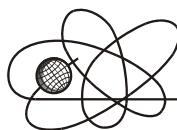




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2014-03

Preprint IBRAE-2014-03

Е.П. Сычугова, Е.Ф. Селезнев

**МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА
НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ТЕТРАЭДРАЛЬНЫХ СЕТКАХ**

Москва
2014

Moscow
2014

УДК 519.6

Сычугова Е.П., Селезнев Е.Ф. Метод конечных элементов для решения уравнения переноса на неструктурированных тетраэдральных сетках. (Препринт / Ин-т проблем безопас. развития атом. энергетики РАН, № IBRAE-2014-03) — М. ИБРАЭ РАН, 2014. — 21 с. — Библиогр.: 14 назв. — 102 экз.

Предлагается метод конечных элементов с аппроксимацией по Галеркину линейными базисными функциями для решения уравнения переноса в приближении дискретных ординат на неструктурированных тетраэдральных сетках. Вывод формул осуществляется с использованием барицентрических координат. Описывается алгоритм решения, и приводятся результаты расчетов бенчмарка в трехмерной защитной композиции с вакуумом. Численное решение сравнивается с решением, полученным аналитическим методом и методом Монте-Карло.

©ИБРАЭ РАН, 2014

Sychugova, E., Seleznev, E. Discontinuous Finite Element Method for Solving the S_n Transport Equation on Unstructured Tetrahedral Grids — (Preprint / Nuclear Safety Institute RAS, 2014, № IBRAE-2014-03). — Moscow : NSI RAS, 2014. — 21 p. — Refs.: 14 items.

The Discontinuous Finite Element Method with Galerkin Approximation of Linear Basis Functions for solving the S_n Transport Equation on Unstructured Tetrahedral Grids is proposed. Derivation of the formulas is performed using barycentric coordinates. Solution techniques are described and numerical results of 3-D Radiation Transport Benchmark Problem with vacuum are given. The numerical solution is compared with the results obtained by Analytical method and Monte Carlo method.

©Nuclear Safety Institute, 2014

Метод конечных элементов для решения уравнения переноса на неструктурированных тетраэдральных сетках

Е.П.Сычугова, Е.Ф.Селезнев

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
115191, Москва, ул. Б. Тульская, 52
тел.: (495) 955-22-56, факс: (495) 955-22-54, эл. почта: mnk@ibrae.ac.ru

Содержание

1 Введение.....	3
2 Постановка задачи.....	4
3 Аппроксимация уравнения переноса.....	4
4 Алгоритм решения на неструктурированной тетраэдральной сетке.....	14
5 Результаты тестовых расчетов.....	15
6 Заключение.....	21
Список литературы.....	21

1 Введение

Данная работа посвящена проблеме решения уравнения переноса Методом Конечных Элементов (МКЭ) на неструктурированных тетраэдральных сетках в приближении дискретных ординат. В [1] и [2] проведено исследование этого метода в одномерной плоской геометрии и в двумерной X-Y геометрии на неструктурированных треугольных сетках. Для аппроксимации решения использовались линейные базисные функции. В качестве весовых функций были выбраны базисные функции, что соответствует аппроксимации по Галеркину. Тестовые расчеты решения уравнения переноса на неструктурированных треугольных сетках в X-Y геометрии показали, что МКЭ сходится к точному решению с третьим порядком [2]. Сделан вывод о том, что МКЭ алгоритмически прост и не уступает по точности LN методу [3], предназначенному для решения на регулярных прямоугольных сетках. Кроме того, МКЭ на неструктурированных сетках обладает существенным преимуществом перед LN методом при решении уравнения переноса в областях, содержащих зоны с непрямоугольными и криволинейными границами. Именно такие задачи возникают при математическом моделировании ядерных реакторов на быстрых нейтронах, когда необходимо проводить массовые высокоточные расчеты задач защиты на неструктурированных сетках. В России нет отечественных программ, позволяющих проводить такие расчеты. В США разработана программа ATTILA [4], использующая линейный метод конечных элементов DFEM (Discontinuous Finite Element Method) [5] для решения уравнения переноса на пространственных сетках, состоящих из четырехгранных и шестигранных конечных элементов с не плоскими гранями. Численные исследования в трехмерной геометрии показали, что DFEM с аппроксимацией по Галеркину линейными базисными функциями обладает третьим порядком точности [5]. Формулы DFEM содержат в качестве коэффициентов интегральные выражения, которые вычисляются в ходе расчетов с помощью квадратуры Гаусса. В случае, когда все грани конечного элемента плоские, уравнения метода упрощаются, т.к. интегральные коэффициенты вычисляются по аналитическим формулам. Одно из таких уравнений для тетраэдра приведено в работе [6]. Для вывода полной системы уравнений DFEM предлагается использовать барицентрические координаты [7].

