

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Е. Троцкий, О математических свойствах S_n -методов
решения кинетических уравнений,
Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1975, том 15, но-
мер 5, 1209–1221

<https://www.mathnet.ru/zvmmf6239>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подра-
зумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.9.175

14 мая 2025 г., 04:59:21



УДК 517.9:533.9

О МАТЕМАТИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ S_n -МЕТОДОВ
РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

В. Е. ТРОЩИЕВ

(Москва)

Дается новая, математически строгая формулировка дискретного S_n -метода. Устанавливается ряд свойств этого метода, а также непрерывного S_n -метода, и исследуется их взаимосвязь и различия.

В работе [1] для численного решения сферически-симметричного кинетического уравнения сформулирован дискретный S_n -метод (DS_n -метод). Численные результаты, приводимые в [1], а также опыт применения метода в нашей практике показывают, что DS_n -метод несколько менее точен, чем непрерывный S_n -метод [2], но его использование выгодно ввиду простоты и экономичности алгоритма. Хотя DS_n -метод в [1] обсуждается весьма подробно, тем не менее многое остается неясным, прежде всего потому, что вывод метода математически не строг и в сильной степени основан на физических аналогиях и интуитивных догадках, что отмечается самим автором [1].

Данная статья посвящается исследованию свойств DS_n -метода и его взаимосвязей с S_n -методом.

Сначала дается математически строгая формулировка некоторого метода и затем доказывается его эквивалентность алгоритму DS_n -метода [1]. DS_n -Метод при этом получает новую интерпретацию, а его физическое и геометрическое содержание становится совершенно прозрачным.

Исходя из новой формулировки исследуется погрешность аппроксимации DS_n - и S_n -методов и устанавливается, что в окрестности центра сферы происходит понижение порядка аппроксимации. В то же время доказывается, что в центре сферы при некоторых условиях имеет место сходимость методов.

Далее показано, что DS_n -метод принадлежит к классу квазидиффузионно согласованных разностных схем [3], основанных на использовании уравнений квазидиффузии [4].

В заключение сделаны замечания о свойствах DS_n -метода для бесконечного цилиндра и приведены общие (трехмерные) кинетические уравнения в дивергентной форме для цилиндрической и сферической систем координат. Применяя к этим уравнениям интегроинтерполяционный метод [5], можно легко строить консервативные аппроксимации типа S_n -методов для многомерных геометрий.

Автор пользуется приятным случаем поблагодарить В. Я. Гольдина и В. Ф. Юдинцева за ценные обсуждения ряда вопросов, рассматриваемых в статье.

§ 1. Кинетическое уравнение и разностная сетка

Рассмотрим кинетическое уравнение для сферически-симметричной геометрии:

$$LN(r, \mu) \equiv \frac{\partial}{r^2 \partial r} (r^2 \mu N) + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1 - \mu^2}{r} N \right) + \sigma(r) N = S(r),$$

$$(1) \quad S(r) = \frac{\sigma(r) [1 + f(r)]}{2} n^{(0)}(r) + \frac{Q(r)}{2},$$

$$n^{(0)}(r) = \int_{-1}^{+1} N(r, \mu) d\mu.$$

Это уравнение решается относительно функции $N(r, \mu)$ в прямоугольнике

$$D = \{0 \leq r \leq R, -1 \leq \mu \leq +1\}$$

с граничным условием

$$(2) \quad N(R, \mu) = \varphi(\mu) \text{ для } \mu \leq 0.$$

Отметим, что из самого уравнения (1) можно получить два следствия: уравнение при $\mu = -1$

$$(1') \quad -\frac{\partial N(r, -1)}{\partial r} + \sigma(r) N(r, -1) = S(r)$$

и условие при $r = 0$

$$(2') \quad N(0, \mu) = \text{const.}$$

В уравнениях (1), (1') функции $\sigma(r)$, $f(r)$ и $Q(r)$ являются заданными и характеризуют свойства среды (см. [6, 7]).

Область D разобьем на ряд ячеек, ограниченных координатными линиями $r = r_p$, $\mu = \mu_q$, где $p = 0, 1, \dots, \omega$ и $q = 0, 1, \dots, k$. Линии $r = 0$, $r = R$, $\mu = -1$, $\mu = 0$, $\mu = +1$ входят в число координатных линий, образующих сетку задачи (см. фигуру). Обозначим через $d_{p,q}$ ячейку, ограниченную линиями $r = r_{p-1}$, $r = r_p$ и $\mu = \mu_{q-1}$, $\mu = \mu_q$, а через $\Gamma_{p,q}$ — контур этой ячейки. Шаги сетки обозначим через $\Delta r_p = r_p - r_{p-1}$, $\Delta V_p = (r_p^3 - r_{p-1}^3)/3$, $\Delta \mu_q = \mu_q - \mu_{q-1}$.

