 0, \quad m_0^z f_{i,j,K+1/2}^0 + 3m_1^z f_{i,j,K+1/2}^z = 0, \end{aligned} \quad (62)$$

где

$$l_p^\alpha = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q l_p^{q,\alpha}, \quad w_p^\alpha = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \varepsilon_\beta^q w_p^{q,\alpha}, \quad p = 0, 1, \quad \alpha = r, \vartheta, z. \quad (63)$$

Из сравнения P_1 систем (21)–(37) и (56)–(63) следует, что KP_1 -схема ускорения внешних итераций использует свертки по группам с весом ε_β^q величин $\mathbb{M}_r$, $\mathbb{M}_\vartheta$, $\mathbb{A}_x$, $\mathbb{B}_x$ и $\mathbb{C}_x$, $x = 0, 1, 2$; l_p^α , m_p^α , $p = 0, 1$; $\alpha = r, \vartheta, z$ рассчитываемых в KP_1 -схеме ускорения внутренних итераций. Для решения системы (56)–(63) может быть использован метод расщепления (см. [30], [16], [17]).

Поточечно по групповой критерий сходимости внешних итераций по области термализации нейтронов

$$\max_{i,j,k,q \in \mathfrak{T}} \left| \frac{\Phi_{i,j,k}^{q,(n)} - \Phi_{i,j,k}^{q,(n-1)}}{\Phi_{i,j,k}^{q,(n)}} \right| < \varepsilon_{upsc}^{flux}, \quad (64)$$

где $\Phi_{i,j,k}^{q,(n)}$ — скалярный поток в (i, j, k) -й пространственной ячейке q -й группы на n -й внешней итерации, а $\varepsilon_{upsc}^{flux}$ — заданная точность сходимости внешних итераций по скалярному потоку, как показал численный эксперимент, является чрезмерно сильным. Из уравнения (57) можно сделать вывод, что в качестве более слабого критерия сходимости внешних итераций по области термализации нейтронов может быть выбран следующий поточечный, интегральный по рассеянным вверх по энергии тепловым нейтронам, критерий сходимости:

$$\max_{i,j,k} \left| \frac{U_{upsc,i,j,k}^{(n)} - U_{upsc,i,j,k}^{(n-1)}}{U_{upsc,i,j,k}^{(n)}} \right| < \varepsilon_{upsc}^{dens}, \quad U_{upsc,i,j,k}^{(n)} = \sum_{q \in \mathfrak{T}} \sum_{p > q} \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} \Phi_{i,j,k}^{p,n}, \quad (65)$$

где $U_{upsc,i,j,k}^{(n)}$ — плотность источника рассеиваемых вверх по энергии нейтронов для (i, j, k) -й пространственной ячейки, а $\varepsilon_{upsc}^{dens}$ — заданная точность сходимости внешних итераций по критерию (65). Имеющийся численный эксперимент подтверждает достаточность выбора критерия (65) для решения практических задач, а также уменьшение числа внешних итераций для достижения заданной точности сходимости.

Отметим, что критерий (65) вполне аналогичен критерию сходимости по плотности нейтронов деления, используемому в задачах с внешними итерациями по источнику деления.

Для уменьшения объема вычислительной работы в 3D S_n программе КАТРИН была принята стратегия последовательного увеличения точности сходимости внутренних итераций за счет уменьшения $\varepsilon_{in}^{(n)}$ по мере уменьшения достигнутой ошибки сходимости внешних итераций ε^* :

$$\varepsilon_{in}^{(n)} = \begin{cases} 10\varepsilon_{upsc}^{dens}, & n = 1, 2, \\ \max\{\varepsilon_{in}, \varepsilon_{upsc}^{dens}\}, & \varepsilon^* > 10, \\ \varepsilon_{in}, & 1 < \varepsilon^* < 10, \\ \min\{\varepsilon_{in}, 10^{-2}\varepsilon_{upsc}^{dens}\}, & \varepsilon^* < 1, \end{cases} \quad (66)$$

где ε_{in} и $\varepsilon_{upsc}^{dens}$ — заданные точности сходимости внутренних и внешних итераций по скалярному потоку. Кроме того, значение начального веса $P_{\vartheta}^{cut} = 0.95$ по переменной ϑ , используемое в алгоритме коррекции AWDD схемы, для 1-й внешней итерации по области термализации (для которой имеют место максимальные градиенты потоков тепловых нейтронов) уменьшено до значения 0.93.

Рассмотренный КР₁ метод ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов, согласованный с WDD схемой, обобщается и на случай семейства нодальных WLD—WLB схем 3-го и 4-го порядков точности. В этом случае поправки к нулевому и первому угловым моментам решения, аналогично (52), ищутся в виде

$$\Psi_{i,j,k,l,m}^{q,\alpha,n+1} = \Psi_{i,j,k,l,m}^{q,\alpha,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k,l,m}^{\alpha,0} + 3\xi_{l,m} f_{i,j,k,l,m}^{\alpha,r} + 3\eta_{l,m} f_{i,j,k,l,m}^{\alpha,\vartheta} + 3\mu_l f_{i,j,k,l,m}^{\alpha,z} \right), \quad \alpha = 0, r, \vartheta, z, \quad (67)$$

$$\Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,\gamma,n+1} = \Psi_{i\pm 1/2,j,k,l,m}^{q,\gamma,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i\pm 1/2,j,k}^{\gamma,0} + 3\xi_{l,m} f_{i\pm 1/2,j,k}^{\gamma,r} \right), \quad \gamma = 0, \vartheta, z,$$

$$\Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,\gamma,n+1} = \Psi_{i,j\pm 1/2,k,l,m}^{q,\gamma,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j\pm 1/2,k}^{\gamma,0} + 3\eta_{l,m} f_{i,j\pm 1/2,k}^{\gamma,\vartheta} \right), \quad \gamma = 0, r, z,$$

$$\Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,\gamma,n+1} = \Psi_{i,j,k\pm 1/2,l,m}^{q,\gamma,n+1/2} + \varepsilon_{\beta}^q \frac{1}{4\pi} \left(f_{i,j,k\pm 1/2}^{\gamma,0} + 3\mu_l f_{i,j,k\pm 1/2}^{\gamma,z} \right), \quad \gamma = 0, r, \vartheta. \quad (68)$$

