



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-98-295

На правах рукописи
УДК 517.968.23; 519.642; 537.612

B-645

ВОЗНИЦКИ
Збигнев И.*

ИТЕРАЦИОННЫЕ РЕШЕНИЯ
МНОГОГРУППОВЫХ УРАВНЕНИЙ
ДИФФУЗИИ НЕЙТРОНОВ

Специальность: 05.13.16 — применение
вычислительной техники, математического моделирования
и математических методов для научных исследований

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

*Институт атомной энергии, 05-400 Отвоцк-Сверк, Польша

Дубна 1998

Работа выполнена в Институте атомной энергии Свек, Польша, и в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

1. Актуальность темы диссертации

Бурное развитие атомной энергетики стимулировало активный поиск эффективных методов решения задач переноса нейтронов как основы моделирования физических процессов, протекающих в ядерных реакторах. Теория переноса излучения – одна из основных проблем современной науки – быстро развивается на основе достижений теоретической физики и, как каждая новая важная область прикладной физики, стимулирует развитие вычислительной математики. Весьма общая математическая формулировка задач теории переноса задаётся с помощью линеаризованного уравнения Больцмана, относящегося к классу интегро-дифференциальных уравнений математической физики, являющихся математической моделью для описания переноса нейтронов. В основе такого подхода лежит фундаментальная теория микроскопических процессов, однако подобно теории упругости и классической гидродинамике, эта теория может быть достаточно корректно сформулирована и на макроскопическом уровне.

Во многих физических задачах нейтроны могут рассматриваться как среда нового типа – нейтронный газ. При этом уравнение Больцмана становится систематическим "каталогом" всех возможных способов входа, выхода, образования и поглощения частиц этого газа, причём в каждой точке пространства имеет место распределение скоростей нейтронов по всем направлениям.

Прогресс атомной науки и техники стимулировал развитие различных приближённых методов решения уравнения Больцмана. В настоящее время наиболее продвинутым методом в теоретическом и алгоритмическом аспектах является диффузионное приближение, которое выводится с помощью метода сферических гармоник. Диффузионное приближение является наиболее широко используемым методом анализа критичности ядерных реакторов. Рассмотрение критичности, вообще говоря, сводится к задаче о собственных значениях для многогрупповых уравнений диффузии нейтронов, решение которой даёт собственное значение реактивности – эффективный коэффициент размножения, и вектор собственных значений – поток нейтронов порождающих распределения мощности в реакторах большой мощности; эти величины связаны и с неравномерной загрузкой топлива и с его выгоранием.

Решение задач диффузии с учётом энергетической зависимости поля нейтронов можно разделить на несколько стадий. На первой стадии осуществляется переход к многогрупповой аппроксимации. На следующей стадии многогрупповая

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук
профессор Вячеслав Иванович Лебедев

доктор физико-математических наук
профессор Александр Витальевич Крынев

доктор физико-математических наук
профессор Лев Абрамович Крукиер

Ведущая организация Институт атомной энергетики, г.Обнинск

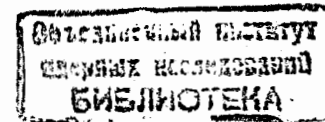
Защита диссертации состоится " _____ " _____ 1998 года
в _____ час. _____ мин. на заседании Диссертационного совета
Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации
Объединенного института ядерных исследований по адресу:
141980, г.Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан " _____ " _____ 1998г.

Ученый секретарь
Диссертационного совета Д047.01.04
кандидат физико-математических наук

Иванченко
З.М.Иванченко



задача может быть решена методом итераций источника, причём этот метод преобразует задачу решения многогрупповых уравнений к решению серии одногрупповых задач. Третья стадия состоит в преобразовании одногрупповой задачи с помощью конечно-разностной аппроксимации. На последней четвёртой стадии решаются полученные уравнения.

Решение уравнений одномерной диффузии является сравнительно простой задачей, позволяющей использовать прямой численный метод прогонки. Этот метод явился важным вкладом в теорию дифференциальных уравнений и привлёк к себе большое внимание, особенно после дискуссий в 1953–1954 гг. на известных семинарах Гельфанда при Московском университете.

Численное решение практических задач гетерогенных реакторов требует подробных расчётов диффузии нейтронов, которые могут быть учтены только в двух- или трёхмерной геометрии.

Уравнения диффузии с учётом энергетической зависимости в двух- и трёхмерной геометрии можно решить, следуя указанным выше четырём стадиям. Первые две стадии полностью совпадают с решением одномерных задач, однако во многомерном случае решение этих уравнений – задача значительно более сложная. Во-первых, уравнения невозможно решить прямым способом, поэтому должен быть использован специальный подход, названный автором итерационной стратегией. Основным методом решения является метод последовательной верхней релаксации (на практике существует много модификаций этого метода: точечный метод, линейный и двухлинейный методы и т.д.), во-вторых, приходится использовать многоузловую конечно-разностную сетку.

В последние сорок лет в области численного решения многогрупповых многомерных уравнений диффузии нейтронов много усилий было направлено на развитие эффективных итерационных методов и внедрение различных компьютерных программ. Стандартный метод решения основан на использовании внешних-внутренних итераций, останавливаемых, когда их число достигает некоторого значения, установленного для каждой группы, либо когда удовлетворяется критерий сходимости. Выполнение цикла внутренних итераций во всех группах соответствует одной внешней итерации, в которой член деления нейтронов пересчитывается. Для увеличения скорости сходимости внешних итераций обычно используются методы ускорения полиномами Чебышева.

2. Цель работы

Целью настоящей диссертации является систематическое исследование итерационных подходов к решению многомерных уравнений диффузии нейтронов при помощи трёх уровней итераций, называемых глобальными, внешними и внутренними итерациями, и имеющих следующую физическую интерпретацию:

- во внутренних итерациях – определяются значения потока нейтронов в пределах групп с фиксированными значениями членов как рассеяния, так и деления нейтронов,
- на уровне внешних итераций – поток нейтронов вычисляется с учётом рассеяния нейтронов вниз; члены рассеяния нейтронов вверх определяются между очередными внешними итерациями,
- после окончания цикла внешних итераций, соответствующего одной глобальной итерации – перевычисляется член, описывающий деление нейтронов.

3. Научная новизна работы

Матричный формализм, предложенный в настоящей работе, позволяет точно и наглядно представить, как именно использованное расщепление матриц влияет на взаимозависимость внутренних и внешних итераций в пределе глобальных итераций.

Если ограничиться всего лишь одной внешней итерацией, приходющейся на одну глобальную итерацию, то метод глобальных-внешних-внутренних итераций сводится к широко применяемому методу внешних-внутренних итераций. Обсуждаемая методика глобальных-внешних-внутренних итераций является обобщением метода внешних-внутренних итераций. Используемая для решения реакторных задач со значительным рассеянием "вверх", она позволяет сократить число глобальных итераций на коэффициент, приблизительно равный выбранному числу внешних итераций, приходящихся на одну глобальную итерацию.

Сформулированные выше положения определяют актуальность и практическую ценность данной работы и служат доказательством того, что направление исследований является новым и важным для расчётов в области реакторной физики. Предложенный автором матричный формализм, основанный на введении предобратных матриц t -степени, является первой в литературе точной матричной формулировкой итерационного решения многомерных уравнений в теории диффузии нейтронов. Совокупность представленных в диссертации результатов является завершением многолетних исследований автора в области расчётных задач реакторной физики, стимулирующей фундаментальные исследования.

4. Практическая ценность работы

Результаты, представленные в настоящей диссертации, а также более ранние результаты автора (в частности, теория неотрицательных расщеплений) носят, в основном, фундаментальный характер и могут рассматриваться как значительный вклад в линейную алгебру, являющуюся важной областью прикладной математики. Матричный формализм введённый автором для описания методов EWA и AGA оказался

также полезным при классификации префакторизационных методов, других авторов, представленной в таблице 1.1.

Решение многомерных уравнений диффузии нейтронов, представляющих класс эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка, сводится к решению эквивалентных разностных уравнений типа $A\phi = c$, где матрицы A имеют разреженную структуру и монотонны т.е., удовлетворяют условию, что обратная матрица существует и она неотрицательна ($A^{-1} \geq 0$).

Системы линейных уравнений с матрицами A этого типа появляются во многих задачах современной науки и техники. Так, что теоретические и практические результаты, полученные автором при численном анализе задач реакторной физики, имеют общее значение.

Теоремы теории неотрицательного расщепления, как результат многолетних исследований автора вопросов монотонности, существенно важны для анализа сходимости итерационных методов решения систем линейных уравнений с монотонными матрицами.

Алгоритмы метода АГА с двойной верхней релаксацией были реализованы для двухмерного и трёхмерного случаев в компьютерных программах HEXAGA-II и HEXAGA-III, решающих уравнения диффузии нейтронов на треугольной и гексагональной разностных сетках на основе стандартной стратегии внешних-внутренних итераций. Программы HEXAGA, используемые интенсивно для расчётов связанных с проектированием и эксплуатацией ядерных реакторов в Польше и других странах (в Бельгии, Болгарии, Германии), делают возможным получать результаты вычислений в несколько раз быстрее чем другие компьютерные программы этого типа, и их преимущество возрастает с ростом числа точек разностной сетки. Сравнение результатов расчётов HEXAGA-II и английской программы SNAP для реакторной задачи ВВЭР-1000 дано в следующей таблице (4 сек CYBER 73 \approx 10 сек EC-1040).

Программа	Число сет. точек на одной гексагональной кассете	Число энерго-простр. точек	k_{eff}	CPU время сек.	Время на одну энерго-простр. точку милисек.	Компьютер
HEXAGA-II	1	288	1.11715	6	0.0208	CYBER 73
	12	1024	1.11375	14	0.0136	
	27	2208	1.11279	34	0.0154	
	48	3844	1.11240	60	0.0156	
	108	8462	1.11211	237	0.0280	
SNAP	1	92	1.11387	26	0.283	EC-1040
	6	552	1.11068	150	0.272	
	24	2208	1.11124	894	0.405	
	96	8832	1.11175	6435	0.729	

Эти результаты были представлены на конференции по физике реакторов в Knoxville, США, в 1985г.

В Польше программа HEXAGA-II была использована в расчётах реактора ядерной электростанции "Жарновец", которые проводились в 1980 годах, а также при физических расчётах исследовательских реакторов EWA и MARIA, необходимых при разработке отчёта безопасности и текущей эксплуатации реактора. Проверка результатов вычислений, полученных при помощи программы HEXAGA-II на основании данных по эксплуатации реактора EWA показала великолепную согласованность. Надо отметить, что для реактора EWA и ядерной электростанции "Жарновец", имеющих гексагональную структуру сетки топливных элементов, имело место полное совпадение с геометрией треугольной сетки программы HEXAGA-II. В поперечном сечении реактора MARIA каналы твэлов размещены в квадратной сетке, а именно применение мелкой треугольной сетки программы HEXAGA-II позволило воссоздать круглый вид каналов твэлов и детали сложной геометрической-материальной конфигурации реактора MARIA, более точным образом, чем это было бы возможно в программе с прямоугольной ориентацией сетки. Программа HEXAGA-II в настоящее время используется в расчётной системе разработанной для нужд реактора MARIA.

Для того, чтобы представить подготовку входных данных программы HEXAGA-II для реакторных задач при мелкой сетке были разработаны две вспомогательные программы HEXI-22 и HEXI-23. Эти вспомогательные программы предназначены для производства первой части входных данных программы HEXAGA-II (связанных с описанием материально-геометрической конфигурации точечной сетки) для данной реакторной задачи, в которой шаг однородной треугольной сетки уменьшается в два раза в случае программы HEXI-22 и в три раза в случае программы HEXI-23. Эти программы используют такие же входные данные, как программа HEXAGA-II без ввода добавочной входной информации. Каждые выходные данные программ HEXI могут быть использованы как новые входные данные программ HEXI. Таким образом, если мы имеем входные данные программы HEXAGA-II, описывающие данную реакторную задачу с минимальным числом точек сетки, и используем любую комбинацию входных/выходных данных программы HEXI-22 и/или HEXI-23 мы можем производить входные данные программы HEXAGA-II для расположения точек сетки для этой задачи с шагом сетки уменьшённым согласно следующим множителям: $2^i 3^k$ для любых целых чисел $i, k \geq 0$.

В случае трёхмерной программы HEXAGA-III были разработаны аналогичные вспомогательные программы HEXI-32 и HEXI-33.

Надо заметить, что автор принимал активное участие в работе и систематических заседаниях пятой тематической группы ВМК (Временный Международный Коллектив) работающей под руководством Профессора В.И.Лебедева по обзору матема-

тических вопросов физики реакторов ВВЭР. Кроме того, автор тесно сотрудничал с Институтом ядерных исследований и ядерной энергетики в Софии, где была разработана болгарская версия программы HEXAGA, известная под названием HEXAB, и применяемая при расчётах связанных с эксплуатацией энергетических ядерных реакторов ВВЭР работающих в Болгарии.

Актуальные версии программ HEXAGA работают на основе, предложенной в диссертации, стратегии глобальных-внешних-внутренних итераций.