Решение задачи (1), (2) разностными методами на построенной сетке обычно осуществляется следующим образом. Правая часть $S(r)$ предполагается известной. Сначала решаются уравнения (1') и (1) для $\mu \leq 0$ с граничным условием (2). Затем решается уравнение (1) для $\mu > 0$; при этом в качестве граничного условия при $r = 0$ вместо (2') берется

$$(3) \quad N(0, \mu) = N(0, -\mu).$$

Такой порядок решения определяется направлением характеристик — траекторий частиц у дифференциального оператора (1).

§ 2. Формулировка DS_n -метода по Карлсону (см [1])

Рассматривается уравнение

$$(4) \quad \mu \frac{\partial N}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial N}{\partial \mu} + \sigma N = S.$$

Пусть в ячейке d_{pq} через N_p обозначен поток в точке r_p для некоторого угла $\bar{\mu}$ и, аналогично, N_q — поток в направлении μ_q для некоторой точки \bar{r} , где

$$\bar{r}_p = 1/2(r_{p-1} + r_p) = r_{p-1/2}.$$

Вводятся обозначения:

$$s_p = \frac{\Delta r_p}{r_p'}, \quad r_p' = \frac{2}{3} \frac{r_p^3 - r_{p-1}^3}{r_p^2 - r_{p-1}^2}.$$

кроме того среднее значение величины $(1-\mu^2)/\Delta\mu_q$ в ячейке d_{pq} обозначается через γ_q .

Далее производные заменяются отношениями

$$\frac{\partial N}{\partial r} \sim \frac{N_p - N_{p-1}}{\Delta r_p}, \quad \frac{\partial N}{\partial \mu} \sim \frac{N_q - N_{q-1}}{\Delta \mu_q}$$

и полагается $N_q = N_{p-1} + N_p - N_{q-1}$.

Теперь после усреднения уравнения (4) по ячейке d_{pq} получаются разностные уравнения DS_n -метода:

$$(5) \quad (\bar{\mu}_q + \gamma_q s_p + 1/2 \sigma_{p-1/2} \Delta r_p) N_p + (-\bar{\mu}_q + \gamma_q s_p + 1/2 \sigma_{p-1/2} \Delta r_p) N_{p-1} = \Delta r_p S_p + 2\gamma_q s_p N_{q-1}.$$

Чтобы повысить точность уравнений (5), далее предлагается их видоизменить так, чтобы в них проявился закон сохранения частиц, хотя бы в интегральной по μ форме, и была учтена сферичность задачи. Это дает рекуррентное соотношение *) для вычисления γ_q :

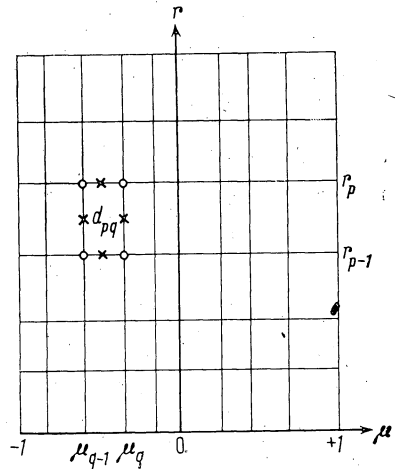
$$(6) \quad \gamma_q = \gamma_{q-1} - \bar{\mu}_q - \bar{\mu}_{q-1}, \quad \gamma_1 = -\bar{\mu}_1,$$

а $\bar{\mu}_q$ всюду в (5) домножается на

$$(7) \quad U_p = 3/2 (r_p^2 + r_{p-1}^2) (r_p^2 + r_p r_{p-1} + r_{p-1}^2)^{-1}.$$

Окончательные уравнения DS_n -метода принимают вид

$$(8) \quad N_p \left(\bar{\mu}_q \frac{r_{p-1}^2 + r_p^2}{2} + r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right) +$$



*) Соотношение (6) верно только для постоянного шага $\Delta\mu_q = \Delta\mu$; его обобщение на переменные шаги $\Delta\mu_q$ сделано ниже, см. (22').

$$\begin{aligned}
 & +N_{p-1} \left(-\bar{\mu}_q \frac{r_{p-1}^2 + r_p^2}{2} + r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right) = \\
 & = S_{p-1/2} \Delta V_p + 2r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q N_{q-1}.
 \end{aligned}$$

Отметим, что DS_n -метод (8) — это совокупность разностных схем, параметром которой является правило вычисления $\bar{\mu}_q$ на интервале (μ_{q-1}, μ_q) .