В уравнениях (67) и (68) α и γ — индексы пространственных моментов. Уравнение (67) содержит 16 поправок, уравнения (68) — 18 поправок. Дальнейшее построение КР₁-схемы ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов, согласованной с WLB—WLD схемой, аналогично вышеприведенному для случая WDD схемы и опирается на результаты построения КР₁-схемы ускорения внутренних итераций, согласованной с WLB—WLD схемой (см. [31], [32]). Используемая в 3D S_n программе КАТРИН стратегия последовательного увеличения точности сходимости внутренних итераций за счет уменьшения $\varepsilon_{in}^{(n)}$ по мере уменьшения достигнутой ошибки сходимости внешних итераций ε^* для случая WLB—WLD схемы следующая:

$$\varepsilon_{in}^{(n)} = \begin{cases} 10\varepsilon_{upsc}^{dens}, & n = 1, 2, \\ \varepsilon_{in}, & \varepsilon^* > 1, \\ \min\{\varepsilon_{in}, 10^{-3}\varepsilon_{upsc}^{dens}\}, & \varepsilon^* < 1, \end{cases} \quad (69)$$

где ε_{in} и $\varepsilon_{upsc}^{dens}$ — заданные точности сходимости внутренних и внешних итераций по скалярному потоку.

4. КР₁-СХЕМА ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ВНЕШНИХ ИТЕРАЦИЙ ПО ИСТОЧНИКУ ДЕЛЕНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ ПОДКРИТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

В данном разделе мы рассмотрим, как модифицируется вышеописанная КР₁-схема ускорения внешних итераций в задаче об ускорении внешних итераций по источнику деления при решении подкритической краевой задачи. Обозначим через $\mathfrak{F}$ интервал групп, в котором имеются переходы вверх по группам за счет источника деления. Группа $q \in \mathfrak{F}$, если либо спектр деления χ^q , либо сечение деления σ_j^q в этой группе отличны от нуля. Мы будем исходить из системы балансных соотношений для

интервала групп $\mathfrak{F}$ в r, ϑ, z геометрии:

$$\begin{aligned} & \eta_{l,m} \Delta r_i \Delta z_k \left(\Psi_{i,j+1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} - \Psi_{i,j-1/2,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \mu_l v_i \Delta \vartheta_j \left(\Psi_{i,j,k+1/2,l,m}^{q,n+1/2} - \Psi_{i,j,k-1/2,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \Delta z_k \Delta \vartheta_j \times \\ & \times \left[\xi_{l,m} \left(A_{i+1/2} \Psi_{i+1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - A_{i-1/2} \Psi_{i-1/2,j,k,l,m}^{q,n+1/2} \right) + \frac{C_i}{w_{i,m}} \left(\alpha_{l,m+1/2} \Psi_{i,j,k,l,m+1/2}^{q,n+1/2} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \alpha_{l,m-1/2} \Psi_{i,j,k,l,m-1/2}^{q,n+1/2} \right) \right] + \sigma_t^q V_{i,j,k} \Psi_{i,j,k,l,m}^{q,n+1/2} - V_{i,j,k} \sum_{p \in \mathfrak{F}} \sum_{\kappa=0}^K \frac{2\kappa+1}{4\pi} \sigma_{s,\kappa}^{p \rightarrow q} \sum_{\nu=-\kappa}^{\kappa} Y_{\kappa}^{\nu}(\mu_l, \varphi_{l,m}) \Phi_{\kappa,i,j,k}^{p,\nu,n+1/2} = \\ & = V_{i,j,k} \frac{\chi^q}{4\pi} \sum_{p \in \mathfrak{F}} \nu \sigma_f^p \Phi_{i,j,k}^{p,0,n} + V_{i,j,k} F_{i,j,k,l,m}^q, \quad q, p \in \mathfrak{F}. \end{aligned} \quad (70)$$

Осуществляя процедуру, аналогичную описанной в предыдущем разделе, можно прийти к выводу, что в данном случае

$$\begin{aligned} \Sigma^{00} &= \sum_{q \in \mathfrak{F}} \left\{ \epsilon_{\beta}^q \sigma^q - \sum_{q \in \mathfrak{F}} \epsilon_{\beta}^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q} - \chi^q \sum_{q \in \mathfrak{F}} \epsilon_{\beta}^p \nu \sigma_f^p \right\}, \quad \Sigma^{11} = \sum_{q \in \mathfrak{F}} \left\{ \epsilon_{\beta}^q \sigma^q - \sum_{q \in \mathfrak{F}} \epsilon_{\beta}^p \sigma_{s,1}^{p \rightarrow q} \right\}, \\ Q_{i,j,k}^0 &= \sum_{q \in \mathfrak{F}} \chi^q \sum_{p \in \mathfrak{F}} \nu \sigma_f^p \left(\Phi_{i,j,k}^{p,0,n+1/2} - \Phi_{i,j,k}^{p,0,n} \right), \quad Q_{i,j,k}^{\alpha} = 0, \quad \alpha = r, \vartheta, z. \end{aligned} \quad (71)$$

Все остальные соотношения п. 5.1 с заменой $\mathfrak{T} \rightarrow \mathfrak{F}$ справедливы и в этом случае. Следует, однако, отметить, что в случае подкритической задачи без фурье-анализа основной гармоники ошибки не удастся определить вид спектральной функции ϵ_{β}^q , близкий к оптимальному.

В качестве критерия сходимости внешних итераций по источнику деления естественно воспользоваться поточечным критерием сходимости для плотности нейтронов деления:

$$\max_{i,j,k} \left| \frac{N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)} - N_{fis,i,j,k}^{neut,(n-1)}}{N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)}} \right| < \epsilon_{fis}^{dens}, \quad N_{fis,i,j,k}^{neut,(n)} = \sum_{q=1}^Q \nu \sigma_f^q \Phi_{i,j,k}^{q,(n)}, \quad (72)$$

где ϵ_{fis}^{dens} — заданная точность сходимости внешних итераций по источнику деления.