5. Апробация работы

Основные результаты диссертации опубликованы в 23 научных работах и докладывались на следующих международных конференциях:

1. NPY Seminar on Numerical Solution of Multi-Dimensional Neutron Diffusion Equations, Warsaw, Poland, March 1969;
2. Seminar on Reactor Physics Calculations, Budapest, Hungary, October 1969;
3. The INEA Third International Advanced Summer School in Reactor Physics, Hercegnovi, Yugoslavia, September 1970;
4. Reaktortagung, Düsseldorf, West Germany, March 1976;
5. Conference on Numerical Methods of Mathematical Physics, Novosibirsk, Soviet Union October 1980;
6. ANS/ENS International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for Nuclear Engineering Problems, Munich, Germany, April 1981;
7. International Meeting on Advances in Nuclear Engineering Computational Methods, Knoxville, USA, April 1985;
8. International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Mathematics and Computations, Paris, France, April 1987;
9. International Conference on Linear Algebra and Applications, Valencia, Spain, September 1987;
10. International Conference on the Physics of Reactors: Operation, Design and Computations, Marseille, France, April 1990;
11. Copper Mountain Conference on Iterative Methods, Copper Mountain, Colorado, USA, April 1992;
12. The Second Conference of the International Linear Algebra Society, University of Lisbon, Lisbon, Portugal, August 1992;
13. '92 Shanghai International Conference of Numerical Algebra and its Applications, Fudan University, Shanghai, P.R.China, October 1992;
14. Two Matrix Theory Meetings in Technion, Haifa, Israel, June 1993;
15. Third SIAM Conference on Linear Algebra in Signals, Systems and Control, Seattle, USA, August 1993;
16. The International Conference on Reactor Physics and Reactor Computations, Tel Aviv, Israel, January 1994;
17. ICIAM'95 - The Third International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Hamburg, Germany, July 1995;

18. WCNA'96 - The Second Congress of Nonlinear Analysts, Athens, Greece July 1996;
19. PHYSOR'96 - International Conference on the Physics of Reactors, Mito, Ibaraki, Japan, September 1996;
20. Czech-U.S. Workshop on Iterative Methods and Parallel Computing, Milovy, Czech Republic, June 1997;
21. 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin, Germany, August 1997;
22. XII Conference on Applied Mathematics PRIM'97, Palić, Yugoslavia, September 1997;
23. Sixth SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Snowbird, Utah, USA, October 1997;
24. 7th Russian Conference on Grid Generation Problems and Numerical Methods in Mathematical Physics, Durso (Krasnodar region), Russia, September 1998.

6. Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения и шести глав, содержит 20 таблиц, 60 рисунков, список цитированной литературы и изложена на 170 страницах машинописного текста.

В первой главе изложены разработанные автором предфакторизационные методы AGA, которые являются основными алгоритмами представленных в диссертации итерационных подходов, а также и другие результаты автора.

Во второй главе сформулирована дискретная форма многогрупповых уравнений диффузии нейтронов, описана структура матриц и свойств решения уравнений.

В третьей главе итерационные подходы, основанные на уровнях глобальных, внешних, внутренних итераций, представлены для формализма однократного расщепления, а в четвёртой главе для формализма двухкратного расщепления.

В более общем виде численное представление различных итерационных подходов даётся в пятой главе на примере нескольких реакторных задач, в которых эффективность рассматриваемых методов характеризуется числом арифметических операций, приходящихся на одну точку сетки.

В шестой главе сформулированы основные выводы диссертации.

7. Содержание работы

Во введении обсуждается состояние и актуальность проблем, которым посвящена диссертация, краткий обзор литературы, сформулирована цель диссертации и перечислены оригинальные результаты, полученные в диссертации.

В первой главе описаны предфакторизационные итерационные методы AGA, как основные алгоритмы компьютерных программ HEXAGA, в связи с совокупностью результатов научных исследований автора по линейной алгебре.

Рассмотрим итерационное решение системы линейных уравнений

$$Ax = b, \quad (1)$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ является неособенной матрицей и $x, b \in \mathbb{R}^n$.

По традиции широкий класс итерационных методов для решения уравнения (1) может быть сформулирован с помощью соответствующего расщепления матрицы

$$A = M - N \quad (2)$$

с неособенной матрицей M , приближённое решение $x^{(t)}$ в этом случае имеет вид

$$Mx^{(t+1)} = Nx^{(t)} + b, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

что эквивалентно

$$x^{(t+1)} = M^{-1}Nx^{(t)} + M^{-1}b, \quad t \geq 0, \quad (4)$$

где начальный вектор $x^{(0)}$ считается заданным.

Анализ сходимости указанного метода основан на спектральном радиусе итерационной матрицы $\rho(M^{-1}N) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$, где λ_i являются собственными значениями матрицы $M^{-1}N$. Итерационный метод сходится к единственному решению

$$x = A^{-1}b \quad (5)$$

для каждого $x^{(0)}$, если, и только если, $\rho(M^{-1}N) < 1$. Для больших значений t на каждом итерационном шаге величина погрешности решения уменьшается приблизительно на коэффициент $\rho(M^{-1}N)$. Чем меньше $\rho(M^{-1}N)$, тем быстрее сходимость. Следовательно, оценка итерационного метода зависит от двух условий: M надо выбрать таким образом, чтобы можно было легко найти обратную матрицу, а $\rho(M^{-1}N)$ должно быть настолько малым, насколько это возможно.

Определение 1.1 Разложение $A = M - N$ называют сходящимся расщеплением матрицы A , если A и M - неособенные матрицы и $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Общие свойства расщепления (не обязательно сходящейся) матрицы A , полезные при доказательстве многих теорем сравнения, даны в следующей лемме.

Лемма 1.1 Пусть $A = M - N$ - расщепление матрицы A . Если A и M являются неособенными матрицами, то

$$M^{-1}NA^{-1} = A^{-1}NM^{-1}, \quad (6)$$

матрицы $M^{-1}N$ и $A^{-1}N$, а также NM^{-1} и NA^{-1} , коммутируют.

В определённом смысле матрицу M можно понимать как приближение матрицы A . Обычно M выражают в виде произведения неособенных матриц, выбранных таким образом, чтобы их было можно легко получить и относительно легко обратить. Поэтому матрицу M можно рассматривать как предфакторизацию матрицы A и её

называют предфакторизационером матрицы A или предкондиционером в случае метода сопряжённых градиентов. Матрица M^{-1} является матрицей преобразования матрицы A и называется преобразителем матрицы A приближающим матрицу A^{-1} . Следовательно, $N = M - A$ - это остаточная матрица, полученная при помощи предполагаемой предфакторизации матрицы A . Если N ненулевая матрица, то осуществляется частичная (неполная) факторизация матрицы A и решение имеет итерационный вид. В случае, когда матрица N становится нулевой, осуществляется точная факторизация матрицы A и решение уравнения (1) получается при помощи прямого метода исключения Гаусса.

Идея решения систем линейных уравнений с разреженными матрицами при помощи предфакторизационных методов не нова. Первые такие подходы под названием "примитивные итерационные методы", ограниченные симметрическими матрицами, были рассмотрены Varga'ой в 1960 году. Весьма сходная методика в то же время была независимо введена Булеевым и Oliphant'ом. На самом деле методы Булеева были пионерскими и являлись существенным вкладом в итерационное решение пятиточечных и семиточечных уравнений конечных разностей, которые приближают двух- и трехмерные краевые задачи математической физики.

Развитие методов предфакторизации AGA, известных также под названием "двухпроходные итерационные методы AGA", началось в 1968 году в виде первой и наиболее простой версии, называемой методом EWA. С тех пор эти методы успешно применяются для решения систем линейных уравнений, возникающих из конечно-разностного приближения задач диффузии нейтронов. Они удобны на практике, и в случае, когда применяются для расчёта ядерных реакторов, дают весьма неплохие результаты.

Допустим, что матрица A определена как

$$A = K - L - U, \quad (7)$$

где K , L , U соответственно неособенная диагональная, строго нижняя треугольная и строго верхняя треугольная матрицы. При использовании матричных обозначений введённых автором, получается следующая факторизация

$$M = [I - (L+H)D^{-1}]D[I - D^{-1}(U+Q)], \quad (8)$$

где H и Q соответственно добавочная строго нижняя треугольная и добавочная строго верхняя треугольная матрицы. Предполагается, что D неособенная диагональная матрица неявно определённая при помощи соотношения

$$D = K - \text{diag}\{(L+H)D^{-1}(U+Q)\}. \quad (9)$$

Легко проверить, что

$$N = \text{offdiag}\{(L+H)D^{-1}(U+Q)\} - H - Q, \quad (10)$$

где выражение $\text{diag}\{B\}$ означает диагональную матрицу с диагональными элемен-

тами, тождественно равными диагональным элементам матрицы В, и

$$offdiag\{B\} = B - diag\{B\}.$$

Итерационный метод теперь можно записать следующим образом

$$x^{(t+1)} = \mathcal{F}x^{(t)} + M^{-1}b, \quad t \geq 0 \quad (11)$$

и

$$\mathcal{F} = [I - D^{-1}(U+Q)]D^{-1}[I - (L+H)D^{-1}]N. \quad (12)$$

Поскольку $(L+H)D^{-1}$ и $D^{-1}(U+Q)$ соответственно строго нижняя треугольная и строго верхняя треугольная матрицы, этот метод может быть легко реализован при помощи хорошо известной, так называемой двухпроходной (прямое направление - обратное направление) процедуры, то есть

$$\left. \begin{aligned} y^{(t+1)} &= (L+H)D^{-1}y^{(t+1)} + Nx^{(t)} + c \\ x^{(t+1)} &= D^{-1}[(U+Q)x^{(t+1)} + y^{(t+1)}], \quad t \geq 0 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Таким образом, компоненты вектора $y^{(t+1)}$ могут быть вычислены рекурсивно для возрастающих индексов в проходе прямого исключения, а компоненты вектора $x^{(t+1)}$ для уменьшающихся индексов в проходе обратной подстановки. Уравнения (13) представляют собой общий вид широкого класса так называемых: предфакторизационных или двухпроходных итерационных методов. Каждый из них однозначно определён с помощью выбора матриц Н и Q. Матрицу \mathcal{F} называют предфакторизационной или двухпроходной итерационной матрицей.

Классификация предфакторизационных итерационных методов по отношению к выбору матриц Н и Q представлена в таблице 1.1.

Метод AGA определяет широкий класс алгоритмов, каждый из которых задаётся путём выбора матриц N_A и Q_A таким образом, чтобы $N_A + Q_A \neq 0$ (исключая случаи, в которых $N_A = -L$ и $Q_A = -U$) при предположении, что размещение ненулевых элементов матрицы N_A не совпадает с размещением ненулевых элементов матрицы $L + N_A + U + Q_A$. Предположение о том, что матрицы N_A и Q_A соответственно строго нижняя треугольная матрица и строго верхняя треугольная матрица, всегда позволяет определить в явном виде значения ненулевых элементов матриц N_A и Q_A , для произвольно принятой модели размещения ненулевых элементов в этих матрицах, непосредственно следует из неявного вида матрицы $(L+N_A)D_A^{-1}(U+Q_A)$. Другими словами, при постулированной модели распределения ненулевых элементов в матрицах N_A и Q_A , все ненулевые элементы матриц N_A , Q_A а следовательно, и D_A и N_A , могут быть вычислены непосредственно при помощи приравнивания их соответствующим элементам неявной формы произведения матриц $(L+N_A)D_A^{-1}(U+Q_A)$.

Таблица 1.1 Классификация предфакторизационных методов (A = K - L - U = M - N)

Н	Q	$M = [I - (L+U)D^{-1}]D[I - D^{-1}(U+Q)]$ $D = K - diag\{(L+H)D^{-1}(U+Q)\}$	$N = offdiag\{(L+H)D^{-1}(U+Q)\}$	Метод
-L	-U	$M_J = K$ $D_J = K$	$N_J = L+U$	Jacobi
-L	0	$M_C = K[I - K^{-1}U]$ $D_C = K$	$N_C = L$	Gauss-Siedel (backward order)
0	-U	$M_{\tilde{C}} = K[I - K^{-1}L]$ $D_{\tilde{C}} = K$	$\tilde{N}_C = U$	Gauss-Siedel (forward order)
0	0	$M_E = [I - LD_E^{-1}]D_E[I - D_E^{-1}U]$ $D_E = K - diag\{LD_E^{-1}U\}$	$N_E = offdiag\{LD_E^{-1}U\}$	EWA Woźnicki (1968)
0	0 L=U ^T	$M_V = [I - U^T D_V^{-1}]D_V[I - D_V^{-1}U]$ $D_V = K - diag\{U^T D_V^{-1}U\}$	$N_V = offdiag\{U^T D_V^{-1}U\}$	Varga (1960)
0	0	$M_B = [I - LD_B^{-1}]D_B[I - D_B^{-1}U]$ $D_B = (1+e)K - diag\{LD_B^{-1}U\}$	$N_B = offdiag\{LD_B^{-1}U\} + eK$ (e=0, $M_B = M_E$, $N_B = M_E$)	Buleev (1960)
(g-1)L	0	$M_0 = [I - gLD_0^{-1}]D_0[I - D_0^{-1}U]$ $D_0 = K - diag\{gLD_0^{-1}U\}$	$N_0 = offdiag\{gLD_0^{-1}U\} - (g-1)L$ (g=0, $M_0 = M_C$, $N_0 = N_C$; g=1, $M_0 = M_E$, $N_0 = N_E$)	Oliphant (1962)
aL	aU	$M_S = [I - (L+aL)D_S^{-1}]D_S[I - D_S^{-1}(U+aU)]$ $D_S = K - diag\{(L+aL)D_S^{-1}(U+aU)\}$	$N_S = offdiag\{(L+aL)D_S^{-1}(U+aU)\} - aL - aU$ (a=0, $M_S = M_E$, $N_S = N_E$)	Stone (1968)
H_A	Q_A	$M_A = [I - (L+H_A)D_A^{-1}]D_A[I - D_A^{-1}(U+Q_A)]$ $D_A = K - diag\{(L+H_A)D_A^{-1}(U+Q_A)\}$	$N_A = offdiag\{(L+H_A)D_A^{-1}(U+Q_A)\} - H_A - Q_A$	AGA Woźnicki (1970)
H_0	Q_0	$M_0 = [I - (L+H_0)D_0^{-1}]D_0[I - D_0^{-1}(U+Q_0)]$ $D_0 = K - diag\{(L+H_0)D_0^{-1}(U+Q_0)\}$	$N_0 = 0$ ($offdiag\{(L+H_0)D_0^{-1}(U+Q_0)\} = H_0 + Q_0$)	Direct method Woźnicki (1973)

Применение последовательной верхней релаксации в обоих уравнениях (13) позволяет ускорить сходимость итерационных алгоритмов AGA, которые оказались исключительно эффективными для решения дискретных многомерных эллиптических задач, появляющихся в физике ядерных реакторов.