§ 3. Новая формулировка DS_n -метода и доказательство эквивалентности

Следуя [3], рассмотрим интегральный закон изменения числа частиц в ячейке d_{pq} , который получается умножением уравнения (1) на элементарный фазовый объем $r^2 dr d\mu$ и интегрированием его по ячейке d_{pq} с применением формулы Грина:

$$\begin{aligned}
 (9) \quad & \int_{\Gamma_{pq}} -r^2 \mu N d\mu + r(1-\mu^2) N dr + \iint_{d_{pq}} \sigma N r^2 dr d\mu = \\
 & = \iint_{d_{pq}} \frac{\sigma(1+f)}{2} n^{(0)} r^2 dr d\mu + \iint_{d_{pq}} \frac{Q}{2} r^2 dr d\mu, \quad p=1, 2, \dots, \omega, \\
 & q=1, 2, \dots, k.
 \end{aligned}$$

Значения неизвестной функции $N(r, \mu)$, отнесенные к узлам (r_p, μ_q) , обозначим через N_{pq} . Для вычисления в (9) контурных и плоских интегралов применим следующие квадратурные формулы (эти формулы позволяют нам получить DS_n - и S_n -методы):

$$(10) \quad \int_{\mu_{q-1}}^{\mu_q} r^2 \mu N(r, \mu) d\mu \Big|_{r=r_p} = r_p^2 \frac{1}{2} (\mu_{q-1}^+ N_{p,q-1} + \mu_q^- N_{pq}) \Delta \mu_q,$$

$$(11) \quad \iint_{r_{p-1}}^{r_p} r(1-\mu^2) N(r, \mu) dr \Big|_{\mu=\mu_q} = (1-\bar{\mu}_q^2) \frac{1}{2} (r_{p-1}^+ N_{p-1,q} + r_p^- N_{pq}) \Delta r_p,$$

$$(12) \quad \iint_{d_{pq}} \sigma(r) N(r, \mu) r^2 dr d\mu = \frac{1}{4} \sigma_{p-1/2} (N_{p-1,q-1} + N_{p-1,q} + N_{p,q-1} + N_{pq}) \Delta \mu_q \Delta V_p.$$

Из (12) следует, что

$$(13) \quad n_p^{(0)} = \sum_{q=1}^k \frac{1}{2} (N_{p,q-1} + N_{pq}) \Delta \mu_q,$$

$$\begin{aligned}
 (14) \quad & \iint_{d_{pq}} \frac{\sigma(r) [1+f(r)]}{2} n^{(0)}(r) r^2 dr d\mu = \\
 & = \frac{1}{4} \sigma_{p-1/2} (1+f_{p-1/2}) (n_{p-1}^{(0)} + n_p^{(0)}) \Delta \mu_q \Delta V_p.
 \end{aligned}$$

Отметим еще формулу

$$n_p^{(1)} = \int_{-1}^{+1} \mu N d\mu = \sum_{q=1}^k \frac{1}{2} (\mu_{q-1}^+ N_{p,q-1} + \mu_q^- N_{p,q}) \Delta\mu_q,$$

вытекающую из (10).

Формулы (10)–(14), подставленные в интегральное соотношение (9), определяют семейство схем для решения уравнения (1); параметрами этого семейства схем являются правила вычисления величин μ_{q-1}^+ , μ_q^- , $\tilde{\mu}_q^2$ и r_{p-1}^+ , r_p^- . Получающаяся при этом система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} (15) \quad & N_{pq} \left[r_p^2 \mu_q^- + r_p^- \frac{1 - \tilde{\mu}_q^2}{\Delta\mu_q} \Delta r_p + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right] + \\ & + N_{p,q-1} \left[r_p^2 \mu_{q-1}^+ - r_p^- \frac{1 - \tilde{\mu}_{q-1}^2}{\Delta\mu_q} \Delta r_p + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right] + \\ & + N_{p-1,q-1} \left[-r_{p-1}^2 \mu_{q-1}^+ - r_{p-1}^+ \frac{1 - \tilde{\mu}_{q-1}^2}{\Delta\mu_q} \Delta r_p + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right] + \\ & + N_{p-1,q} \left[-r_{p-1}^2 \mu_q^- + r_{p-1}^+ \frac{1 - \tilde{\mu}_q^2}{\Delta\mu_q} \Delta r_p + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right] = 2S_{p-1/2} \Delta V_p, \\ & S_{p-1/2} = \frac{1}{4} \sigma_{p-1/2} (1 + f_{p-1/2}) (n_{p-1}^{(0)} + n_p^{(0)}) \Delta V_p + \frac{1}{2} Q_{p-1/2} \Delta V_p, \\ & p=1, 2, \dots, \omega, \quad q=1, 2, \dots, k. \end{aligned}$$

К системе уравнений (15) надо добавить аппроксимацию уравнения (1'):

$$(15') \quad -\frac{N_{p0} - N_{p-1,0}}{\Delta r_p} + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} (N_{p0} + N_{p-1,0}) = S_{p-1/2}.$$

Метод (15) консервативен, что следует из самого способа его получения.