5. ОЦЕНКА ФОРМЫ СПЕКТРА ДЛЯ УСКОРЯЮЩИХ ПОПРАВКИ ДЛЯ ГОМОГЕННОЙ СРЕДЫ

Следуя [18], [19], получим оценку спектрального радиуса итерационного метода Гаусса—Зейделя (т.е. чистых неускоренных внешних итераций) решения системы групповых уравнений при наличии up-scattering на примере 1D плоской геометрии. В этом случае уравнение переноса на $n+1/2$ -й внешней итерации для интервала групп с up-scattering $q \in \mathfrak{T}$ может быть записано в виде

$$\mu \frac{\partial \Psi^{q,n+1/2}}{\partial x} + \sigma \Psi^{q,n+1/2}(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{p \leq q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} \Phi_l^{p,n+1/2}(x) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} \Phi_l^{p,n}(x) + F_l^q(x) \right], \quad q \in \mathfrak{T}, \quad (73)$$

где угловые моменты решения Φ_l^q определены следующим образом:

$$\Phi_l^q(x) = 2\pi \int_{-1}^1 \Psi^q(\mu', x) P_l(\mu') d\mu'.$$

Вычитая из исходного уравнения переноса уравнение (73) для $n+1/2$ -й внешней итерации, получим уравнение для поправок:

$$\mu \frac{\partial f^{q,n+1/2}}{\partial x} + \sigma f^{q,n+1/2}(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{p \leq q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n+1/2}(x) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n}(x) \right], \quad q \in \mathfrak{T}, \quad (74)$$

где

$$f^{q,n}(\mu, x) = \psi^q(\mu, x) - \psi^{q,n}(\mu, x), \quad f_l^{q,n}(x) = \Phi_l^q(x) - \Phi_l^{q,n}(x). \quad (75)$$

Представим пространственную зависимость поправок в виде разложения в ряд Фурье:

$$f^{q,n+1/2}(x, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) e^{i\lambda x} d\lambda, \quad \Phi_l^{q,n+1/2}(x, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_l^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) e^{i\lambda x} d\lambda. \quad (76)$$

Используя дополнительно предположение о гомогенности рассматриваемой среды, из уравнения (74) получим

$$i\mu\lambda f^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) + \sigma_t^q f^{q,n+1/2}(\lambda, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\sum_{q \leq l} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n+1/2}(\lambda) + \sum_{p > q} \sigma_{s,l}^{p \rightarrow q} f_l^{p,n}(\lambda) \right], \quad q \in \mathfrak{T}. \quad (77)$$

В матричной форме уравнение (77) можно переписать в следующем виде:

$$\mathbf{f}^{n+1/2}(\lambda, \mu) = \left(i\mu\lambda \hat{I} + \hat{T} \right)^{-1} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \left[\hat{D}_l \mathbf{f}_l^{n+1/2}(\lambda) + \hat{U}_l \mathbf{f}_l^n(\lambda) \right], \quad (78)$$

где $\hat{I}$ — единичная матрица, $\hat{T}$ — диагональная матрица полных сечений, $\mathbf{f}^{n+1/2}$ — зависящий от угла вектор ошибки, $\hat{D}_l$ и $\hat{U}_l$ — матрицы, составленные из l -х гармоник матриц сечений переходов, описывающих down-scattering и up-scattering соответственно для диапазона групп $q \in \mathfrak{T}$.

В случае изотропного рассеяния ($L = 0$), умножая уравнение (78) на $P_0(\mu) = 1$ и интегрируя его по всем углам с учетом соотношения

$$\int_0^1 \frac{d\mu}{1 + \lambda^2 \mu^2} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \lambda, \quad (79)$$

получим

$$\mathbf{f}_0^{n+1/2}(\lambda) = \hat{A}(\lambda) \mathbf{f}_0^n(\lambda) = \left(1 - \hat{C} \hat{D}_0 \right)^{-1} \hat{C} \hat{U}_0 \mathbf{f}_0^n(\lambda), \quad \hat{C} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \left(\frac{\lambda}{\hat{T}} \right), \quad (80)$$

где $\hat{C}$ — диагональная матрица с элементами

$$C_{q,q} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \left(\frac{\lambda}{\sigma_t^q} \right). \quad (81)$$

Матрица $\hat{A}$ в уравнении (80) есть итерационная матрица метода Гаусса—Зейделя, и ее собственные значения $\omega(\lambda)$ определяют скорость сходимости итерационного процесса для гармоник Фурье λ . Эти собственные значения и соответствующие им собственные вектора $\omega^q(\lambda)$, $q = 1, \dots, Q$, где q — число групп с up-scattering, могут быть определены, используя стандартную библиотеку расчета собственных значений. Спектральный радиус итерационного процесса определяется как максимальное значение собственного значения оператора $\hat{A}$ по всем гармоникам λ :

$$\rho = \max_{\lambda} \{ \rho_M(\lambda) \}, \quad \rho_M(\lambda) = \max_q \{ \omega^q(\lambda) \}, \quad q = 1, \dots, Q. \quad (82)$$

Этот максимум достигается при значении $\lambda = 0$ (см. [18], [19]). Используя разложение

$$\operatorname{arctg}(x) \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots, \quad |x| = 1,$$

получим, что для случая изотропного рассеяния

$$\mathbf{f}_0^{n+1/2}(0) = \hat{A}(0)\mathbf{f}_0^n(0) = (\hat{T} - \hat{D}_0)^{-1} \hat{U}_0 \mathbf{f}_0^n(0). \quad (83)$$

Собственный вектор оператора $\hat{A}(0)$, отвечающий максимальному собственному значению этого оператора (главный собственный вектор), описывает энергетическое распределение наиболее медленно убывающей гармоники ошибки. Для ее эффективного подавления именно энергетическое распределение этой гармоники (нормированное на 1) естественно использовать в качестве формы спектра для ускоряющих поправок ϵ^q (52) для достижения максимальной эффективности KP_1 -схемы ускорения внешних итераций (см. [18]).