В случае алгоритмов AGA, уравнения (13) могут быть записаны следующим образом.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{y}^{(t+1)} &= \omega_1 [(L_A + N_A) D_A^{-1} \mathbf{y}^{(t+1)} + N_A \mathbf{x}^{(t)} + \mathbf{c}] - (\omega_1 - 1) \mathbf{y}^{(t)} \\ \mathbf{x}^{(t+1)} &= \omega_2 D_A^{-1} [(U_A + Q_A) \mathbf{x}^{(t+1)} + \mathbf{y}^{(t+1)}] - (\omega_2 - 1) \mathbf{x}^{(t)} \quad t \geq 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

где ω_1 и ω_2 являются параметрами релаксации.

Исключение вектора \mathbf{y} позволяет свести вышеуказанные уравнения к следующей итерационной схеме охватывающей три очередные итерации, т.е.,

$$P_A \mathbf{x}^{(t+1)} = R_A \mathbf{x}^{(t)} + S_A \mathbf{x}^{(t-1)} + \mathbf{b}, \quad t > 0, \quad (15)$$

соответствующие двухкратному расщеплению матрицы

$$A = P_A + R_A + S_A, \quad (16)$$

где

$$P_A = \frac{1}{\omega_1 \omega_2} [I - \omega_1 (L_A + N_A) D_A^{-1}] D_A [I - \omega_2 (U_A + Q_A)], \quad (17)$$

$$R_A = \frac{1}{\omega_1 \omega_2} \{ \omega_1 \omega_2 N_A - (\omega_2 - 1) [I - \omega_1 (L_A + N_A) D_A^{-1}] D_A - (\omega_1 - 1) [I - \omega_2 D^{-1} (U_A + Q_A)] \}, \quad (18)$$

$$S_A = \frac{(\omega_1 - 1)(\omega_2 - 1)}{\omega_1 \omega_2} D_A, \quad \text{и } \omega_1 \neq 0, \quad \omega_2 \neq 0. \quad (19)$$

Так как для $\omega_1 \neq 0$ и $\omega_2 \neq 0$, P_A является неособенной матрицей, уравнение (14) может быть записано эквивалентно, как

$$\mathbf{x}^{(t+1)} = P_A^{-1} R_A \mathbf{x}^{(t)} + P_A^{-1} S_A \mathbf{x}^{(t-1)} + P_A^{-1} \mathbf{b}, \quad t > 0. \quad (20)$$

Этот метод называется методом двойной верхней релаксации AGA или, для краткости, методом AGA двойной SOR (AGA double SOR method). Свойства сходимости этого метода, основанные на таком же подходе как в случае однократного расщепления матрицы $A = M - N$, подробно проанализированы в [12] и рассмотрены в главе 4.

Очевидно, что этот метод сводится к однократному методу верхней релаксации SOR - или к методу прямого рода (the forward type), когда $\omega_1 = 1$ и $\omega_2 \neq 1$ или к методу обратного рода (the backward type), когда $\omega_1 \neq 1$ и $\omega_2 = 1$ для которых $S_A = 0$.

Эффективность двойной верхней релаксации AGA зависит от выбора параметров релаксации ω_1 и ω_2 . Скорость сходимости имеет максимальное значение тогда, когда $\omega_1 = \omega_2 = \omega_{opt}$.

Решение задачи оценки оптимального параметра релаксации в этих методах является - с теоретической точки зрения - существенной трудностью, потому что итерационные матрицы в методах EMA и AGA имеют также отрицательные и комплексные собственные значения. Предлагаемый в работе [12] подход к предварительной (a priori) оценке оптимального значения ω_{opt} основан на численном анализе задачи Дирихле для эллиптических уравнений. Численные эксперименты подтверждают высокую эффективность предлагаемой процедуры для оценки оптимального параметра релаксации в методах AGA для практических применений.

Теоретические результаты автора, полученные для регулярных расщеплений, приведенные в подглаве 1.2, а в подглаве 1.3 описаны более важные результаты теории неотрицательного расщепления.

Определение Varga'ой регулярного расщепления стало стандартной терминологией в литературе, в то время как другие расщепления определяются обычно по усмотрению авторов. Специфика расщеплений включена в следующее определение.

Определение 1.2 Для матрицы A разложение $A = M - N$ называют:

- (a) регулярным расщеплением матрицы A , если $M^{-1} \geq 0$ и $N \geq 0$,
- (b) неотрицательным расщеплением матрицы A , если $M^{-1} \geq 0$, $M^{-1}N \geq 0$ и $NM^{-1} \geq 0$,
- (c) слабым неотрицательным расщеплением матрицы A , если $M^{-1} \geq 0$ и: или $M^{-1}N \geq 0$ (первого рода) или $NM^{-1} \geq 0$ (второго рода),
- (d) слабым расщеплением матрицы A , если M является неособенной матрицей и: или $M^{-1}N \geq 0$ (первого рода) или $NM^{-1} \geq 0$ (второго рода). В частности данное слабое расщепление может быть и первого, и второго рода одновременно,
- (e) сходящимся расщеплением матрицы A , если M является неособенной матрицей и $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Определение, принятое в пункте (b), эквивалентно определению слабого регулярного расщепления матрицы A , предложенного Ortega'ой и Rheinboldt'ом. Однако, $M^{-1} \geq 0$ и только $M^{-1}N \geq 0$ (без условия $NM^{-1} \geq 0$) определяется другими авторами как слабое регулярное расщепление матрицы A , но, в этом случае необходимо ввести добавочные предположения в теоремах сравнения, когда соотношение $M_1^{-1} \geq M_2^{-1} \geq 0$ используется в качестве гипотезы. Следует отметить, что применение терминологии Ortega'и и Rheinboldt'a "слабое регулярное" в пункте (b) является причиной путаницы при использовании названия расщепления в пункте (c). Употребление термина "неотрицательное" позволяет различить эти два случая и избежать неоднозначности. Определение слабого расщепления матрицы A для случая первого рода было введено Marek'ом и Szyld'ом.

Свойства слабых неотрицательных расщеплений использованы в следующей теореме.

Теорема 1.1 Пусть $A = M - N$ будет слабым неотрицательным расщеплением матрицы A . Если $A^{-1} \geq 0$, тогда

$$1. A^{-1} \geq M^{-1}$$

$$2. \text{ если } M^{-1}N \geq 0, \text{ тогда } A^{-1}N \geq M^{-1}N \text{ и если } NM^{-1} \geq 0, \text{ тогда } NA^{-1} \geq NM^{-1}$$

$$3. \rho(M^{-1}N) = \frac{\rho(A^{-1}N)}{1 + \rho(A^{-1}N)} = \frac{\rho(NA^{-1})}{1 + \rho(A^{-1}N)} < 1.$$

Обратно, если $\rho(M^{-1}N) < 1$, тогда $A^{-1} \geq 0$.

Зависимость в пункте 3, подобная результату полученной Varga'ой для регулярных расщеплений матрицы A , была доказана при помощи коммутативных свойств $A^{-1}N$ и $M^{-1}N$ (или NA^{-1} и NM^{-1}) представленных при помощи леммы 1.1. Как следствие этой теоремы можно сформулировать следующий вывод.

Вывод 1.1 Каждое слабое неотрицательное расщепление матрицы A при $A^{-1} \geq 0$ является сходящимся расщеплением и наоборот, для каждого сходящегося слабого неотрицательного расщепления матрицы A , $A^{-1} \geq 0$.

Много теорем сравнения для различных расщеплений монотонной матрицы A , (т.е. $A^{-1} \geq 0$) автор доказал при простых, а также при более сложных, предположениях. Некоторые из этих результатов приведены ниже.

Теорема 1.2 Пусть $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ суть два слабые неотрицательные расщепления матрицы A разных родов, то есть, или $M_1^{-1}N_1 \geq 0$ и $M_2^{-1}N_2 \geq 0$, или $N_1M_1^{-1} \geq 0$ и $N_2M_2^{-1} \geq 0$, где $A^{-1} \geq 0$. Если $M_1^{-1} \geq M_2^{-1}$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leq \rho(M_2^{-1}N_2). \quad (21)$$

В частности, если $A^{-1} > 0$ и $M_1^{-1} > M_2^{-1}$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) < \rho(M_2^{-1}N_2). \quad (22)$$

Теорема 1.3 Пусть $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ суть два слабые неотрицательные расщепления симметрической матрицы A , где $A^{-1} \geq 0$. Если по крайней мере одна из матриц M_1 и M_2 является симметрической матрицей, и если $M_1^{-1} \geq M_2^{-1}$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leq \rho(M_2^{-1}N_2).$$

В частности, если $A^{-1} > 0$ и $M_1^{-1} > M_2^{-1}$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) < \rho(M_2^{-1}N_2).$$

Отдельный класс естественных условий, важных в приложениях представлен ниже.

Теорема 1.4 Пусть $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ суть два слабые неотрицательные расщепления матрицы A , одного и того же рода, то есть, или $M_1^{-1}N_1 \geq 0$ и $M_2^{-1}N_2 \geq 0$, или $N_1M_1^{-1} \geq 0$ и $N_2M_2^{-1} \geq 0$, где $A^{-1} \geq 0$. Если $N_2^T \geq N_1$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leq \rho(M_2^{-1}N_2). \quad (23)$$

Теорема 1.5 Пусть $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ суть два слабые неотрицательные расщепления матрицы A , одного и того же рода, то есть, или $M_1^{-1}N_1 \geq 0$ и $M_2^{-1}N_2 \geq 0$, или $N_1M_1^{-1} \geq 0$ и $N_2M_2^{-1} \geq 0$, где $A^{-1} \geq 0$. Если $M_1^{-1} \geq (M_2^{-1})^T$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leq \rho(M_2^{-1}N_2).$$

В частности, если $A^{-1} > 0$ и $M_1^{-1} > (M_2^{-1})^T$, тогда

$$\rho(M_1^{-1}N_1) < \rho(M_2^{-1}N_2).$$

В заключение, отметим, что результаты теории неотрицательных расщеплений позволяют расширить анализ сходимости классов итерационных методов, для которых не только матрица N может иметь отрицательные элементы, но в случае слабых неотрицательных расщеплений, итерационные матрицы, или $M^{-1}N$ или NM^{-1} , могут иметь также отрицательные элементы.

Анализ критериев сходимости, использующихся для остановки итерационного процесса метода сопряженных градиентов с точки зрения корректности полученных результатов, описан в подглаве 1.5. На основе анализа полученных численных результатов можно сделать вывод о том, что метод сопряженных градиентов не во всех задачах имеет преимущество по отношению к другим методам для классических решений, а выбор соответствующих критериев сходимости недооценивается многими авторами. В этой работе показано, что критерии, использованные некоторыми авторами, не гарантируют получения результатов с ожидаемой пользователем точностью. Исследования эффективности метода сопряженных градиентов привели к открытию компенсационного эффекта для некоторого класса стартовых векторов, употребление которых даёт очень сильное увеличение скорости сходимости итерационного процесса. Представленный в работе анализ вектора ошибок позволил выяснить причины компенсационного эффекта.

В диссертации изложены многие теоретические результаты, которые были получены неожиданно, как побочный продукт исследований посвящённых другой тематике. Примером этому может служить алгоритм Sigma-SOR, дающий заранее точную оценку оптимального параметра релаксации и описанный в подглаве 1.6. Наиболее важным теоретическим результатом этой работы является показание того, что минимальные значения спектрального радиуса и поддоминантного отношения в методах SOR выражаются той самой формулой, полученной первоначально

Young'ом. В случае медленно сходящихся задач алгоритм Sigma-SOR имеет очень сильные преимущества по сравнению с общеиспользуемым адаптационным методом, в котором оптимальный параметр релаксации ω_{opt} определяется "динамически" во время выполнения итерационного процесса.