Рассмотрим следующие формулы для вычисления величин — параметров метода (15):

$$\begin{aligned} (16) \quad & \mu_{q-1}^+ = \mu_q^- = \bar{\mu}_q, \quad \text{где} \quad \mu_{q-1} \leq \bar{\mu}_q \leq \mu_q, \\ & r_{p-1}^+ = r_p^- = (r_{p-1} + r_p) / 2 = r_{p-1/2}. \end{aligned}$$

Подставляя (16) в (15), получим

$$\begin{aligned} (17) \quad & N_{pq} \left(r_p^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1 - \bar{\mu}_q^2}{\Delta\mu_q} \right) + N_{p,q-1} \left(r_p^2 \bar{\mu}_q - r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta\mu_q} \right) + \\ & + N_{p-1,q-1} \left(-r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q - r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta\mu_q} \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + N_{p-1,q} \left(-r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{(1-\bar{\mu}_q^2)}{\Delta \mu_q} \right) + \\
 & + (N_{pq} + N_{p,q-1} + N_{p-1,q-1} + N_{p-1,q}) \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p = 2S_{p-1/2} \Delta V_p, \\
 & p=1, 2, \dots, \omega, \quad q=1, 2, \dots, k.
 \end{aligned}$$

Пользуясь оставленной свободой в выборе параметра $\bar{\mu}_q^2$, потребуем, чтобы для коэффициентов (17) в любой счетной ячейке выполнялись тождества

$$\begin{aligned}
 (18) \quad & r_p^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q} \equiv r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta \mu_q}, \\
 & r_p^2 \bar{\mu}_q - r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta \mu_q} \equiv r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q - r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q}.
 \end{aligned}$$

Оба равенства (18) приводят к одному и тому же соотношению для вычисления $\bar{\mu}_q^2$:

$$(19) \quad \bar{\mu}_q^2 = \bar{\mu}_{q-1}^2 + 2\bar{\mu}_q \Delta \mu_q = 1 + \sum_{i=1}^q 2\bar{\mu}_i \Delta \mu_i,$$

где $q=1, 2, \dots, k$, а $\bar{\mu}_0^2=1$.

Формулу (19) можно интерпретировать как приближенное вычисление функции $f(\mu) = \mu^2$ с помощью интеграла

$$(19') \quad f(\mu) = 1 + 2 \int_{-1}^{\mu} \mu \, d\mu$$

по квадратурной формуле прямоугольников.

Теперь уравнения (17) совместно с формулами (16) и (19) определяют некоторый метод приближенного решения кинетического уравнения (1).

Теорема. Дискретный S_n -метод (8), (7) и метод (17), (16), (19) эквивалентны.

Доказательство. Перегруппировав в (17) слагаемые, можно получить уравнение

$$\begin{aligned}
 (20) \quad & \frac{N_{pq} + N_{p,q-1}}{2} \left(r_p^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q} + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right) + \\
 & + \frac{N_{p-1,q-1} + N_{p-1,q}}{2} \left(-r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q} + \frac{1}{2} \sigma_{p-1/2} \Delta V_p \right) = \\
 & = S_{p-1/2} \Delta V_p + \frac{N_{p,q-1} + N_{p-1,q-1}}{2} \left(r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q} + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1-\bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta \mu_q} \right).
 \end{aligned}$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(N_{pq} + N_{p,q-1}) &= N_p, & \frac{1}{2}(N_{p-1,q-1} + N_{p-1,q}) &= N_{p-1}, \\ \frac{1}{2}(N_{p,q-1} + N_{p-1,q-1}) &= N_{q-1}, \end{aligned}$$

то для доказательства теоремы достаточно показать, что коэффициенты в уравнениях (8) и (20) равны между собой, т. е. что

$$\begin{aligned} (21) \quad & \frac{1}{2} \bar{\mu}_q (r_{p-1}^2 + r_p^2) + r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q = r_p^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1 - \bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q}, \\ & - \frac{1}{2} \bar{\mu}_q (r_{p-1}^2 + r_p^2) + r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q = -r_{p-1}^2 \bar{\mu}_q + r_{p-1/2} \Delta r_p \frac{1 - \bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q}, \\ & 2r_{p-1/2} \Delta r_p \gamma_q = r_{p-1/2} \Delta r_p \left(\frac{1 - \bar{\mu}_q^2}{\Delta \mu_q} + \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1}^2}{\Delta \mu_q} \right), \end{aligned}$$

где γ_q определяется по (7), а $\bar{\mu}_q^2$ — по (19).