В задаче термализации нейтронов при отсутствии поглощения нейтронов энергетическое распределение главного собственного вектора оператора $\hat{A}(0)$ совпадает с распределением Максвелла соответствующей температуры (см. [18]). Поэтому использование в качестве ϵ^q распределения Максвелла, усредненного по групповым интервалам (54), во многих случаях обеспечивает эффективность KP_1 -схемы ускорения внешних итераций сопоставимую с использованием главного собственного вектора оператора $\hat{A}(0)$.

Приведем здесь полученное в [19] выражение для итерационной матрицы KP_1 -схемы ускорения внешних итераций для случая изотропного рассеяния и гомогенной среды:

$$\hat{A}_{KP_1} = (1 - k\hat{\Xi}\hat{U})\hat{A} - k\hat{\Xi}\hat{U}, \quad k = a \left[a(a-b) + \frac{\lambda^2}{3} \right]^{-1}, \quad a = \sum_q \epsilon^q \sigma_t^q, \quad = \sum_q \sum_p \epsilon^p \sigma_{s,0}^{p \rightarrow q}, \quad (84)$$

где $\hat{A}$ — итерационная матрица метода Гаусса—Зейделя (80), $\hat{\Xi}$ — матрица, имеющая ранг 1, с элементами

$$\Xi_{q,p} = \epsilon^q, \quad q = 1, \dots, Q. \quad (85)$$

Как показали результаты численного эксперимента (см. [18]), спектральный радиус оператора определяется вторым собственным значением оператора $\hat{A}_{KP_1}$ (см. [18]). Для легких нуклидов, для которых эффект термализации существенен, второе собственное значение оператора $\hat{A}(0)$ значительно меньше первого, и, следовательно, эффект ускорения весьма значителен.

6. ОЦЕНКА ФОРМЫ СПЕКТРА ДЛЯ УСКОРЯЮЩИХ ПОПРАВК ДЛЯ ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ

Оценка главной собственной функции метода Гаусса—Зейделя для реальной неоднородной гетерогенной задачи является достаточно сложной задачей. В [18] предлагается использовать в алгоритме ускорения внешних итераций несколько функций ϵ^q по числу имеющихся материалов среды. Хотя такой подход не учитывает влияния на спектр нейтронов в зоне с некоторым материалом спектра нейтронов в соседних зонах с другими материалами, численный эксперимент, как уже отмечалось в разд. 3, показал его эффективность.

Однако не для всех материалов среды могут присутствовать переходы вверх по группам, обусловленные термализацией и (или) делением, которые используются при определении спектральной функции для материала. Для таких материалов можно воспользоваться спектральной функцией ϵ_{over}^q , полученной для однородной гомогенизированной среды. Для случая 3D геометрии гомогенизированные сечения среды могут быть рассчитаны по формулам

$$\bar{\sigma}_t^q = \frac{\sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sigma_{t,i,j,k}^q}{\sum_{i,j,k} V_{i,j,k}}, \quad \bar{\sigma}_{s,0}^{p \rightarrow q} = \frac{\sum_{i,j,k} V_{i,j,k} \sigma_{s,0,i,j,k}^{p \rightarrow q}}{\sum_{i,j,k} V_{i,j,k}}, \quad p, q = 1, \dots, Q. \quad (86)$$

7. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ KP_1 -СХЕМЫ УСКОРЕНИЯ ВНЕШНИХ ИТЕРАЦИЙ

В данном разделе мы представим численные результаты, иллюстрирующие эффективность согласованной KP_1 -схемы ускорения внешних итераций по области термализации нейтронов для 1D, 2D

и 3D геометрий в зависимости от выбора разностной схемы (AWDD схемы 2-го порядка точности и AWLD схемы 3-го порядка точности), числа групп и критерия сходимости итераций по области термализации нейтронов (64) или (65). AWLD схема отличается от LD схемы (см. [33], [34]) наличием адаптивного алгоритма коррекции отрицательных потоков (в одномерных геометриях и в r, z и r, ϑ, z геометриях (в последних двух геометриях коррекция использовалась только по угловой переменной); в x, z и x, y, z геометриях коррекция не применялась). Выбор спектральной функции ϵ_{β}^q в уравнениях (52) и (67), (68) проводился на основе определения спектра собственных значений оператора $\hat{A}_0$ (83) для каждого из материалов задачи. Расчетные времена для тестовых задач в 1D, 2D и 3D x, y, z геометриях приведены для ПК Intel Core i7 3930K, а для задач в 3D r, ϑ, z геометрии — для ПК Intel Core i7-6950X.

Используемый ниже в таблицах термин $P_L S_N$ -приближение означает, что для описания анизотропии рассеяния в задаче используется индикатриса рассеяния в P_L приближении, содержащем $L + 1$ гармоник индикатрисы рассеяния, включая нулевую, а в качестве квадратуры используется S_N квадратура порядка N .

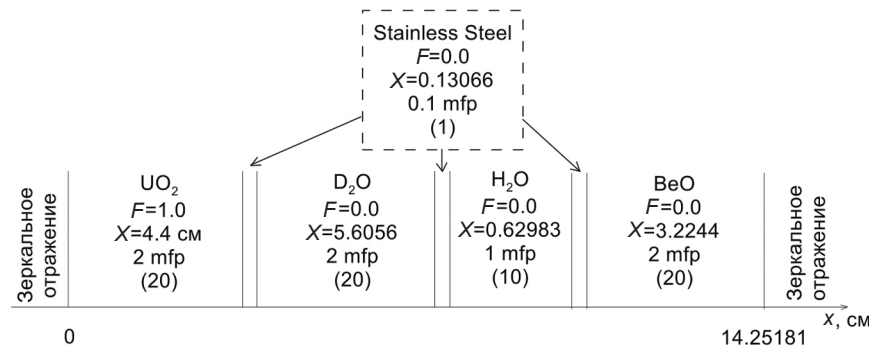
В табл. 1 и 2 приведено число внешних итераций по области термализации нейтронов при решении двух задач в 1D плоской и цилиндрической геометриях. В качестве S_n квадратуры при проведении расчетов для табл. 2–7 использовалась LCT_n триангулярная квадратура Лежандра—Чебышёва (см. [35], [36]).

В табл. 3 и 4 представлены результаты использования КР₁-схемы ускорения внешних итераций при решении задач радиационной защиты в 2D и 3D геометриях.