Некоторые исследования разностных схем в треугольной геометрии, выполненные автором, привели к модификации 7-точечной разностной схемы, позволяющей сократить в три раза число точек разностной сетки, а ошибка аппроксимации получаемых решений близка ко второму порядку. Модификация разностной схемы и полученные результаты были представлены на конференции реакторной физики в Мюнхен в 1981г.

Более ранние результаты автора, представленные во главе 1, стали основой главного предмета исследований настоящей диссертации и представлены в остальных главах.

Вторая глава посвящена формулировке задачи. Многогрупповые стационарные (независящие от времени) уравнения диффузии нейтронов описываются системой эллиптических уравнений в частных производных в области Ω с границей Γ и имеют следующий вид

$$-\nabla D_g(r) \nabla \phi_g(r) + \Sigma_g^r(r) \phi_g(r) - \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{g' \rightarrow g}(r) \phi_{g'}(r) = \\ = \frac{1}{\lambda} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{g'}^f(r) \phi_{g'}(r), \quad g=1, 2, \dots, G, \quad (24)$$

где применяются стандартные обозначения, известные как групповые константы. Применены следующие зависящие от групп граничные условия

$$D_g(r) \frac{\partial \phi_g(r)}{\partial n} + \alpha_g(r) \phi_g(r) = 0, \quad r \in \Gamma, \quad (25)$$

где \bar{n} внешняя нормаль к границе Γ .

В области Ω строится сетка Ω_h , аппроксимирующая область Ω . Затем на этой сетке Ω_h происходит аппроксимация производных, входящих в уравнение (24) и краевых условий (25). Наиболее часто используются стандартные конечно-разностные схемы низкого порядка, которые сводят задачу (24) и (25) к системе линейных алгебраических уравнений. Эта система может быть преобразована в следующую матричную задачу на собственные значения

$$E\varphi = \frac{1}{\lambda} X F^T \varphi. \quad (26)$$

Порядок квадратной матрицы

$$E = A - S^d - S^u \quad (27)$$

равен числу точек сетки пространства-энергии, $G \times M$ (G число групп энергии и M число точек пространственной сетки), где матрицы A , S^d и S^u представляют

соответственно члены диффузии-захвата, рассеяния вниз и рассеяния вверх. Компоненты вектора φ представляют приближенные значения потока нейтронов ϕ в узловых точках сетки пространства-энергии. Спектр деления и член продукции представлены соответственно с помощью матриц X и F , где верхний индекс T обозначает транспозицию матрицы.

Свойства уравнения (26) были исчерпывающе исследованы в литературе и оно имеет единственный положительный собственный вектор φ_1 и соответствующее единичное положительное собственное значение λ_1 (интерпретированное как эффективный коэффициент размножения k_{eff}), большее абсолютного значения любого другого собственного значения. Матрица E неособенная и монотонная, т.е. её обратная матрица неотрицательна, и задача на собственные значения (26) может быть записана в следующем виде

$$\lambda \varphi = B\varphi, \quad (28)$$

где

$$B = E^{-1} X F^T \geq 0. \quad (29)$$

Широкий класс методов для определения собственного значения с наибольшим модулем λ_1 и соответствующего собственного вектора φ_1 основан на степенном методе, в котором последовательные приближения для λ_1 и φ_1 определяются с помощью вычислительного процесса

$$\varphi(l+1) = \frac{1}{\lambda(l)} B\varphi(l) \quad (30)$$

и

$$\lambda(l+1) = \lambda(l) \frac{\|\varphi(l+1)\|_p}{\|\varphi(l)\|_p}, \quad (31)$$

где l является номером итерации и две нормы как максимальная $\|\cdot\|_\infty$ так и эвклидова $\|\cdot\|_2$ применяются наиболее часто. Так как наибольшее (по модулю) собственное значение λ_1 неотрицательной матрицы B является положительным и простым, то степенной метод является сходящимся процессом для почти случайно выбранного неотрицательного начального вектора $\varphi(0)$, т.е.

$$\lambda(l) \rightarrow \lambda_1, \quad \varphi(l) \rightarrow \varphi_1 \quad \text{при } l \rightarrow \infty.$$

Скорость сходимости в степенном методе зависит от поддоминантного отношения

$$\sigma(B) = |\lambda_2|/\lambda_1, \quad (32)$$

предполагая, что собственные значения λ_1 матрицы B упорядочены таким образом, что

$$\lambda_1 > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \quad (33)$$

Чем меньше поддоминантное отношение, тем сходимость более быстрая. Предпола-

гая, что для достаточно больших значений l , $\lambda(l)$ приблизительно равно λ_1 , можно равнозначно рассмотреть задачу

$$\varphi(l+1) = B(\lambda_1)\varphi(l), \quad (34)$$

где

$$B(\lambda_1) = \frac{1}{\lambda_1} E^{-1} X F^T \quad (35)$$

имеет собственные значения $\nu_{B,1} = \lambda_1/\lambda_1$ и согласно вышеуказанному порядку

$$\nu_{B,1} = \rho[B(\lambda_1)] = 1 > |\nu_{B,2}| \geq |\nu_{B,3}| \geq \dots,$$

и

$$\delta(B) \equiv \delta[B(\lambda_1)] = |\nu_{B,2}|. \quad (36)$$

В рассуждениях приведенных выше, было принято предположение, что матрица E^{-1} дана в явном виде. Однако в случае одномерных задач, когда нет процесса рассеяния нейтронов вверх, т.е. $S^u = 0$, часто возможно вычислить непосредственно матрицу E^{-1} . В дву- и трёхмерных задачах прямое обращение E оказалось сильно затруднено и, следовательно, должна быть применена специальная итерационная стратегия.

Уравнение (26) вместе с уравнением (27) можно записать как

$$A\varphi = S^d\varphi + S^u\varphi + \frac{1}{\lambda} X F^T \varphi \quad (37)$$

и вводя итерационный индекс l , получают

$$A\varphi(l+1) = S^d\varphi(l+1) + S^u\varphi(l) + \frac{1}{\lambda(l)} X F^T \varphi(l) \quad (38)$$

или эквивалентно

$$\varphi(l+1) = A^{-1}[S^d\varphi(l+1) + S^u\varphi(l) + \frac{1}{\lambda(l)} X F^T \varphi(l)]. \quad (39)$$

Факт, что S^d является точно нижней треугольной блочной матрицей позволяет использовать в вычислительном процессе компоненты φ , полученные в $l+1$ итерации. После выполнения расчётов для итерации $l+1$, новое значение $\lambda(l+1)$ оценивается с помощью формулы (31). Вышеуказанное уравнение может быть представлено в следующем виде

$$\varphi(l+1) = T(\lambda(l))\varphi(l), \quad (40)$$

где

$$T(\lambda(l)) = [I - A^{-1}S^d]^{-1}A^{-1}[S^u + \frac{1}{\lambda(l)} X F^T]. \quad (41)$$

Как можно заметить, значения элементов матрицы $T(\lambda(l))$ неменяются при переходе от данной итерации к очередной итерации в зависимости от того, как меняется значение $\lambda(l)$ и для достаточно больших значений индекса l , $\lambda(l)$ становится близким к λ_1 и

$$T(\lambda(l)) \rightarrow T(\lambda_1) = [I - A^{-1}S^d]^{-1}A^{-1}[S^u + \frac{1}{\lambda_1} X F^T] \geq 0. \quad (42)$$

Предположим, что собственные значения матрицы $T(\lambda_1)$ упорядочены следующим образом

$$\nu_{T,1} = \rho[T(\lambda_1)] = 1 > |\nu_{T,2}| \geq |\nu_{T,3}| \geq \dots,$$

тогда для достаточно больших значений индекса l , скорость сходимости итерационного процесса (2.20) зависит от поддоминантного отношения

$$\delta[T(\lambda_1)] = |\nu_{T,2}|. \quad (43)$$

Очевидно, что при отсутствии верхнего рассеяния, т.е., когда $S^u = 0$,

$$T(\lambda_1) = B(\lambda_1).$$

Итерационный процесс представленный при помощи уравнения (2.20) известен как "итерация источника деления" или как "внешняя итерация". Однако, при проведении итераций необходимо знать вид обратных подматриц A_g , образующих блочно-диагональную структуру матрицы A . В одномерных задачах A_g являются трёхдиагональными матрицами, которые легко обратимы с помощью хорошо известной процедуры прогонки, прямого исключения - обратного подставления. Для дву- и трёхмерных задач у матриц A_g более трёх диагоналей, более того их порядок на много больше, чем в одномерном случае; так что обращение матриц A_g становится очень трудным или просто оно невозможно из-за ошибок округления. В этом случае приближённое обращение матриц A_g обычно проводится итерационным методом используя ряд внутренних итераций. Стратегии, основанные на различных уровнях итераций, представлены в следующих главах.

В третьей главе производятся итерационные подходы, основанные на уровнях глобальных, внешних, внутренних итераций, представленные для формализма однократного расщепления.

Неоднородные решения многогрупповых задач диффузии нейтронов связаны с итерационным решением системы линейных уравнений

$$A\varphi = c, \quad (44)$$

которые могут быть представлены в следующем виде

$$M\varphi^{(t+1)} = N\varphi^{(t)} + c, \quad t \geq 0, \quad (45)$$

где $\varphi^{(t)}$ означает очередную итерацию и

$$A = M - N \quad (46)$$

представляет однократное расщепление неособенной матрицы A размером $N \times N$ как классическое расщепление матрицы A в теории итерационных методов. Вышеуказанный итерационный процесс сходится к единственному решению

$$\varphi = A^{-1}c \quad (47)$$

для каждого $\varphi^{(0)}$ тогда и только тогда, когда M является неособенной матрицей

и соответствующая итерационная матрица

$$\mathfrak{B} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N} \quad (48)$$

имеет $\rho(\mathfrak{B}) < 1$. Уравнение (45) может быть записано в эквивалентном виде

$$\phi^{(t+1)} = \mathfrak{B}\phi^{(t)} + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{c}, \quad t \geq 0 \quad (49)$$

или с использованием $\phi^{(0)}$

$$\phi^{(t+1)} = \mathfrak{B}^{t+1}\phi^{(0)} + \bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1}\mathbf{c}, \quad t \geq 0, \quad (50)$$

где

$$\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1} = (\mathbf{I} + \mathfrak{B} + \mathfrak{B}^2 + \dots + \mathfrak{B}^t)\mathbf{M}^{-1} = \sum_{i=0}^t \mathfrak{B}^i \mathbf{M}^{-1}. \quad (51)$$

Из уравнения (3.3) следует, что

$$\mathbf{A}^{-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N})^{-1}\mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{I} - \mathfrak{B})^{-1}\mathbf{M}^{-1}, \quad (52)$$

отсюда

$$\mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{I} - \mathfrak{B})\mathbf{A}^{-1}. \quad (53)$$

Подставляя уравнение (53) в (51), получают

$$\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1} = (\mathbf{I} - \mathfrak{B}^{t+1})\mathbf{A}^{-1}. \quad (54)$$

Так как при предположении $\rho(\mathfrak{B}) < 1$, \mathfrak{B}^t достигает нулевой матрицы при $t \rightarrow \infty$, и последовательно $\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1} \rightarrow \mathbf{A}^{-1}$, и решение уравнения (50) стремится к единственному решению определенному с помощью уравнения (47) для любого $\phi^{(0)}$. В анализе сходимости итерационных методов асимптотическая скорость сходимости

$$R(\mathfrak{B}) = -\ln \rho(\mathfrak{B}) \quad (55)$$

является наиболее простой практической мерой скорости сходимости для матрицы \mathfrak{B} и особенно полезной для сравнения эффективности различных итерационных методов.

Матрицу $\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1}$ можно рассматривать в некотором смысле как неполную обратную форму матрицы \mathbf{A} , приближающую \mathbf{A}^{-1} после t итераций. Матрица $\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1}$ была названа автором предобратной матрицей t -степени (*preinverter of t -degree*) матрицы \mathbf{A} , где $\bar{\mathbf{M}}_{(\infty)}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}$, а $\bar{\mathbf{M}}_{(0)}^{-1} = \mathbf{M}^{-1}$ является предобратной матрицей 0-степени матрицы \mathbf{A} . Свойства сходимости обычно изучаются с помощью проверки вектора ошибок определяемого при помощи

$$e^{(t+1)} = \phi - \phi^{(t+1)}. \quad (56)$$

В частности, для $\phi^{(0)} = 0$, получают

$$e^{(t+1)} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{c} - \bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1}\mathbf{c},$$

отсюда с помощью уравнения (54)

$$e^{(t+1)} = \mathfrak{B}^{t+1}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{c}. \quad (57)$$

Таким образом, решение уравнения (50) можно сравнить с решением, полученным для предобратной матрицы $\bar{\mathbf{M}}_{(t)}^{-1}$, приближающей \mathbf{A}^{-1} после t итераций. Когда $\phi^{(0)} = 0$, его вектор ошибок по отношению к единственному решению (47) определяется уравнением (57).