Рассмотрим третье равенство (21); оно выполняется, если

$$(22) \quad \gamma_q = (2 - \bar{\mu}_{q-1}^2 - \bar{\mu}_q^2) / 2\Delta \mu_q.$$

Легко показать, что первые два равенства (21) выполняются при том же условии (22): для этого надо выразить $\bar{\mu}_q$ из (19) и подставить в (21).

Остается доказать, что γ_q , определяемое формулой (22), равно γ_q , определяемому формулой (7). Действительно, из (22) и (19) следует, что

$$2\Delta \mu_q \gamma_q - 2\Delta \mu_{q-1} \gamma_{q-1} = -\bar{\mu}_q^2 + \bar{\mu}_{q-2}^2 = -2\bar{\mu}_{q-1} \Delta \mu_{q-1} - 2\bar{\mu}_q \Delta \mu_q.$$

Отсюда

$$(22') \quad \gamma_q = \Delta \mu_{q-1} \gamma_{q-1} / \Delta \mu_q - \Delta \mu_{q-1} \bar{\mu}_{q-1} / \Delta \mu_q - \bar{\mu}_q, \quad \gamma_1 = -\bar{\mu}_1,$$

что соответствует формулам (7), если $\Delta \mu_{q-1} = \Delta \mu_q$ (см. сноску на стр. 1214). Тем самым эквивалентность методов доказана.

§ 4. Погрешность аппроксимации S_n -метода *) и DS_n -метода

S_n -Метод [2] получается из уравнений (15), если применить формулы:

$$(23) \quad \begin{aligned} \mu_{q-1}^+ &= \mu_{q-1} + \frac{1}{3} \Delta \mu_q, & \mu_q^- &= \mu_q - \frac{1}{3} \Delta \mu_q, & \bar{\mu}_q^2 &= \mu_q^2, \\ r_{p-1}^+ &= r_{p-1} + \frac{1}{3} \Delta r_p, & r_p^- &= r_p - \frac{1}{3} \Delta r_p. \end{aligned}$$

*) Строгая формулировка непрерывного S_n -метода была дана в 1957 г. В. Я. Гольдиным на основе дивергентной формы сферически-симметричного уравнения переноса. Другой способ вывода непрерывного S_n -метода дан в работе [8].

Эти формулы легко получить, если провести в контурных интегралах (10) и (11) точное интегрирование, предполагая функцию $N(r, \mu)$ на отрезках контура линейной по μ или r соответственно.

При изучении погрешности аппроксимации метода (15) мы рассмотрим те схемы, для которых выполняются равенства

$$r_p^- + r_{p-1}^+ = 2r_{p-1/2}, \quad \mu_q^- + \mu_{q-1}^+ = 2\mu_{q-1/2}, \quad \bar{\mu}_q^2 = \mu_q^2,$$

т. е. рассмотрим S_n -метод (15), (23) и DS_n -метод (17), (19) при $\bar{\mu}_q = \mu_{q-1/2}$.

Из (15) легко получить, что погрешность аппроксимации дифференциальной части оператора (1) определяется разностью

$$\begin{aligned} \delta = & \frac{\partial}{r^2 \partial r} (\mu r^2 N) - [r_p^2 (\mu_q^- N_{p,q} + \mu_{q-1}^+ N_{p,q-1}) - r_{p-1}^2 (\mu_q^- N_{p-1,q} + \\ & + \mu_{q-1}^+ N_{p-1,q-1})] (2\Delta V_p)^{-1} + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1-\mu^2}{r} N \right) - \\ & - [(1-\mu_q^2) (r_p^- N_{p,q} + r_{p-1}^+ N_{p-1,q}) - (1-\mu_{q-1}^2) (r_p^- N_{p,q-1} + \\ & + r_{p-1}^+ N_{p-1,q-1})] [2/3 (r_{p-1}^2 + r_{p-1} r_p + r_p^2) \Delta \mu_q]^{-1}. \end{aligned}$$