В табл. 5 представлены расчетные результаты для трех тестовых задач в x, y, z геометрии из [22], представляющих собой пластины с постоянным изотропным источником в 1-й группе и условием зеркального отражения на внешних границах. Пластина 1 состоит из графита и имеет размеры $63.594 \times 2.1198 \times 2.1198$ см ($30 \times 1 \times 1$ длин свободного пробега (mfp)). Пластина 2 состоит из тяжелой воды (D₂O) с размерами $84.084 \times 2.8028 \times 2.8028$ см ($30 \times 1 \times 1$ mfp). Пластина 3 имеет размеры $62.252 \times 2.8028 \times 2.8028$ см. По переменной x она состоит из трех слоев: железо (Fe), тяжелая вода (D₂O) и графит, размерами: 13.026 (10 mfp), 28.028 (10 mfp) и 21.198 см (10 mfp) соответственно. Для пластин 1–3 использовалась пространственная сетка из $30 \times 2 \times 2$ интервалов. Для пластины 3

Таблица 1. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбора критерия сходимости итераций при расчете в $P_5 S_{16}$ приближении топливной ячейки в плоской геометрии из [20] (фиг. 1) на пространственной сетке из 73 ячеек при точности сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$ соответственно. В скобках приведено число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Разностная схема	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
PO3-6.7	SCALE-6.1.2, v7.0-238n	90	AWDD	8 (43)	2.03E-2 (5.76E-2)	5	1.69E-2
			AWLD	8 (43)	3.80E-2 (1.31E-1)	5	2.99E-2
PO3-6.7	SCALE-6.1.2, V7-200N	34	AWDD	8 (41)	7.55E-3 (9.63E-3)	6	7.03E-3
			AWLD	8 (41)	1.46E-2 (3.26E-2)	6	1.38E-2
PO3-6.7	SCALE-6.1.2, V7-27N	13	AWDD	9 (28)	1.30E-3 (2.34E-3)	7	1.30E-3
			AWLD	9 (28)	2.86E-3 (4.69E-3)	7	1.56E-3



Фиг. 1. Топливная ячейка в плоской геометрии из [20]. Здесь F — внутренний изотропный источник; X — размер зоны в см, а также в длинах свободного пробега (mfp); в скобках приведено число пространственных интервалов в зоне.

Таблица 2. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбора критерия сходимости итераций при расчете в P_5S_{16} приближении радиационной защиты РУ ВВЭР-1000 в 1D цилиндрической геометрии на пространственной сетке из 213 ячеек при точности сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$ соответственно. В скобках приведено число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Разностная схема	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
PO3-6.7	BGL1000, 47n+20g	5	AWDD	5 (54)	2.553E-2 (1.14E-1)	5	2.52E-2
			AWLD	5 (54)	4.22E-2 (1.13E-1)	5	4.19E-2
PO3-6.7	SCALE-6.1.2, V7-200N47G	34	AWDD	16 (139)	6.73E-1 (4.91)	11	5.32E-1
			AWLD	16 (139)	6.17E-1 (2.78)	11	5.31E-1
PO3-6.7	SCALE-6.1.2, V7-27N19G	13	AWDD	9 (105)	3.49E-2 (3.32E-1)	7	3.07E-3
			AWLD	9 (105)	5.65E-2 (4.78E-1)	7	4.87E-2

для каждой из зон по переменной использовалась сетка из 10 интервалов; постоянный изотропный источник был помещен в зоне с железом.

Приведенное в табл. 5 число внешних итераций при использовании библиотеки V7-27N совпадает с числом итераций из [22]. Данные тестовые задачи могут быть решены также и в x, z геометрии. Результаты для этой геометрии приведены в табл. 6.

Для сравнения, в табл. 1, 2, 3, 5, 6 в скобках приведено также число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций. Из-за медленной сходимости внешних итераций для варианта с тяжелой водой (табл. 5 и 6) в этом случае использовался более слабый критерий сходимости $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$.

В табл. 7 представлены результаты использования KP_1 -схемы ускорения внешних итераций при решении подкритической задачи (ADS бенчмарк [37]), изображенной на фиг. 1, в зависимости от значения k_{eff} для решаемой задачи. Расчет проводился с заданным внутренним источником со спектром в области мишени, характерным для вторичных нейтронов, порождаемых пучком протонов с энер-

Таблица 3. Число внешних итераций и расчетные времена при расчете радиационной защиты РУ ВВЭР-1000 в 2D r, z геометрии на пространственной сетке 190×245 в P_3S_{16} приближении для нейтронов с $E > 3$ МэВ и P_3S_8 приближении для нейтронов с $E < 3$ МэВ и фотонов с точностью сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$. В скобках приведено число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Разностная схема	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
КАСКАД-С-4.0	BGL1000, 47n+20g	5	AWDD	11 (92)	2.55 (7.36)	10	2.45
			AWLD	8 (93)	4.54 (17.0)	7	4.38
КАСКАД-С-4.0	SCALE-6.1.2, V7-200N47G	34	AWDD	20 (237)	11.6 (68.6)	14	10.0
			AWLD	26 (239)	27.7 (144.4)	12	22.4
КАСКАД-С-4.0	SCALE-6.1.2, V7-27N19G	13	AWDD	11 (181)	2.41 (20.5)	10	2.12
			AWLD	11 (182)	5.76 (45.2)	10	5.29

Таблица 4. Число внешних итераций и расчетные времена при расчете радиационной защиты РУ ВВЭР-1000 в 3D r, θ, z геометрии на пространственной сетке $190 \times 120 \times 192$ по программе КАТРИН в P_3S_{16} приближении для нейтронов с $E > 3$ МэВ и P_3S_8 приближении для нейтронов с $E < 3$ МэВ и фотонов с точностью сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Разностная схема	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
КАТРИН-3.5	BGL1000, 47n+20g	5	AWDD	12	9 час. 42 мин	12	9 час. 42 мин
			AWLD	16	17 час. 41 мин	15	18 час. 18 мин
КАТРИН-3.5	SCALE-6.1.2, V7-200N47G	34	AWDD	30	16 час. 48 мин	17	11 час. 12 мин
			AWLD	29	34 час.	18	28 час. 54 мин
КАТРИН-3.5	SCALE-6.1.2, V7-27N19G	13	AWDD	13	9 час. 37 мин	12	9 час. 23 мин
			AWLD	16	19 час. 10 мин	15	18 час. 39 мин