Принимается расщепление матрицы \mathbf{A} , как дано в (46), Уравнение (37) может быть записано в следующем виде

$$\mathbf{M}\phi = \mathbf{N}\phi + \mathbf{S}^d\phi + \mathbf{S}^u\phi + \frac{1}{\lambda}\mathbf{X}\mathbf{F}^T\phi \quad (58)$$

и вводя итерационный индекс l , получают

$$\mathbf{M}\phi(l+1) = \mathbf{N}\phi(l) + \mathbf{S}^d\phi(l+1) + \mathbf{S}^u\phi(l) + \frac{1}{\lambda(l)}\mathbf{X}\mathbf{F}^T\phi(l). \quad (59)$$

Если расщепление матрицы \mathbf{A} выбрано таким образом, что \mathbf{M} является неособенной матрицей и относительно легко вычислить обратную ей матрицу, тогда вышеуказанное уравнение может быть выражено как

$$\phi(l+1) = \mathbf{M}^{-1}[\mathbf{S}^d\phi(l+1) + \mathbf{N}\phi(l) + \mathbf{S}^u\phi(l) + \frac{1}{\lambda(l)}\mathbf{X}\mathbf{F}^T\phi(l)] \quad (60)$$

или эквивалентно

$$\phi(l+1) = \mathbf{V}(\lambda(l))\phi(l), \quad (61)$$

где

$$\mathbf{V}(\lambda(l)) = [\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}^d]^{-1}[\mathbf{V} + \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^u + \frac{1}{\lambda(l)}\mathbf{X}\mathbf{F}^T)] \quad (62)$$

и итерационная матрица $\mathbf{V} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ связана с расщеплением матрицы \mathbf{A} .

Для достаточно больших значений индекса l , $\lambda(l) \approx \lambda_1$ и

$$\mathbf{V}(\lambda(l)) \rightarrow \mathbf{V}(\lambda_1) = [\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}^d]^{-1}[\mathbf{V} + \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{S}^u + \frac{1}{\lambda_1}\mathbf{X}\mathbf{F}^T)], \quad (63)$$

и предполагая, что собственные значения матрицы $\mathbf{V}(\lambda_1)$ упорядочены следующим образом

$$v_{v,1} = \rho[\mathbf{V}(\lambda_1)] = 1 > |v_{v,2}| \geq |v_{v,3}| \geq \dots,$$

скорость сходимости в итерационном процессе (61), представляющем собой метод называемый автором стратегией глобальных итераций (1) для однократных расщеплений, зависит от поддоминантного отношения

$$b[\mathbf{V}(\lambda_1)] = |v_{v,2}|, \quad (64)$$

где индекс l относится к глобальным итерациям, которые являются просто итерациями степенного метода, и \mathbf{M}^{-1} представляет собой предобратную матрицу 0-степени матрицы \mathbf{A} .

По аналогии с анализом сходимости итерационных методов решения систем линейных уравнений, определяют асимптотическую скорость сходимости, в следующем виде

$$\dot{R}(\mathbf{V}) = -\ln b[\mathbf{V}], \quad (65)$$

который является полезной мерой скорости сходимости к доминантному собственному значению данной матрицы V в степенном методе.

Спектр собственных значений матрицы $V(\lambda_1)$ зависит от предположенного расщепления матрицы A . Если $A = M - N$ представляет неотрицательное расщепление матрицы A (т.е., $M^{-1} \geq 0$, $M^{-1}N \geq 0$ и $NM^{-1} \geq 0$) или в частности регулярное расщепление матрицы A (т.е., $M^{-1} \geq 0$ и $N \geq 0$), то $V(\lambda_1)$ является неотрицательной матрицей, которая обеспечивает сходимость итерационного процесса (61) для всех $\phi(0)$.

Обычно блочно диагональная матрица A определяется при помощи следующего разложения

$$A = K - L - U, \quad (66)$$

где K , L , U , соответственно, диагональные, строго нижние треугольные и строго верхние треугольные матрицы. Кроме того, эти три матрицы неотрицательны. В большинстве численных задач итерационные схемы основаны на расщеплениях, представляющих метод Гаусса-Зейделя, и определяют их при помощи

$$M = K - L \quad \text{и} \quad N = U. \quad (67)$$

Вышеуказанные уравнения представляют регулярное расщепление матрицы A и соответствующая итерационная матрица \mathcal{L}_1 имеет вид

$$\mathcal{L}_1 = M^{-1}N = [I - K^{-1}L]^{-1}K^{-1}U \geq 0. \quad (68)$$

Метод последовательной верхней релаксации SOR, тесно связанный с методом Гаусса-Зейделя, представлен с помощью следующих матриц расщепления

$$M_\omega = \frac{1}{\omega}K[I - \omega K^{-1}L] \quad \text{и} \quad N_\omega = \frac{1}{\omega}[\omega U - (\omega-1)K] \quad (69)$$

и связанная итерационная матрица \mathcal{L}_ω может быть записана следующим образом

$$\mathcal{L}_\omega = M_\omega^{-1}N_\omega = [I - \omega K^{-1}L]^{-1}K^{-1}[\omega U - (\omega-1)I], \quad (70)$$

где ω параметр релаксации. Очевидно, что для $\omega = 1$, вышеуказанные уравнения сводятся к уравнениям (67) и (68), представляющим метод Гаусса-Зейделя. Как хорошо известно, $\rho(\mathcal{L}_\omega) < 1$ для всех $1 < \omega < 2$ и, когда A является циклической последовательно упорядоченной матрицей с индексом 2 (2-cyclic consistently ordered matrix), существует

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(\mathcal{L}_1)}} \quad (71)$$

доводящее до минимума значения $\rho(\mathcal{L}_\omega)$. Эффективный метод оценки ω_{opt} представлен в [15].

Собственные значения матрицы $V(\lambda_1)$, определённой при помощи уравнения (63), удовлетворяют уравнению

$$[I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}[N + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]x = \nu x \quad (72)$$

или эквивалентно

$$[N + \nu S^d + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]x = \nu Mx \quad (73)$$

и подставляя уравнение (67) в (73), получаем

$$K^{-1}[\nu(L + S^d) + U + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]x = \nu x. \quad (74)$$

В случае применения уравнений (69), соответствующие уравнения могут быть записаны следующим образом

$$V_\omega(\lambda_1)y = [I - M_\omega^{-1}S^d]^{-1}M_\omega^{-1}(N_\omega + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T)y = \eta y \quad (75)$$

или эквивалентно

$$[N_\omega + \eta S^d + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]y = \eta M_\omega y \quad (76)$$

и после подстановки уравнений (69) в уравнение (76), получаем

$$K^{-1}[\eta(L + S^d) + U + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]y = \eta y. \quad (77)$$

В уравнении (77) можно заметить неявную зависимость η от релаксационного параметра ω , где очевидно, $\eta = \nu$ при $\omega = 1$. В случае матрицы \mathcal{L}_ω , мы заинтересованы в нахождении ω , дающего минимум значения доминантного собственного значения, где для случая циклической матрицы с индексом 2, его значение определено с помощью уравнения (71). В рассматриваемых задачах на собственные значения связанные матрицы определены таким образом, что их доминантные собственные значения равны единице, так, что в случае матрицы $V_\omega(\lambda_1)$, $\eta_1 = 1$ и для соответствующего собственного вектора y_1 соотношение

$$K^{-1}[(L + S^d) + U + S^u + \frac{1}{\lambda_1}XF^T]y_1 = y_1 \quad (78)$$

выполнено для всех $\omega \neq 0$. Таким образом, в этом случае главная задача связана с нахождением значения ω , которое минимизирует второе собственное значение η_2 , эквивалентное поддоминантному отношению $\delta[V_\omega(\lambda_1)]$. Как замечено в численных экспериментах, существует ω_{best} , минимизирующее $\delta[V_\omega(\lambda_1)]$ и его значение обычно больше, чем ω_{opt} , минимизирующее спектральный радиус итерационной матрицы \mathcal{L}_ω в методе верхней релаксации SOR. Для $1 \leq \omega \leq \omega_{best}$ $\delta[V_\omega(\lambda_1)]$ уменьшается монотонно, для $\omega_{best} < \omega \leq \omega_{crit}$ наблюдают сильное возрастание $\delta[V_\omega(\lambda_1)]$ и при ω_{crit} появляется расхождение итерационного процесса, где обычно $\omega_{crit} < 2$. Этот эффект обсуждается и демонстрируется в реакторных расчётах, приведённых в главе 5.

Интересно упомянуть, что в реакторной задаче 2, рассмотренной в главе 5, только эта стратегия является наиболее эффективным методом решения по сравнению со всеми остальными методами.

Определяя член источника деления при помощи

$$f(1) = \frac{1}{\lambda(1)} X F^T \varphi(1), \quad (79)$$

можно переписать уравнение (59) как

$$(M - S^d)\varphi(1+1) = (N + S^u)\varphi(1) + f(1). \quad (80)$$

Для стационарных значений $f(1)$ цикл внешних итераций $p=1, 2, \dots, P$ может быть выполнен согласно следующей схеме

$$(M - S^d)\varphi(1+\frac{p}{P}) = (N + S^u)\varphi(1+\frac{p-1}{P}) + f(1) \quad (81)$$

или эквивалентно

$$\varphi(1+\frac{p}{P}) = G\varphi(1+\frac{p-1}{P}) + [I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}f(1), \quad (82)$$

где

$$G = [I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}(N + S^u) = [I - M^{-1}S^d]^{-1}[V + M^{-1}S^u]. \quad (83)$$

Легко заметить, что

$$\text{для } p=1, \varphi(1+\frac{1}{P}) = G\varphi(1) + [I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}f(1),$$

$$\begin{aligned} \text{для } p=2, \varphi(1+\frac{2}{P}) &= G\varphi(1+\frac{1}{P}) + [I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}f(1) \\ &= G^2\varphi(1) + [I + G][I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}f(1) \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\text{для } p=P, \varphi(1+1) = G^P\varphi(1) + [I + G + G^2 + \dots + G^{P-1}][I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}f(1)$$

и эти выражения могут быть записаны в следующем общем виде

$$\varphi(1+1) = \bar{V}(\lambda(1))\varphi(1), \quad (84)$$

где

$$\bar{V}(\lambda(1)) = G^P + \bar{M}_{(P-1)}^{-1} \frac{1}{\lambda(1)} X F^T \quad (85)$$

и

$$\bar{M}_{(P-1)}^{-1} = \sum_{p=1}^P G^{p-1} [I - M^{-1}S^d]^{-1}M^{-1}. \quad (86)$$

Предполагая, что для достаточно больших значений l , $\bar{V}(\lambda(1)) \approx \bar{V}(\lambda_1)$, и собственные значения матрицы $\bar{V}(\lambda_1)$ упорядочены следующим образом

$$\bar{\nu}_{v,1} = \rho[\bar{V}(\lambda_1)] = 1 > |\bar{\nu}_{v,2}| \geq |\bar{\nu}_{v,3}| \geq \dots$$

получаем, что скорость сходимости в итерационном процессе (84), представляющем собой метод называемый автором стратегией глобальных-внешних итераций (l, p) для однократных расщеплений, зависит от поддоминантного отношения

$$\sigma(\bar{V}(\lambda_1)) = |\bar{\nu}_{v,2}|, \quad (87)$$

где индекс p относится к внешним итерациям.

Как можно заметить для сходящейся матрицы G ,

$$G^P \rightarrow 0 \text{ и } \bar{M}_{(P-1)}^{-1} \rightarrow E^{-1} \quad (88)$$

при $P \rightarrow \infty$, отсюда, $\bar{V}(\lambda_1) \rightarrow B(\lambda_1)$. Таким образом матрицу $\bar{M}_{(P-1)}^{-1}$ можно рассматривать как предобратную матрицу $(P-1)$ -степени матрицы E в глобальных-внешних итерациях. Поскольку, при $P = 1$, эта стратегия сводится к стратегии глобальных итераций, отсюда, матрицу $\bar{M}_{(0)}^{-1}$ можно рассматривать как предобратную матрицу нулевой-степени матрицы E в стратегии глобальных итераций.

Эта стратегия используется в методе EQUIPOISE, для которого не было дано доказательство. Однако, как можно заметить из уравнения (85), требование что матрица G должна быть сходящейся матрицей, т.е. $\rho(G) < 1$, является необходимым и достаточным условием сходимости глобальных-внешних итераций. Предполагая, что неотрицательная матрица G , определённая в уравнении (83), имеет собственные значения τ , удовлетворяющие следующему уравнению

$$Gx = \tau x \quad (89)$$

или

$$(N + \tau S^d + S^u)x = \tau Mx \quad (90)$$

и, используя расщеплённые матрицы уравнения (67), получают

$$K^{-1}[\tau(L + S^d) + U + S^u]x = \tau x. \quad (91)$$

Так как диагональные доминантные свойства матрицы $E = A + S^d + S^u$ заключают в себе то, что неотрицательная матрица

$$B_E = K^{-1}[L + S^d + U + S^u] \quad (92)$$

представляющая итерационную матрицу в методе Якоби неприводима и её спектральный радиус меньше единицы, то спектральный радиус матрицы G , представляющий в некотором смысле итерационную матрицу в методе Гаусса-Зейделя, также меньше единицы и, кроме того, $\rho(G) < \rho(B_E)$.