Разлагая функцию $N(r, \mu)$ в ряд Тейлора относительно точки $(r_{p-1/2}, \mu_{q-1/2})$, для δ можно получить следующее представление:

$$\begin{aligned} (24) \quad \delta = & \frac{1}{r_{p-1/2}^2 + \Delta r_p^2 / 12} \left\{ \Delta r_p^2 \mu \left[\left(\frac{r_p^- - r_{p-1}^+}{2\Delta r_p} - \frac{1}{6} \right) \frac{\partial N}{\partial r} - \frac{r^2}{24} \frac{\partial^3 N}{\partial r^3} \right] + \right. \\ & + \frac{\Delta \mu_q^2}{4} \left[r \frac{\partial N}{\partial \mu} - \frac{\mu_q^- - \mu_{q-1}^+}{\Delta \mu_q} \left(2r \frac{\partial N}{\partial \mu} + r^2 \frac{\partial^2 N}{\partial r \partial \mu} \right) \right] - \\ & - \frac{\Delta \mu_q^2}{8} \mu r^2 \frac{\partial^3 N}{\partial r \partial \mu^2} - \frac{\Delta \mu_q^2}{24} (1-\mu^2) r \frac{\partial^3 N}{\partial \mu^3} + \\ & + \frac{\Delta r_p^2}{4} (1-\mu^2) \left[\frac{1}{3r} \frac{\partial N}{\partial \mu} - \frac{r_p^- - r_{p-1}^+}{\Delta r_p} \frac{\partial^2 N}{\partial r \partial \mu} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} r \frac{\partial^3 N}{\partial \mu \partial r^2} \right] \Bigg\}_{r=r_{p-1/2}, \mu=\mu_{q-1/2}} + o(\Delta \mu_q^2) + o(\Delta r_p^2). \end{aligned}$$

Здесь $\Delta r_p^2 = (\Delta r_p)^2$, $\Delta \mu_q^2 = (\Delta \mu_q)^2$.

Из (24) следует, что погрешность аппроксимации S_n - и DS_n -методов имеет второй порядок малости вне любой конечной окрестности центра $r=0$ на любой достаточно гладкой функции $N(r, \mu)$.

При $r \rightarrow 0$ мы рассмотрим аппроксимацию на точном решении уравнения (1), которое в окрестности $r=0$ можно представить в виде ряда

$$(25) \quad N(r, \mu) = (a_0 + b_0 r) + (a_1 + b_1 r) r P_1(\mu) + (a_2 + b_2 r) r^2 P_2(\mu) + O(r^3),$$

где $a_0, b_0, a_1, b_1, a_2, b_2$ — постоянные коэффициенты, а $P_1 = \mu$ и $P_2 = \frac{1}{3}(3\mu^2 - 1)$ — полиномы Лежандра.

Исследование поведения отдельных слагаемых в (24) на решении (25) (с учетом того, что при $r \rightarrow 0$ само r становится порядка Δr и что для S_n -метода $\frac{1}{6} - (r_p^- - r_{p-1}^+) / 2\Delta r_p \approx 0$) показывает, что S_n -метод имеет первый порядок аппроксимации в окрестности $r=0$, а у DS_n -метода порядок аппроксимации нулевой.

§ 5. Поведение решений в окрестности $r=0$

В связи с особым поведением погрешности аппроксимации S_n -методов при $r \rightarrow 0$ интересно выяснить фактическое поведение приближенного решения в точке $r=0$ для $\mu \leq 0$.

Для S_n - и DS_n -методов справедлива следующая

Теорема. На любой фиксированной сетке по переменной μ при $\Delta r_p \rightarrow 0$ приближенное решение сходится в точке $r=0$ к константе, не зависящей от $\mu_q \leq 0$, что соответствует условию (2').

Доказательство. Рассмотрим уравнения (15) при $\Delta r_p \rightarrow 0$, предполагая, что сетка по μ закреплена. Тогда уравнения (15) можно преобразовать в систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$(26) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \mu_q^- \frac{\partial N_q}{\partial r} + \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1/2}^2}{\Delta \mu_q} \frac{1}{r} N_q + \frac{1}{2} \sigma N_q &= \\ = \frac{1}{2} \mu_{q-1}^+ \frac{\partial N_q}{\partial r} + \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1/2}^2}{\Delta \mu_q} \frac{1}{r} N_{q-1} - \frac{1}{2} \sigma N_{q-1} + S, \end{aligned}$$

где

$$(27) \quad \begin{aligned} \bar{\mu}_{q-1/2}^2 &= \frac{1}{3} (\mu_{q-1}^2 + \mu_{q-1} \mu_q + \mu_q^2) \text{ для } S_n\text{-метода (23),} \\ \bar{\mu}_{q-1/2}^2 &= \frac{1}{2} (\bar{\mu}_{q-1}^2 + \bar{\mu}_q^2) \text{ для } DS_n\text{-метода (16), (19),} \end{aligned}$$

а краевые условия для $N_q(R)$ следуют из (2).