гией 1 ГэВ, падающим перпендикулярно на нижний торец мишени из свинца, с использованием 28 групповых констант, подготовленных программой CONSYST (см. [38]) без учета термализации нейтронов. Следует отметить, что так как в рассчитываемой композиции отсутствует замедлитель, число итераций без ускорения в этой задаче весьма велико для большинства групп. Данная задача решалась с $\epsilon^q = \epsilon_{aver}^q$, так как использование $\epsilon^q = \epsilon_{\beta}^q$ в данной задаче приводит к неустойчивому алго-

Таблица 5. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбора критерия сходимости итераций при расчете с использованием LD схемы в P_3S_8 приближении пластины в x, y, z геометрии из [22] на пространственной сетке из $30 \times 2 \times 2$ ячеек при точности сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-4}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-4}$ соответственно. В скобках приведено число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций (из-за медленной сходимости внешних итераций для варианта с тяжелой водой использовался критерий сходимости $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$)

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Задача	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
КАТРИН-3.5	SCALE-6.1.2, v7.0-238n	90	Графит	12 (421)	8.08E-1 (18.4)	7	6.25E-1
			Тяжелая вода (D ₂ O)	7 (904)	4.86E-1 (27.6)	5	4.31E-1
			Fe + D ₂ O + графит	24 (410)	1.38 (18.2)	15	1.11
КАТРИН-3.5	SCALE-6.1.2, V7-200N	34	Графит	10 (381)	3.63E-1 (6.46)	7	3.24E-1
			D ₂ O	7 (900)	2.74E-1 (11.0)	6	2.72E-1
			Fe + D2O + графит	19 (388)	5.38E-1 (6.26)	13	4.69E-1
КАТРИН-3.5	SCALE-6.1.2, V7-27N	13	Графит	6 (277)	5.78E-2 (1.53)	6	5.71E-2
			D ₂ O	6 (848)	5.64E-2 (3.78)	6	6.30E-2
			Fe + D2O + графит	13 (262)	1.13E-1 (1.47)	11	1.07E-1

ритму в силу существенных граничных эффектов между зоной замедлителя и зонами с делящимися материалами.

При использовании для данной задачи 28 групповых констант программы CONSYST, учитывающих термализацию нейтронов, допустимо использовать $\epsilon^q = \epsilon_\beta^q$. В этом случае внешние итерации по источнику деления (группы 1–28) чередуются с внешними итерациями по области термализации нейтронов (группы 24–28).

8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как следует из приведенных численных результатов, а также из опыта решения практических задач, KP_1 -схема ускорения внешних итераций, согласованная с разностной аппроксимацией уравнения переноса, а также использующая спектральные функции ϵ_β^q , определяемые на основе оценки спектра собственных значений оператора $\hat{A}(0)$ (83) для материалов задачи, является устойчивой и обеспечивает существенный вычислительный выигрыш. В частности, время расчета радиационной защиты РУ ВВЭР-1000 в 3D r, ϑ, z геометрии с библиотекой V7-27N19G (табл. 4) при переходе от ϵ_{aver}^q к ϵ_β^q уменьшилось на 20%.

Использование своей спектральной функции ϵ_β^q для каждого материала задачи целесообразно при наличии протяженных геометрических зон с различными материалами, когда можно пренебречь взаимным влиянием спектров нейтронов в соседних зонах. В задачах радиационной защиты это требование обычно соблюдается. Если же задача состоит из плотно упакованных зон с различными ма-

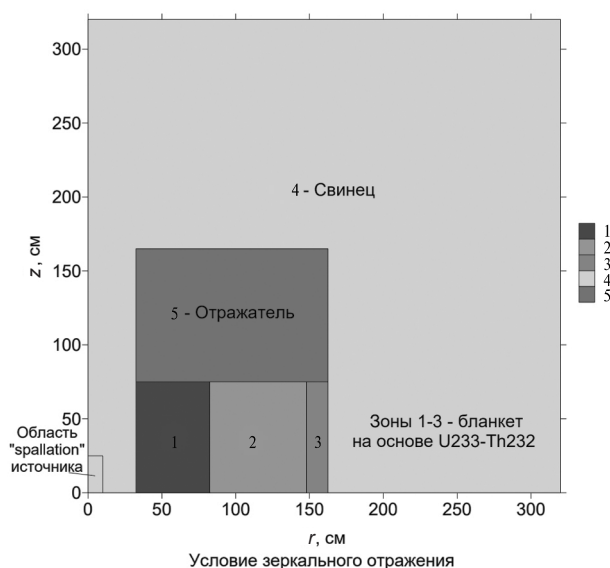
Таблица 6. Число внешних итераций по области термализации нейтронов в зависимости от выбора критерия сходимости итераций при расчете пластины в x, z геометрии из [22] с использованием LD схемы в P_3S_8 приближении на пространственной сетке из 30×2 ячеек при точности сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-4}$, $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-4}$ соответственно. В скобках приведено число внешних итераций и расчетное время без ускорения внешних итераций (из-за медленной сходимости внешних итераций для варианта с тяжелой водой использовался критерий сходимости $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$)

Программа	Библиотека сечений	Число групп в области термализации	Задача	Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{flux} = 10^{-3}$		Критерий сходимости итераций $\epsilon_{upsc}^{dens} = 10^{-3}$	
				Число итераций	Расчетное время, мин	Число итераций	Расчетное время, мин
КАСКАД-4.0	SCALE-6.1.2, v7.0-238n	90	Графит	12 (421)	8.08E-1 (6.47)	7	6.09E-1
			Тяжелая вода (D ₂ O)	7 (905)	4.91E-1 (9.96)	5	4.37E-1
			Fe + D ₂ O + графит	23 (481)	4.43E-1 (6.16)	15	3.51E-1
КАСКАД-4.0	SCALE-6.1.2, V7-200N	34	Графит	10 (381)	4.00E-1 (2.19)	7	3.48E-1
			D ₂ O	5 (900)	2.59E-3 (3.85)	5	2.61E-1
			Fe + D ₂ O + графит	19 (381)	1.70E-1 (2.10)	13	1.48E-1
КАСКАД-4.0	SCALE-6.1.2, V7-27N	13	Графит	6 (277)	7.35E-2 (5.14E-1)	6	7.13E-2
			D ₂ O	7 (848)	7.04E-2 (1.39)	6	6.95E-2
			Fe + D ₂ O + графит	11 (256)	3.60E-2 (4.70E-1)	8	3.20E-2