В случае расщеплённых матриц уравнения (69), определяющие метод верхней релаксации SOR, принимают вид

$$G_{\omega}y = [I - M_{\omega}^{-1}S^d]^{-1}M_{\omega}^{-1}(N_{\omega} + S^u)y = \xi y, \quad (93)$$

что даёт

$$(N_{\omega} + \xi S^d + S^u)y = \xi M_{\omega}y$$

или эквивалентно

$$K^{-1}[\xi(L + S^d) + U + S^u]y = \frac{\xi + \omega - 1}{\omega}y. \quad (94)$$

Вышеуказанное уравнение показывает неявную зависимость ξ от параметра релаксации ω . Как хорошо известно, для всех $1 < \omega < 2$, $|\xi| < 1$, т.е. G_{ω} является сходящейся матрицей; кроме того, существует $\bar{\omega}$ минимизирующее доминантное собственное значение ξ_1 , и в случае, когда матрица E является циклической матрицей с индексом 2

$$\bar{\omega} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \tau_1}}, \quad (95)$$

где $\tau_1 = \rho(G) = \rho^2(\mathcal{E}_E)$. В общем случае обе матрицы S^d and S^u неотрицательны и матрица \mathcal{E}_E не имеет никаких свойств цикличности с индексом 2, а также нет никакой точной формулы для $\bar{\omega}$. Однако оценка $\bar{\omega}$ при помощи вышеуказанной формулы является достаточным приближением для приложений. В реакторных задачах без рассеяния нейтронов вверх, для которых $S^u = 0$, \mathcal{E}_E является блочной треугольной матрицей и её собственные значения связаны только с элементами диагональных подматриц $\mathcal{E}_g = K_g^{-1}(L_g + U_g)$, которые являются циклическими матрицами с индексом 2.

Однако, минимизация $\rho(G)$ не включает минимизации $\delta[\bar{V}(\lambda_1)]$ и обычно видно на практике, что значение $\bar{\omega}$ минимизирующее $\rho(G_{\bar{\omega}})$ меньше значения ω_{best} минимизирующего $\delta[\bar{V}(\lambda_1)]$.

Матрично-блочная структура уравнения (58) позволяет, при фиксированном индексе l , ввести следующий цикл внутренних итераций, $t = 1, 2, \dots, T_g$, для каждой группы g

$$M_g \varphi_g(l + \frac{t}{T_g}) = N_g \varphi_g(l + \frac{t-1}{T_g}) + c_g(l), \quad (96)$$

где

$$c_g(l) = \sum_{k=1}^{g-1} S_{k,g}^d \varphi_k(l+1) + \sum_{k=g+1}^G S_{k,g}^u \varphi_k(l) + \frac{1}{\lambda(l)} X_g \sum_{k=1}^G F_k^T \varphi_k(l) \quad (97)$$

включает члены суммарного рассеяния и деления для данной группы g . Уравнение (97) записывается в эквивалентном виде

$$\varphi_g(l + \frac{t}{T_g}) = M_g^{-1} N_g \varphi_g(l + \frac{t-1}{T_g}) + M_g^{-1} c_g(l) = V_g \varphi_g(l + \frac{t-1}{T_g}) + M_g^{-1} c_g(l) \quad (98)$$

и мы имеем

$$\text{для } t=1, \quad \varphi_g(l + \frac{1}{T_g}) = V_g \varphi_g(l) + M_g^{-1} c_g(l)$$

$$\text{для } t=2, \quad \varphi_g(l + \frac{2}{T_g}) = V_g \varphi_g(l + \frac{1}{T_g}) + M_g^{-1} c_g(l) \\ = V_g^2 \varphi_g(l) + (I + V_g) M_g^{-1} c_g(l)$$

$$\dots \\ \dots \\ \text{для } t=T_g, \quad \varphi_g(l+1) = V_g^{T_g} \varphi_g(l) + (I + V_g + V_g^2 + \dots + V_g^{T_g-1}) M_g^{-1} c_g(l),$$

или эквивалентно

$$\varphi_g(l+1) = \tilde{V}_g \varphi_g(l) + \tilde{M}_g^{-1} c_g(l), \quad (99)$$

где

$$\tilde{V}_g = V_g^{T_g} = (M_g^{-1} N_g)^{T_g} \quad (100)$$

и

$$\tilde{M}_g^{-1} = \tilde{M}_{g,(T_g-1)}^{-1} = \sum_{t=1}^{T_g} V_g^{t-1} M_g^{-1} \quad (101)$$

является предобратной матрицей (T_g-1) -степени матрицы A_g .

Определяя

$$\tilde{V} = \begin{bmatrix} \tilde{V}_1 & & & \\ & \tilde{V}_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \tilde{V}_G \end{bmatrix}, \quad \tilde{M}^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{M}_1^{-1} & & & \\ & \tilde{M}_2^{-1} & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \tilde{M}_G^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad c(l) = \begin{bmatrix} c_1(l) \\ c_2(l) \\ \vdots \\ c_G(l) \end{bmatrix} \quad (102)$$

групповые уравнения (99) можно выразить в сжатом виде при помощи одного уравнения

$$\varphi(l+1) = \tilde{V} \varphi(l) + \tilde{M}^{-1} c(l) \quad (103)$$

или

$$\varphi(l+1) = \tilde{V} \varphi(l) + \tilde{M}^{-1} [S^d \varphi(l+1) + S^u \varphi(l) + \frac{1}{\lambda(l)} X F^T \varphi(l)], \quad (104)$$

и отсюда

$$\varphi(l+1) = \tilde{V}(\lambda(l)) \varphi(l), \quad (105)$$

где

$$\tilde{V}(\lambda(l)) = [I - \tilde{M}^{-1} S^d]^{-1} [\tilde{V} + \tilde{M}^{-1} (S^u + \frac{1}{\lambda(l)} X F^T)]. \quad (106)$$

Предполагая, что для достаточно больших значений l , $\tilde{V}(\lambda(l)) \approx \tilde{V}(\lambda_1)$, и собственные значения матрицы $\tilde{V}(\lambda_1)$ упорядочены в следующем виде

$$\tilde{\nu}_{v,1} = \rho[\tilde{V}(\lambda_1)] = 1 > |\tilde{\nu}_{v,2}| \geq |\tilde{\nu}_{v,3}| \geq \dots,$$

скорость сходимости в итерационном процессе (105), представляющем собой метод называемый автором стратегией глобальных-внутренних итераций (l, t) для однократного расщепления, зависит от поддоминантного отношения

$$\delta[\tilde{V}(\lambda_1)] = |\tilde{\nu}_{v,2}|, \quad (107)$$

где индекс t относится к внутренним итерациям, и T_g может иметь разные значения для каждого g .

Как можно заметить, для каждой сходящейся матрицы V_g

$$\tilde{V} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \tilde{M}^{-1} \rightarrow A^{-1} \quad (108)$$

при $T_g \rightarrow \infty$ для каждого $g=1, 2, \dots, G$. Отсюда

$$\tilde{V}(\lambda_1) \rightarrow T(\lambda_1), \quad (109)$$

где $T(\lambda_1)$ определено при помощи уравнений (42). Таким образом, если значения T_g возрастают для всех $g=1, 2, \dots, G$, то спектр собственных значений матрицы $\tilde{V}(\lambda(l))$ стренится к спектру собственных значений матрицы $T(\lambda(l))$.

При $T_g = 1$ для каждого $g = 1, 2, \dots, G$, эта стратегия сводится к стратегии глобальных итераций, $\tilde{M}^{-1} = M^{-1}$ и может рассматриваться как предобратная матрица нулевой степени матрицы A в стратегии глобальных итераций.

Эта стратегия глобальных-внутренних итераций эквивалентна стратегии, известной под названием стратегии внешних-внутренних итераций (где индекс l относится к внешним итерациям, а индекс t к внутренним итерациям), используемой в большинстве компьютерных программ.

Обычно метод SOR, определённый при помощи расщеплённых матриц (69), используют для ускорения сходимости внутренних итераций и поскольку A_g являются циклическими матрицами с индексом 2, оптимальный параметр релаксации ω_{opt} , минимизирующий спектральный радиус итерационной матрицы $V \equiv \mathcal{L}_\omega$ может быть определён при помощи формулы (71). Однако, как можно заметить на практике использование $\omega = \omega_{opt}$ в итерационном процессе не приводит к минимизации $\delta[\tilde{V}(\lambda_1)]$, которая происходит при использовании $\omega = \omega_{best} > \omega_{opt}$ во всех группах.

Матрица $\tilde{V}(\lambda(l))$ уравнений (106) связана с циклом внутренних итераций выполненных во всех группах, $g = 1, 2, \dots, G$, и может быть представлена следующим образом

$$\tilde{V}(\lambda(l)) = \tilde{G} + [I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}\tilde{M}^{-1}\frac{1}{\lambda(l)}XF^T, \quad (110)$$

где

$$\tilde{G} = [I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}[\tilde{V} + \tilde{M}^{-1}S^u]. \quad (111)$$

При вышеуказанном виде матрицы $\tilde{V}(\lambda(l))$ схема глобальных итераций может быть записана как

$$\varphi(l+1) = \tilde{G}\varphi(l) + [I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}\tilde{M}^{-1}\frac{1}{\lambda(l)}XF^T\varphi(l).$$

Теперь вводя в эту схему внешние итерации $p = 1, \dots, P$, и используя связь (79), получаем

$$\begin{aligned} \varphi(l+\frac{p}{P}) &= \tilde{G}\varphi(l+\frac{p-1}{P}) + [I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}\tilde{M}^{-1}f(l) = \\ &= \tilde{G}^p\varphi(l) + [I + \tilde{G} + \tilde{G}^2 + \dots + \tilde{G}^{p-1}][I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}\tilde{M}^{-1}f(l) \end{aligned}$$

и при $p = P$

$$\varphi(l+1) = \tilde{V}(\lambda(l))\varphi(l), \quad (112)$$

где

$$\tilde{V}(\lambda(l)) = \tilde{G}^P + \tilde{M}^{-1}_{(P-1)}\frac{1}{\lambda(l)}XF^T \quad (113)$$

и

$$\tilde{M}^{-1}_{(P-1)} = \sum_{p=1}^P \tilde{G}^{p-1}[I - \tilde{M}^{-1}S^d]^{-1}\tilde{M}^{-1}. \quad (114)$$

Предполагая, что для достаточно больших значений l , $\tilde{V}(\lambda(l)) \approx \tilde{V}(\lambda_1)$, и собственные значения матрицы $\tilde{V}(\lambda_1)$ упорядочены следующим образом

$$\tilde{\nu}_{v,1} = \rho[\tilde{V}(\lambda_1)] = 1 > |\tilde{\nu}_{v,2}| \geq |\tilde{\nu}_{v,3}| \geq \dots,$$

скорость сходимости в итерационном процессе (112), представляющем общий вид метода, называемого автором стратегией глобальных-внешних-внутренних итераций (l, p, t) для однократного расщепления зависит от поддоминантного отношения

$$\delta[\tilde{V}(\lambda_1)] = |\tilde{\nu}_{v,2}| \quad (115)$$

и матрица $\tilde{M}^{-1}_{(P-1)}$ является предобратной матрицей $(P-1)$ -степени матрицы E , с процессом внутренних итераций, включённым в матрицу \tilde{M}^{-1} .

Таким образом, во внутренних итерациях значения φ актуализируются в пределах групп с фиксированными членами рассеяния и деления. На уровне внешних итераций значения φ рассчитываются с актуализацией члена рассеяния нейтронов вниз в данной внешней итерации, а член рассеяния нейтронов вверх актуализируется между очередными внешними итерациями. После окончания цикла внешних итераций, соответствующих одной глобальной итерации (эквивалентной итерации степенного метода), член $\psi = F^T\varphi$ (называемый также источником деления) пересчитывается.

Очевидно, что описанные стратегии, являются частными случаями стратегии глобальных-внешних-внутренних итераций, полученной при предположении $P = 1$ и/или $T_g = 1$ для всех $g = 1, 2, \dots, G$. Конечно, если $P \rightarrow \infty$, то

$$\tilde{G}^P \rightarrow 0, \quad \tilde{M}^{-1}_{(P-1)} \rightarrow E^{-1} \quad \text{и} \quad \tilde{V}(\lambda_1) \rightarrow V(\lambda_1). \quad (116)$$

Как можно заметить структура матрицы $\tilde{V}(\lambda_1)$, выраженной явно при помощи уравнения (113), строго связана как с выбором матриц расщепления M и N , так и значений P и T_g , определяющих степень так называемых "уместных" предобратных матриц; каждое из них влияет на поддоминантное отношение $\delta[\tilde{V}(\lambda_1)]$. Однако их явное взаимодействие создаёт серьёзные трудности в теоретических исследованиях поведения поддоминантного отношения в зависимости от предполагаемого расщепления матрицы $A = M - N$ и значений параметров P и T_g . Отсюда становится ясным почему на практике используют эмпирический подход для оценки итерационных параметров в разных стратегиях. Обычно предполагают, что параметры итерационных стратегий зависят от типа реактора.

В четвёртой главе рассматриваются итерационные подходы, аналогичные тем, которые даны в главе 3, для формализма двухкратного расщепления.