Введя новую неизвестную функцию

$$N_{q-1/2} = (\mu_q^- N_q + \mu_{q-1}^+ N_{q-1}) (\mu_q^- + \mu_{q-1}^+)^{-1},$$

уравнения (26) запишем так:

$$(28) \quad \frac{\partial N_{q-1/2}}{\partial r} - \frac{a}{r} N_{q-1/2} - b N_{q-1/2} = - \frac{a}{r} N_{q-1} + \delta N_{q-1} + c S(r),$$

где

$$a = 2 \frac{1 - \bar{\mu}_{q-1/2}^2}{\mu_q^- \Delta \mu_q} > 2, \quad -\frac{1}{3} \Delta \mu_1, \quad b(r) = -\frac{\sigma(r)}{\mu_q^-} > 0,$$

$$\bar{b}(r) = \frac{-\sigma(r)}{\mu_q^- + \mu_{q-1}^+} \left(\frac{\mu_{q-1}^+}{\mu_q^-} - 1 \right) > 0, \quad c = \frac{2}{\mu_q^- + \mu_{q-1}^+} < 0.$$

Точное решение системы (28) таково:

$$N_{q-1/2}(r) = \left(\frac{r}{R} \right)^a e^{b(r)} \left[\int_r^R \left(N_{q-1}(r) \left(\frac{a}{r} + b \right) + cS(r) \right) \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{R}{r} \right)^a e^{-rb(r)} dr + \varphi_{q-1/2} \right].$$

Отсюда

$$N_{q-1/2}(0) = \lim_{r \rightarrow 0} N_{q-1/2}(r) = N_{q-1}(0).$$

Следовательно, $N_q(0) = N_{q-1}(0)$, что и требовалось доказать.

§ 6. Принадлежность DS_n -метода к классу к.д.с.-схем

В [4] были предложены уравнения квазидиффузии и основанный на их использовании квазидиффузионный метод решения кинетических уравнений.

В [3] реализован другой подход к использованию уравнений квазидиффузии, заключающийся в том, что строятся специальные разностные схемы, для которых сеточные решения кинетического уравнения и уравнений квазидиффузии тождественно совпадают. В таких схемах уравнения квазидиффузии используются для ускорения сходимости итераций по интегралу рассеяния в кинетическом уравнении. Назовем эти схемы квазидиффузионно-согласованными, или, кратко, к.д.с.-схемами.

Теорема. DS_n -Метод (17), (19) принадлежит к классу к.д.с.-схем, если выполнены равенства

$$\bar{\mu}_k^2 = 1 \quad \text{и} \quad \sum_{q=1}^k \bar{\mu}_q \Delta \mu_q = 0.$$

Доказательство теоремы проводится аналогично работе [3], причем коэффициенты квазидиффузии вычисляются по формулам

$$D_p^{(1)} = \frac{n_p^{(2)}}{n_p^{(0)}}, \quad D_p^{(2)} = 1 - \sum_{q=1}^{k-1} (1 - \bar{\mu}_q^2) N_{pq} (\bar{\mu}_{q+1} - \bar{\mu}_q) / \bar{n}_p^{(0)}.$$

Отметим, что в доказательстве не используется определение $\bar{\mu}_q^2$ по формуле (19), что означает справедливость теоремы для более широкого семейства схем, чем DS_n -метод.

§ 7. Замечания о DS_n -методе для бесконечного цилиндра и многомерных геометрий

1. Рассматривая дивергентное кинетическое уравнение для геометрии бесконечного цилиндра

$$LN(r, \theta, \varphi) = \sin \varphi \frac{\partial}{r \partial r} (r \cos \theta N) - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\sin \theta}{r} N \right) + \sigma N = S,$$

$$S(r) = \frac{1}{2} \sigma (1+f) n^{(0)} + \frac{1}{2} Q(r), \quad n^{(0)} = \int_0^\pi d\varphi \int_{-1}^{+1} N(r, \theta, \varphi) \sin \theta d\theta$$

и записывая интегральный закон типа (9), нетрудно математически строго сформулировать DS_n -метод и установить свойства, аналогичные полученным в § 3–6 для сферически-симметричного случая.

В частности, аналогом соотношения (19) будет служить интеграл

$$f(\theta) = \sin \theta = \int_\pi^0 \cos \theta d\theta,$$

приближенное вычисление которого по квадратурной формуле

$$\sin \bar{\theta}_q = \sin \bar{\theta}_{q-1} + \cos \bar{\theta}_q \Delta \theta_q = \sum_{q=1}^k \cos \bar{\theta}_q \Delta \theta_q$$

обеспечит для коэффициентов разностного уравнения выполнение равенств типа (18).

2. Формулировка консервативных разностных методов решения уравнений переноса как на ортогональных, так и на криволинейных сетках математически строго осуществляется интегроинтерполяционным методом [5] на основе интегральных законов изменения числа частиц в ячейке (см. [3, 9]). Для записи этих законов необходимо использовать дивергентную форму уравнений переноса.