Таблица 7. Число внешних итераций и расчетное время (в круглых скобках) при расчете подкритического ADS бенчмарка (фиг. 2) в r, z геометрии по программе КАСКАД-С-4.0 в P_5S_8 приближении с пространственной r, z сеткой 51×46 , поточечным критерием сходимости внутренних и внешних итераций $\epsilon_{in} = 10^{-4}$ и $\epsilon_{fis}^{dens} = 10^{-3}$ соответственно

k_{eff} задачи	Разностная схема	Число внешних итераций и расчетное время, мин	
		Без ускорения внешних итераций	КР ₁
0.945	AWDD	66 (1.44)	5 (0.27)
	AWLD	67 (3.05)	6 (0.57)
0.965	AWDD	89 (1.90)	5 (0.29)
	AWLD	89 (3.90)	6 (0.57)
0.985	AWDD	146 (2.97)	9 (0.46)
	AWLD	147 (6.53)	9 (0.86)

териалами, когда длина свободного пробега нейтрона в зоне существенно больше ее размеров, целесообразно использовать спектральную функцию ϵ_{over}^q , усредненную по материалам задачи. К примерам таких задач можно отнести расчет активной зоны с отражателем на k_{eff} , в частности, расчет 2D C5G7MOX (см. [39]) бенчмарка и его 3D обобщений. Поэтому в расчетных программах РОЗ-6, КАСКАД-С и КАТРИН введен дополнительный признак, позволяющий пользователю вместо стандартно используемого набора спектральных функций ϵ_{β}^q выбрать для решаемой задачи использование ϵ_{aver}^q .



Фиг. 2. Геометрия ADS бенчмарка в r, z геометрии.

Использование интегрального по рассеянным вверх по энергии тепловым нейтронам, поточечно-го критерия сходимости (65) обеспечивает дополнительное уменьшение числа внешних итераций по области термализации нейтронов и уменьшение расчетных времен по сравнению с поточечным по групповым критерием сходимости (64) при сохранении достаточной точности определения потока тепловых нейтронов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *White J. E., Ingersoll D. T., Slater C. O., Roussin R. W.* BUGLE-96: A Revised Multigroup Cross-Section Library derived from ENDF/B-VI for LWR and Pressure Vessel Dosimetry Applications // DLC-185, Radiation Safety Information Computational Center. 1996.
2. *Bucholz J., Antonov S., Belousov S.* BGL440 and BGL1000 Broad Group Neutron/Photon Cross Section Libraries Derived from ENDF/B-VI Nuclear Data // IAEA, INDC(BUL)-15. 1996.
3. SCALE 6.1: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design // ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, RSICC code package C00785. 2011.
4. *Wieselquist W. A., Lefebvre R. A. and Jessee M. A., Eds.* SCALE Code System // ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee. 2020.
5. *Manturov G. N., Nikolaev M. N. and Tsiboulia A. M.* BNAB-93 Group Data Library, Part1: Nuclear Data for the Calculations of Neutron and Photon Radiation Fields // Vienna, IAEA, INDC(CCP)-409. 1997.
6. *Кощеев В. Н., Мантуров Г. Н., Николаев М. Н., Цибуля А. М.* Библиотека групповых констант БНАБ-РФ для расчетов реакторов и защиты // Изв. вузов. Ядерная энергетика. 2014. № 3. С. 93–101.
7. *Марчук Г. И., Лебедев В. И.* Численные методы в теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1981.
8. *Белл Д., Глестон С.* Теория ядерных реакторов. пер. с англ., М.: Атомиздат, 1974.
9. *Лебедев В. И.* О КР-методе ускорения сходимости итераций при решении кинетического уравнения // Числ. методы решения задач матем. физ. М., 1966. С. 154–176.