В системе линейных уравнений

$$A\phi = c \quad (117)$$

матрица A может быть выражена в форме

$$A = P - R + S \quad (118)$$

называемой двукратным расщеплением матрицы A и если P является неособенной матрицей, то это расщепление ведёт к следующей трёхслойной схеме

$$P\phi^{(t+1)} = R\phi^{(t)} - S\phi^{(t-1)} + c, \quad t > 0 \quad (119)$$

или эквивалентно

$$\phi^{(t+1)} = P^{-1}R\phi^{(t)} - P^{-1}S\phi^{(t-1)} + P^{-1}c, \quad t > 0. \quad (120)$$

В анализе сходимости этой схемы, можно использовать такой же метод, как и в случае анализа итерационных методов, основанных на однократном расщеплении матрицы $A = M - N$ для которой предполагается, что M является неособенной матрицей. Уравнение (120) может быть записано в следующей эквивалентной форме второго порядка

$$\begin{bmatrix} \phi^{(t+1)} \\ \phi^{(t)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^{-1}R, & -P^{-1}S \\ I, & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi^{(t)} \\ \phi^{(t-1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} P^{-1}c \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (121)$$

Обозначая

$$\Phi^{(t+1)} = \begin{bmatrix} \phi^{(t+1)} \\ \phi^{(t)} \end{bmatrix}, \quad \Phi^{(t)} = \begin{bmatrix} \phi^{(t)} \\ \phi^{(t-1)} \end{bmatrix}, \quad v = \begin{bmatrix} P^{-1}c \\ 0 \end{bmatrix} \quad (122)$$

и

$$W = \begin{bmatrix} P^{-1}R, & -P^{-1}S \\ I, & 0 \end{bmatrix}, \quad (123)$$

получают

$$\Phi^{(t+1)} = W\Phi^{(t)} + v, \quad t > 0. \quad (124)$$

Таким образом, необходимое и достаточное условие, которое обеспечивает сходимость итерационного метода (124) к единственному вектору решения $\phi = A^{-1}c$ для всех векторов $\phi^{(0)}$ и $\phi^{(1)}$, это условие того, что спектральный радиус итерационной матрицы W , $\rho(W)$, должен быть меньше единицы.

Определяем

$$M = \begin{bmatrix} P, & 0 \\ 0, & P \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad N = \begin{bmatrix} R, & -S \\ P, & 0 \end{bmatrix}, \quad (125)$$

тогда

$$A = M - N = \begin{bmatrix} P-R, & S \\ -P, & P \end{bmatrix} \quad (126)$$

представляет однократное расщепление матрицы A , выведённой из двукратного расщепления матрицы A , данного с помощью уравнения (118), где

$$W = M^{-1}N. \quad (127)$$

По аналогии с результатами главы 3 очевидно, что

$$\bar{M}_{(t)}^{-1} = (I + W + W^2 + \dots + W^t)M^{-1} = \sum_0^t W^i M^{-1} \quad (128)$$

или эквивалентно

$$\bar{M}_{(t)}^{-1} = (I - W^{t+1})A^{-1} \quad (129)$$

является преобратной матрицей t -степени матрицы A , и при $\rho(W) < 1$ и $t \rightarrow \infty$

$$\bar{M}_{(t)}^{-1} \rightarrow A^{-1}. \quad (130)$$

Очевидно, при $S = 0$, двукратное расщепление матрицы A сводится к однократному расщеплению матрицы A .

Конструкция итерационных стратегий, основанных на двукратном расщеплении матрицы A , подробно обсуждается в подглавах 4.1, 4.2, 4.3 и 4.4.

Очевидно, что все итерационные решения основанные на использовании двукратного расщепления матрицы A не связаны с задачей (26) а со следующей эквивалентной задачей двукратного порядка на собственные значения

$$E\Phi = \frac{1}{\lambda}XF^T\Phi, \quad (131)$$

где

$$E = A - S^d - S^u. \quad (132)$$

В пятой главе свойство сходимости итерационных стратегий, обсуждённое в двух предыдущих главах, поясняется на большом множестве численных экспериментов для различных типов реакторных задач.

Как было уже упомянуто, особые уровни итераций в стратегии глобальных-внешних-внутренних итераций играют специальную роль в итерационном решении данной задачи. Во внутренних итерациях значения потока нейтронов ϕ актуализируются в группах энергии при заданных членах рассеяния и деления. На уровне внешних итераций значения ϕ вычисляются с актуализацией члена рассеяния-вниз в данной внешней итерации, а член рассеяния-вверх видоизменяется между очередными внешними итерациями. После выполнения цикла внешних итераций, соответствующего одной глобальной итерации и эквивалентной итерации степенного метода, член деления $\psi(l+1) = F^T\phi(l)$ пересчитывается для следующей глобальной итерации.

Скорость сходимости к доминирующему собственному значению данной матрицы V в степенном методе зависит от отделённости наибольшего собственного значения от остальных значений спектра и может быть исследована в условиях асимптотической скорости сходимости, определённых в уравнении (65), т.е.

$$\dot{R}(V) = -\ln \delta[V].$$

Так как число итераций необходимых для вычисления доминирующего собственного значения, при данной степени точности, приблизительно обратно пропорционально скорости сходимости, то эффективность различных итерационных стратегий может быть определена путём сравнения числа итераций, при предположении одинакового числа арифметических операций на одну итерацию.

Однако, структура матриц, появляющихся в стратегиях глобальных-внешних-внутренних итераций, строго связана с выбором матриц расщепления, а также с предположенными числами внешних и внутренних итераций (P и T_g), определяющими степень соответствующих предобратных матриц. Каждое из них влияет не только на поддоминантное отношение, но также вносит вклад, разными путями, в число арифметических операций на одну глобальную итерацию.

Таким образом, эффективность различных стратегий должна быть скорее всего оценена при помощи сравнения вычислительной работы (выраженной при помощи числа флопов) необходимой для получения решения при одинаковых критериях сходимости. Следовательно число глобальных итераций, полученных для отдельных итерационных стратегий, будет преобразовано в общее число флопов на одну точку сетки. Флоп определяется как количество компьютерной работы связанной с числом арифметических операций, необходимых для выполнения следующей арифметической операции

$$a_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \times c_{ij}, \quad (133)$$

которую можно считать удобной единицей оценки работы в компьютерных вычислениях.

Все вычисления были выполнены при помощи следующих программ

HEXAGA, HEXSOR и HEXSLOR

решающих двухмерное многогрупповое уравнение диффузии нейтронов (24) путём разностного приближения основанного на 7-точечной сеточно-граничной (mesh-edged) разностной формуле в однородной треугольной сетке, наложенной на 120-градусную параллелограммную область. В случае натурального упорядочения точек сетки, подматрицы A_g в матрице коэффициентов A , имеют только семь ненулевых диагоналей, принимающих трехдиагональную блочную структуру, подходящую для осуществления 1-линейных алгоритмов. Для решения неоднородных задач с семью диагональными матрицами в пределах внутренних итераций, предфакторизационный метод AGA, точечный метод Гаусса-Зейделя и 1-линейный метод Гаусса-Зейделя используются как алгоритмы матричного расщепления соответственно в программах HEXAGA, HEXSOR и HEXSLOR. Сходимость глобальных итераций во всех программах ускоряется только при помощи процессов последовательных верхних релаксаций во внутренних итерациях. В случае программы HEXAGA процесс двукратной последовательной верхней релаксации, представляющий итерационные стратегии двукратных расщеплений обсуждаемые во главе 4, осуществлён как

наиболее эффективная процедура ускорения сходимости, в которой применено одинаковое значение коэффициента релаксации в обоих проходах, прямом и обратном. В обеих программах HEXSOR и HEXSLOR используется хорошо известный процесс SOR (эквивалентный процессу однократной верхней релаксации), представляющий итерационные стратегии однократных расщеплений, рассмотренные в главе 3.

Вычисления для каждой задачи продолжались до тех пор, пока максимальное, по всех точках сетки и всех группах, относительное изменение потоков нейтронов между глобальными итерациями, ϵ_φ , а также относительные изменения значений k_{eff} , ϵ_k , были меньше чем предписанные числа, где k_{eff} определён следующим образом

$$k_{eff}(l+1) \equiv \lambda(l+1) = \int_V \psi(l+1) dv$$

и интегрирование источников деления $\psi(l+1) = F^T \varphi(l+1)$ приближается при помощи трапециoidalного метода. В случае стратегии глобальных-внешних-внутренних итераций, представленной при помощи уравнений (112)

$$\epsilon_\varphi = \max \left| \frac{\varphi_n(l+1, p=P, t=1) - \varphi_n(l, p=P, t=T)}{\varphi_n(l+1, p=P, t=1)} \right| \quad \text{для всех } n = 1, 2, \dots, N \times G \quad (134)$$

и

$$\epsilon_k = \max \left| \frac{k_{eff}(l+1) - k_{eff}(l)}{k_{eff}(l+1)} \right|, \quad (135)$$

где l , p , t итерационные индексы соответственно в глобальных, внешних и внутренних итерациях. Предполагается, что значения P и T (где $T_g = T$ для всех $1 \leq g \leq G$) постоянны во всём итерационном процессе для данной задачи. Индекс l играет роль итерационного индекса в степенном методе, использующимся для вычисления доминантного собственного значения данной матрицы, структура которой зависит от предполагаемых значений P , T и применяемого (однократного или двукратного) расщепления матрицы A .

В настоящем исследовании, большинство результатов было получено при следующих критериях остановки итерационного процесса

$$\epsilon_\varphi \leq 10^{-5} \quad \text{и} \quad \epsilon_k \leq 10^{-6}, \quad (136)$$

и итерационные стратегии анализировались при следующих числах внутренних итераций, приходящихся на одну внешнюю итерацию

$$T = 1, 2, 3, 5, 8, 12 \text{ и } 20.$$

Сравнение эффективности разных итерационных стратегий, используемых для решения реакторных задач, очень часто проводится при помощи общего числа внутренних итераций, необходимых для получения решения при данных критериях сходимости. В задачах с простой моделью рассеяния, общее число внутренних

итераций, в грубом приближении, пропорционально числу арифметических операций. Однако, для задач, в которых нейтроны рассеиваются через большое число групп энергии, эта пропорциональность не удовлетворена, и общее число внутренних итераций может не быть удовлетворительной мерой объёма арифметической работы. Следовательно, эффективность частичных итерационных стратегий оценивается при помощи сравнения вычислительной работы, выраженной через общее число флопов, необходимых для получения решения при таких же самых критериях остановки итерационного процесса.

Были выполнены компьютерные вычисления для ряда моделей связанных с шестью реакторными задачами (два быстрые и четыре термические реакторные примеры) взятыми, главным образом, из литературы. Первые четыре задачи были вычислены с арифметикой однократной точности (single precision arithmetic) на персональном компьютере, а две последние задачи на компьютере Convex C3210 с арифметикой однократной точности для программы HEXAGA и с арифметикой двукратной точности (double precision arithmetic) для программы HEXSLOR.

Во всех анализированных стратегиях предполагается одно и то же самое число внутренних итераций и одинаковое значение параметра релаксации ω , в каждой группе энергии для целого итерационного процесса. Таким образом, каждый численный эксперимент рассматривается как отдельная задача определённая при помощи предположенного числа внутренних итераций, приходящихся на одну внешнюю итерацию и предположенного значения параметра релаксации ω . В компьютерных вычислениях для каждой задачи используется нулевой начальный вектор $\varphi^{(0)}$ и в случае двукратного расщепления матрицы A , выполненного по алгоритму HEXAGA, предполагается $\varphi^{(1)} = 0$. Однако, для вычисления стартового вектора источника деления $\psi^{(1)} = F^T \varphi^{(0)}$ все компоненты вектора $\varphi^{(0)}$ были положены равными единице. Таким образом, стартовое распределение источников деления было предположено кусочно плоским в расщепляемых подобластях.

Наблюдаемые числа глобальных итераций и соответствующая компьютерная работа (выраженная при помощи числа флопов, приходящихся на одну точку сетки) в зависимости от числа внутренних итераций, приходящихся на одну внешнюю итерацию, предположенная как параметр, представлены графически в зависимости от коэффициента релаксации ω для каждой итерационной стратегии, используемой для решения данной реакторной задачи. Значения оптимальных параметров релаксации ω_{opt} , минимизирующих спектральный радиус блочно-диагональных итерационных матриц V (или W в случае программы HEXAGA) и удовлетворяющих следующему неравенству

$$1 < \omega_{opt}^{HEXAGA} < \omega_{opt}^{HEXSLOR} < \omega_{opt}^{HEXSLOR} < 2,$$

обозначены на рисунках при помощи вертикальных прерывных линий на оси абсцисс

последовательно для программ

HEXAGA, HEXSOR и HEXSLOR.

Значение ω_{opt} определено при помощи формулы, данной с помощью уравнения (71) для программ HEXSOR и HEXSLOR. Однако, надо отметить, что итерационные матрицы V в HEXSOR не являются циклическими последовательно упорядоченными матрицами индекса 2, вычисление ω_{opt} при помощи уравнения (95) даёт достаточно хорошую оценку значения ω_{opt} , необходимую для практических применений. В случае использования HEXSLOR итерационные матрицы V суть циклические последовательно упорядоченные матрицы индекса 2 и оценка ω_{opt} может быть сделана при помощи алгоритма sigma-SOR, описанного в работе [15]. Значение ω_{opt} , минимизирующее спектральный радиус итерационной матрицы W , появляющейся в процессе двукратной верхней релаксации, использованное в программе HEXAGA, было определено при помощи процедуры описанной в работе [13].