В общем многомерном случае дивергентное уравнение переноса имеет вид (см. [10])

$$(29) \quad LN(r, \Omega_1) = \operatorname{div} (\Omega N) + \sigma(r) N = S(r).$$

Следует сохранять дивергентную форму уравнения (29) и при переходе к криволинейным системам координат.

В наиболее употребительных сферической и цилиндрической системах координат (изотропный случай) уравнение (29) имеет следующий вид.

Сферическая система координат:

$$(30) \quad LN(r, \vartheta, \Phi, \theta, \varphi) = \frac{\partial}{r^2 \partial r} (r^2 \cos \theta N) - \\ - \frac{\partial}{\sin \vartheta \partial \vartheta} \left(\frac{1}{r} \sin \vartheta \sin \theta \sin \varphi N \right) + \frac{\partial}{\partial \Phi} \left(\frac{\sin \theta \sin \varphi}{r \sin \vartheta} N \right) - \\ - \frac{\partial}{\sin \theta \partial \theta} \left(\frac{\sin^2 \theta}{r} N \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\cos \vartheta \sin \theta \sin \varphi}{r \sin \vartheta} N \right) + \\ + \sigma N = \frac{\sigma(1+f)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi N \sin \theta d\theta + \frac{1}{4\pi} Q(r, \vartheta, \Phi);$$

r — радиус-расстояние от точки M , в которой находится частица, до начала координат; ϑ — широтный угол точки M , отсчитываемый от оси Z (XYZ — декартова система координат); Φ — азимут точки M , отсчитываемый от плоскости XZ вокруг оси Z ; θ — угол между r и Ω ; φ — угол между проекцией Ω на плоскость, перпендикулярную радиусу, и линией пересечения этой плоскости с плоскостью (rZ) ; $dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\Phi$ — элемент объема; $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ — элемент телесного угла.

В уравнении (30) часто вместо θ вводится новая переменная $\mu = \cos \theta$.

Цилиндрическая система координат:

$$(31) \quad LN(r, z, \Phi, \theta, \varphi) = \frac{\partial}{r \partial r} (r \sin \theta \cos \varphi N) + \frac{\partial}{\partial z} (\cos \theta N) + \\ + \frac{\partial}{\partial \Phi} \left(\frac{\sin \theta \sin \varphi}{r} N \right) - \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\sin \theta \sin \varphi}{r} N \right) + \sigma N = \\ = \frac{\sigma(1+f)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi N \sin \theta d\theta + \frac{1}{4\pi} Q(r, z, \Phi);$$

r — кратчайшее расстояние от точки M до оси Z ; Φ — азимут точки M ; θ — угол между Z и Ω ; φ — угол между r и проекцией Ω на плоскость, перпендикулярную оси Z и проходящую через точку M ; $dV = r dr dz d\Phi$ — элемент объема; $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ — элемент телесного угла.

В уравнениях (30), (31) каждое выражение под знаком производной имеет физический смысл и представляет собой количество частиц, проходящих через единичный фазовый элемент. Размерность этого элемента на единицу меньше общего количества независимых переменных, и в нем отсутствует та переменная, по которой взята производная. Записывая интегральные законы типа (9) для уравнений (30) и (31), легко дать строгий вывод S_n -методов для многомерных геометрий.

Цитированная литература

1. Б. Карлсон. Численное решение задач кинетической теории нейтронов. В сб. «Теория ядерных реакторов». М., Атомиздат, 1963, 243–258.
2. Б. Карлсон, Дж. Белл. Решение транспортного уравнения S_n -методом. В сб. «Физ. ядерных реакторов». М., Атомиздат, 1959, 408–432.
3. В. Е. Троцкий. Решение кинетического уравнения и уравнений квазидиффузии по согласованным разностным схемам. В сб. «Численные методы решения задач матем. физ.». М., «Наука», 1966, 177–185.
4. В. Я. Гольдин. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1964, 4, № 6, 1078–1087.
5. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. Об однородных разностных схемах. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, 1, № 1, 5–63.
6. Г. И. Марчук. Методы расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1961.
7. Б. Дэвисон. Теория переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1960.
8. В. Н. Морозов. О решении кинетических уравнений с помощью S -метода. В сб. «Теория и методы расчета ядерных реакторов». М., Атомиздат, 1962, 91–117.
9. А. В. Никифорова, В. А. Тарасов, В. Е. Троцкий. О решении кинетических уравнений дивергентным методом характеристик. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1972, 12, № 4, 1041–1048.
10. О. И. Лейпунский, Б. В. Новожилов, В. Н. Сахаров. Распространение γ -квантов в веществе. М., Физматгиз, 1960.