10. *Kopp H. J.* Synthetic method solution of the transport equation // Nucl. Sci. and Eng. 1963. V. 17. N 1. P. 65–74.
11. *Alcouffe R. E.* Diffusion synthetic acceleration methods for the diamond-differenced discrete-ordinates equations // Nucl. Sci. and Eng. 1977. V. 64. N 2. P. 344–355.
12. *Adams M. L., Larsen E. W.* Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations // Progress in Nuclear Energy. 2002. V. 40. Iss. 1. P. 3–159.
13. *Voloschenko A. M.* Completely consistent P_1 synthetic acceleration scheme for charged-particle transport calculations // Proc. 1996 Top. Meet. Radiation Protection and Shielding, April 21–25, 1996, No. Falmouth, USA. V. 1. P. 408–415.
14. *Voloschenko A. M.* Experience in the use of the consistent P_1 synthetic acceleration scheme for transport equation in 2D geometry // Proc. of Inter. Conf. on Math. and Comput., Reactor Phys., and Environmental Anal. in Nucl. Appl., 27–30 September, 1999, Madrid, Spain, V. 1. P. 104–113.
15. *Волощенко А. М.* KP_1 -схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в двумерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2001. Т. 41. № 9. С. 1379.
16. *Voloschenko A. M.* Consistent P_1 synthetic acceleration scheme for transport equation in 3D geometries // Proc. of Intern. Conf. on Math. and Comput., Supercomputing, Reactor Phys., and Nucl. and Biological Applications. Avignon, France, September 12–15, 2005, paper 070.
17. *Волощенко А. М.* KP_1 -схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в трехмерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. № 2. С. 1–30.
18. *Adams B. T., Morel J. E.* A Two-Grid Acceleration Scheme for the Multigroup S_N Equations with Neutron Upscattering // Nucl. Sci. Eng. 1993. V. 115. P. 253.
19. *Averin A. V., Voloschenko A. M.* Consistent P_1 synthetic acceleration method for outer iterations // Transp. Theory and Stat. Phys. 1994. V. 23. N 5. P. 701–730.
20. *Adams B. T., Morel J. E.* An Acceleration Scheme for the Multigroup S_N Equations with Fission and Thermal Upscattering // Proc. of Joint Inter. Conf. on Math. Meth. and Supercomput. for Nucl. Appl., Saratoga Springs, New York, USA, 5–9 October, 1997. V. 1. P. 343.
21. CNCSN 2009: One, Two- and Three-Dimensional Coupled Neutral and Charged Particle Discrete Ordinates Parallel Multi-Threaded Code System // RSICC code package CCC-726, 2009.
22. *Evans T. M., Clarno K. T., Morel J. E.* A Transport Accelerating Scheme for Multigroup Discrete Ordinates with Upscattering // Nucl. Sci. Eng. 2010. V. 165. P. 292–304.
23. *Басс Л. П., Волощенко А. М. и Гермогенова Т. А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М., ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1986.
24. *Carlson B. G.* A method of characteristics and other improvements in solution methods for the transport equation // Nucl. Sci. Eng. 1976. V. 61. P. 408.
25. *Voloschenko A. M., Germogenova T. A.* Numerical Solution of the Time-Dependent Transport Equation with Pulsed Sources // Transp. Theory and Stat. Phys. 1994. V. 23. N 6. P. 845.
26. *Alcouffe R. E.* An Adaptive Weighted Diamond-Differencing Method for Three-Dimensional XYZ Geometry // TANS. 1993. V. 68A. P. 206.
27. *Larsen E. W.* Diffusion-synthetic acceleration methods for discrete-ordinates problems // Transp. Theory and Stat. Phys. 1984. V. 13. N 1&2. P. 107–126.
28. *Волощенко А. М., Воронков А. В., Сычугова Е. П.* Согласованная P_1SA схема ускорения внутренних и внешних итераций для уравнения переноса нейтронов и фотонов в одномерных геометриях в пакете РЕАКТОР // Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. 1996. № 2.
29. *Adams M. L., Wareing T. A.* Diffusion-synthetic acceleration given anisotropic scattering, general quadratures, and multidimensions // Trans. Am. Nucl. Soc. 1993. V. 68A. P. 203–204.
30. *Марчук Г. И.* Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
31. *Волощенко А. М.* KP_1 -схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в трехмерной геометрии, согласованная с нодальными схемами. Основные уравнения и численные результаты // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. Т. 59. № 3. С. 441–464.

32. Волощенко А. М. KP_1 -схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в трехмерной геометрии, согласованная с нодальными схемами II. Метод расщепления для решения P_1 -системы для ускоряющих поправок // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. Т. 59. № 5. С. 57–82.
33. Walters W. F. and O'Dell R. D. A Comparison of Linear Nodal, Linear Discontinuous and Diamond Schemes for Solving the Transport Equation in (x, y) Geometry // TANS. 1981. V. 39. P. 465.
34. Alcouffe R. E. A Robust Linear Discontinuous Method for the RZ S_N Transport Equation // Trans. Am. Nucl. Soc. 2003. V. 89. P. 363–366.
35. Lathrop K. D., Carlson B. G. Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation // LANL Report LA-3186. 1965. P. 1–48.
36. Волощенко А. М., Руссков А. А. Квадратурные формулы типа Гаусса для сферы с узлами, обладающими симметрией правильной призмы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2020. Т. 60. № 7. С. 1095–1110.
37. Slessarev I., Tchistiakov A. IAEA-ADS Benchmark (Stage 1), Results and Preliminary Analysis // RCM-Meeting, Bologna, March 24–26, 1997.
38. Мантуров Г. Н., Николаев М. Н., Цибуля А. М. Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения // Препринт ФЭИ-2828. Обнинск. 2000. С. 1–41.
39. Lewis E. E., Smith M. A., Tsoulfanidis N., Palmiotti G., Taiwo T. A., Blomquist R. N. Benchmark specification for Deterministic 2-D/3-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial 20omogenization (C5G7 MOX), NEA/NSC/DOC(2001)4.

KP_1 -SCHEME FOR ACCELERATION OF UPSCATTER ITERATIONS OVER NEUTRON THERMALIZATION REGION AND IN THE FISSION SOURCE WHEN SOLVING A SUBCRITICAL BOUNDARY VALUE PROBLEM

A. M. Voloshchenko^{a,*}

^a 1125047, Moscow, Miusskaya pl., 4, Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, Russia

*e-mail: volosch@kiam.ru

Received 7 February, 2024

Revised 22 February, 2024

Accepted 3 April, 2024

Abstract. For the transport equation in three-dimensional r, ϑ, z geometry, a KP_1 -scheme for accelerating the convergence of upscatter iterations over the neutron thermalization region and the fission source when solving a subcritical boundary value problem is constructed, consistent with the Weighted Diamond Differentiation (WDD) scheme, and its generalization to the case of nodal Linear Discontinuities (LD) and Linear Best (LB) schemes of the 3rd and 4th order of accuracy in spatial variables is considered. To solve the P_1 system for accelerating corrections, an algorithm based on the use of a cyclic splitting method was used, similar to the one used earlier in the construction of the KP_1 -scheme for accelerating the convergence of internal iterations. An algorithm for determining the energy dependence for accelerating corrections of the KP_1 -scheme for accelerating the convergence of upscatter iterations is studied. The question of choosing a criterion for the convergence of upscatter iterations is considered, and an integral criterion for the convergence of upscatter iterations in the field of neutron thermalization is proposed for thermal neutrons scattered upward in energy. A modification of the algorithm for the case of three-dimensional x, y, z geometry is considered. Numerical examples of using KP_1 -schemes for accelerating the convergence of upscatter iterations to solve typical neutron transport problems in three-dimensional geometry are given.

Keywords: KP_1 -scheme for accelerating upscatter iterations, choice of the spectral function and the criterion of convergence of upscatter iterations, transport equation.