Из численных результатов полученных для рассмотренных задач, можно заключить, что существует некоторый диапазон числа внутренних итераций, приходящихся на одну внешнюю итерацию $\underline{T} \leq T \leq \bar{T}$, при $\underline{T} \geq 1$, для которого решение может быть получено при сравнимом итерационном усилии (представленном при помощи общего числа внутренних итераций) и приближённо пропорциональном величине арифметической работы (выраженной при помощи числа флопов на одну точку сетки) в задачах при простых моделях рассеяния. Как можно заметить, для результатов полученных для задачи Зад.6, этот диапазон равен $3 \leq T \leq 20$ для HEXAGA и $2 \leq T \leq 30$ для HEXSLOR, но минимальное число флопов получено при $T = 1$ для обеих программ, где HEXAGA даёт решение при числе флопов на одну точку сетки в два раза меньше.

Таким образом, вопрос о том как именно выбрать число внутренних итераций на одну внешнюю итерацию, используя для этого диапазон значений T или используя критерий для остановки процесса внутренних итераций, дающих решения при сравнительном числе флопов компьютерных вычислений, кажется открытым вопросом в случае обеих программ HEXAGA и HEXSLOR.

Из результатов, полученных при помощи HEXSLOR для задач, рассмотренных в этой работе, скорее всего трудно найти формулу, приближающую достаточно хорошо значение ω_{best} . В задаче Зад.6, а также в других задачах, ω_{best} изменяет своё значение в зависимости от T , следовательно, может оказаться трудным отличить ω_{best} от ω_{opt} как, например это видно в трёх вариантах задачи Зад.1 или в Зад.5, при 2 внутренних итерациях на одну внешнюю итерацию.

Однако, в случае алгоритма HEXAGA можно заметить несколько регулярных отклонений ω_{best} от ω_{opt} в рассмотренных задачах и, кроме того, ω_{opt} скорее всего нечувствительно к использованному числу внутренних итераций на одну внешнюю итерацию. Следующая формула

$$\omega_{best} = \omega_{opt} + \rho(W_1) \frac{1.2 - \omega_{opt}}{2} \quad (137)$$

даёт очень хорошее приближение к верному значению ω_{best} для большого класса реакторных задач, где $\rho(W_1)$ есть спектральный радиус матрицы W при $\omega = 1$, обозначенный как W_1 ; ω_{opt} оптимальный параметр релаксации, минимизирующий спектральный радиус матрицы W_ω в процессе двойной верхней релаксации, использованной в HEXAGA. Оценка ω_{opt} в HEXAGA может быть получена при помощи эффективной техники описанной в [13].

В заключение должно быть подчеркнуто, что главной целью этой главы является численная иллюстрация стратегий, основанных на разных методах матричного расщепления, очевидно возможно не всех из существующих. В решении реакторных задач при наличии рассеяния-вверх при помощи стратегии глобальных-внешних-внутренних итераций, число глобальных итераций уменьшается при увеличении числа внешних итераций P на одну глобальную. Для задач со значительным рассеянием-вверх это сокращение числа глобальных итераций становится зависимым от P . Однако, в случае задач при отсутствии рассеяния-вверх, можно заметить в численных экспериментах, что стратегия глобальных-внешних-внутренних итераций и её варианты (стратегии глобальных-внешних и глобальных-внутренних итераций) дают равные числа глобальных итераций.

Анализ большого числа численных результатов полученных для рассмотренных задач, представляющих разные типы быстрых и термических реакторов, позволяет сделать вывод, что решения при наименьших затратах на вычисления, могут быть получены при помощи итерационной стратегии, где используется только 1 внутренняя итерация на одну глобальную итерацию в программе HEXAGA, алгоритм которой основан на одной из простейших моделей предфакторизационных методов AGA (описанных в главе 1) при использовании процесса двойной верхней релаксации как эффективной техники ускорения сходимости. Это означает, что выбор матриц расщепления имеет доминирующее влияние на эффективность метода, использованного для решения задач теории диффузии нейтронов и наблюдаемое поведение сходимости решений при помощи алгоритма HEXAGA указывает на очевидный значительный потенциал двухкратных расщеплений, происходящих от предфакторизационных методов AGA.

Для всех рассматриваемых задач, HEXAGA даёт решения при от 2 до 5 раз меньшем числе флопов по сравнению с результатами HEXSLOR.

В случае программ VALE и DXY, основанных на многочленном ускорении Чебышева, результаты доступны только для задач Зад.1, Зад.3 и Зад.6, но их сравнение с результатами, полученными при помощи HEXAGA, показывает, что программа HEXAGA требует в два раза меньше вычисления. Результаты DXY для

задачи Зад.6 доступны только при критерии остановки итерационного процесса $\epsilon_\varphi \leq 5 \times 10^{-3}$ и было бы очень интересно сравнить результаты, полученные для этой задачи при $\epsilon_\varphi \leq 10^{-5}$.

Кажется, что сравнение решений для задачи Зад.2, полученных при помощи HEXAGA, DXY, VALE, а также компьютерные программы, основанные на стратегиях развитых в последнее время, могут быть хорошей оценкой доказывающей эффективность этих программ.

В заключение стоит упомянуть, что HEXAGA даёт решения при использовании арифметики с однократной точностью для больших реакторных задач, решение которых при помощи HEXSLOR может быть получено только при использовании арифметики с двухкратной точностью, как было показано в задаче Зад.6. Задача для априорной оценки ω_{best} в HEXAGA достаточно хорошо решена для приложений. Кроме того, проверка симметрии решения в задачах Зад.1 и Зад.2, для которых HEXAGA даёт решения при максимальной относительной ошибке 60-градусной симметрии ϵ_{sym} , меньше на десять порядков по сравнению с решениями программы HEXLOR, что показывает большую погрешность решения программы HEXAGA. Но это позволяет предположить, что в случае решений несимметрических задач при помощи HEXAGA, с одной стороны характеризующихся повышенной скоростью сходимости, с другой стороны они могут быть на много более достоверными, чем решения, полученные при помощи расщепления SLOR использованного в HEXSLOR. Это свойство решений, полученных при помощи HEXAGA является особенно важным в сопряжённых вычислениях потока нейтронов, использованных для получения ответа на малые возмущения.

8. Основные результаты, выносимые на защиту

На защиту выносятся предложенный автором метод решения многомерных задач теории диффузии нейтронов на основе метода трехуровневых (глобальных-внешних-внутренних) итераций, который является обобщением хорошо известного метода внешних-внутренних итераций. Введённая автором матричная формулировка, позволяет точно и наглядно представить взаимозависимость между внутренними и внешними итерациями на уровне глобальных итераций. Эта матричная формулировка позволила также доказать сходимость метода EQUIPOISE, основанного на стратегии глобальных-внешних итераций. Расщепление матриц при помощи двойной верхней релаксации, использованной в предфакторизационном методе AGA, позволяет существенно увеличить скорость сходимости решаемых задач по сравнению с другими существующими методами. Вычислительные эксперименты доказали высокую достоверность результатов программы HEXAGA.

На основании проведенных исследований на защиту выносятся следующие результаты:

1. Развита эффективный алгоритм численного решения двумерных и трехмерных задач теории диффузии нейтронов.
2. Алгоритм реализован в виде комплекса программ HEXAGA, с помощью которых удалось решить много реакторных задач по сложной геометрическо-материальной конфигурации реактора при мелкой сетке.
3. В основу алгоритма положен развитый автором тонкий многоступенчатый итерационный процесс, учитывающий специфику процесса деления нейтронов.
4. Доказана теорема сходимости этого процесса.
5. Установлены априорные оценки значений параметров, позволяющие оптимизировать скорость сходимости итерационного процесса.
6. Достоверность теоретических результатов подтверждается практикой работы комплексов программ HEXAGA.
7. Развитый автором матричный формализм описания итерационного процесса позволяет дать классификацию предфакторизационных методов, которые широко используются в прикладных расчетах.

Результаты, связанные с тематикой диссертации, были опубликованы в следующих научных работах.

1. Z.I. Woźnicki, *EWA-II Two-Dimensional, Two-Group Diffusion Fast Code*, Kernenergie 14, 325-329, 1971.
2. Z.I. Woźnicki, *Two-Sweep Iterative Methods for Solving Large Linear Systems and their Application to the Numerical Solution of Multi-Group, Multi-Dimensional Neutron Diffusion Equation*, Doctoral Dissertation, Institute of Nuclear Research, Świerk-Otwock, Report No.1447/CYFRONET /PM/A, 1973.
3. Т. Апостолов и З. Вознишки, Диффузионная двумерная программа HEXAGA-II для многогрупповых расчетов гексагональных решеток, Атомная Энергия, т. 38, вып. 6, 372-374, 1975.
4. Zbigniew Woźnicki, *Dwuprzbiegowe metody iteracyjne AGA rozwiązywania dużych układów równań liniowych*, Rocznik Polskiego Towarzystwa Matematycznego, Seria III: Matematyka Stosowana VI, 5-16, 1976.
5. Z.I. Woźnicki, *The AGA Two-Sweep Iterative Methods and their Application to the HEXAGA-II Programme for Solving the Two-Dimensional, Multi-Group Neutron Diffusion Equation for an Uniform Triangular Mesh*, Proc. Reaktortagung, Düsseldorf, Germany, March-April, 1976, 83-84.
6. Т.Г. Апостолов, П.Т. Петков и З. Вознишки, Двухмерная многогрупповая диффузионная программа EWA-II-30, Ядерная Энергия 3, 8-15, София, 1976.
7. Z.I. Woźnicki, *AGA Two-Sweep Iterative Methods and their Applications in Critical Reactor Calculations*, Nukleonika 23, 941-968, 1978.
8. Z.I. Woźnicki, *HEXAGA-II-120,-60,-30 two-dimensional multigroup neutron diffusion programmes for a uniform triangular mesh with arbitrary group scattering*, Rep. KfK 2789, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Germany, 1979.
9. Z.I. Woźnicki, *Efficient methods of accelerating reactor diffusion codes*, Proc. International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, Hilton International

Munchen, April 27-29, 1981, Vol.1, 385-399.

10. Z.I. Woźnicki, *HEXAGA-III-120,-30 three-dimensional multigroup neutron diffusion programmes for a uniform triangular mesh with arbitrary group scattering*, Rep. KfK 3572, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Germany, 1983.
11. Z.I. Woźnicki, *Two- and three-dimensional benchmark calculations for triangular geometry by means of HEXAGA programmes*, Proc. Internat. Meeting on Advances in Nuclear Engineering Computational Methods, Knoxville, Tennessee, April 27-28, 1985, American Nuclear Society, 147-156.
12. Z.I. Woźnicki, *AGA Two-Sweep Iterative Methods and their Applications for the Solution of Linear Equation Systems*, Proc. International Conference on Linear Algebra and Applications, Valencia, Spain, September 28-30, 1987 (published in Linear Algebra and its Applications 121, 702-710, 1989).
13. Z.I. Woźnicki, *Estimation of the optimum relaxation factors in partial factorization iterative methods*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 14, 59-73, 1993.
14. Z.I. Woźnicki, *On numerical analysis of conjugate gradient method*, Japan J. Indust. Appl. Math., 12, 487-519, 1993.
15. Z.I. Woźnicki, *The sigma-SOR algorithm and the optimal strategy for the utilization of the SOR iterative method*, Mathematics of Computations, 206, 619-644, 1994.
16. Z.I. Woźnicki, *Nonnegative splitting theory*, Japan J. Indust. Appl. Math., 11, 289-342, 1994.
17. Z.I. Woźnicki, *The Numerical Analysis of Eigenvalue Problem Solutions in the Multigroup Neutron Diffusion Theory*, Institute of Atomic Energy, Otwock-Świerk, Report IEA-6/A (125p.), June 1995.
18. Z.I. Woźnicki, *The Numerical Analysis of Eigenvalue Problem Solutions in the Multigroup Neutron Diffusion Theory* (the abbreviated version of the work [37]), Proc. International Conference on Reactor Physics and Reactor Computations, Tel Aviv, Israel, January 23-26, 1994, 641-653.
19. Z.I. Woźnicki, *On reliability of solution symmetry in neutron diffusion theory problems*, Proc. International Conference on the Physics of Reactors PHYSOR'96, Mito, Ibaraki, Japan, September 16-20, 1996, A21-A30.
20. Z.I. Woźnicki, *Comparison Theorems for Regular Splittings on Block Partitions*, Linear Algebra and its Applications 253, 199-207, 1997.
21. Z.I. Woźnicki, *Comparison Theorems for Splittings of Monotone Matrices*, The invited talk in WCNA'96 - The Second Congress of Nonlinear Analysts, Athens, Greece, July 10-17, 1996. Published in *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 30(2), 1251-1262, 1997 Elsevier Science LTD.
22. Z.I. Woźnicki, *Conditions for Convergence and Comparison*, Proc. 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin, August 1997, Vol.2, Numerical Mathematics, 291-296, Edited by A. Sydow, Wissenschaft & Technik Verlag.
23. Z.I. Woźnicki, *Matrix Splitting Principles*, The invited talk in XII Conference on Applied Mathematics, Palić, Yugoslavia, September 8-12, 1997. To be published in Proceedings in 1998. The final version of the paper submitted to Lin. Alg. Appl.
24. Z.I. Woźnicki, H. Jędrzejec, *How Can We Accelerate the Convergence in the SLOR Method*, The invited talk in 7th Russian Conference on Grid Generation Problems and Numerical Methods in Mathematical Physics, Dursko (Krasnodar region), Russia, September 3-15, 1998. To be published.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 октября 1998 года.