В данной работе выполняется математический вывод формул МКЭ для тетраэдра с использованием аппроксимации по Галеркину линейными базисными функциями, записывается полная система уравнений МКЭ для всех случаев освещенности тетраэдра и приводится алгоритм решения уравнения переноса на неструктурированной тетраэдральной сетке. Кроме того, рассматриваются результаты расчетов трехмерной неоднородной задачи [8] в чисто поглощающей среде с вакуумом. Полученное решение сравнивается с решением аналитическим методом, взятым из таблиц [8]. Рассматриваются так же результаты расчетов аналогичной задачи в рассеивающей среде, которые сравниваются с решением, полученным методом Монте-Карло [8].

2 Постановка задачи

Запишем краевую задачу для решения уравнения переноса частиц в выпуклой трехмерной области D . Для частиц из энергетической группы g ($g=1,2,\dots,NG$) уравнение переноса записывается относительно функции плотности потока частиц $\Psi^g(x,y,z,\mu,\eta,\xi)$, летящих со скоростью V^g в направлении $\vec{\Omega}=(\mu,\eta,\xi)$ ($\mu^2+\eta^2+\xi^2=1$):

$$\mu \frac{\partial \Psi^g}{\partial x} + \eta \frac{\partial \Psi^g}{\partial y} + \xi \frac{\partial \Psi^g}{\partial z} + \Sigma_T^g(x,y,z) \cdot \Psi^g(x,y,z,\mu,\eta,\xi) = Q^g(x,y,z,\mu,\eta,\xi), \quad (1)$$

где направляющие косинусы определяются по формулам:

$$\begin{aligned} \xi &= \cos \theta = (\vec{\Omega} \cdot \vec{i}_z), \\ \mu &= \sqrt{1-\xi^2} \cos \varphi = (\vec{\Omega} \cdot \vec{i}_x), \\ \eta &= \sqrt{1-\xi^2} \sin \varphi = (\vec{\Omega} \cdot \vec{i}_y). \end{aligned}$$

Здесь θ – полярный угол между вектором $\vec{\Omega}$ и осью Z , φ – азимутальный угол между проекцией вектора $\vec{\Omega}$ на плоскость X - Y и осью X , \vec{i}_x , \vec{i}_y и \vec{i}_z – единичные векторы направления соответствующих осей.

В уравнение (1) входит полное макроскопическое сечение взаимодействия $\Sigma_T^g(x,y,z)$ в группе g и функция $Q^g(x,y,z,\mu,\eta,\xi)$ – правая часть уравнения переноса, вообще говоря, зависящая от решения $\Psi^g(x,y,z,\mu,\eta,\xi)$. В правую часть входят: источник межгрупповых и внутригрупповых переходов, источник деления и заданный внутренний источник. На границе Γ области D задаются нулевые значения углового потока для направлений внутрь области:

$$\Psi_{\Gamma, (\vec{\Omega} \cdot \vec{n}) < 0}^g(\mu,\eta,\xi) = 0, \quad (2)$$

либо условия отражения.

Для решения задачи (1) – (2) используется Метод Дискретных Ординат (МДО) по угловым переменным в сочетании с линейным методом конечных элементов по пространственным переменным. Многогрупповая система уравнений (1) решается итерационным способом.

3 Аппроксимация уравнения переноса

Предположим, что в правой части (1) стоит известная функция, и запишем уравнение (1) с использованием дискретных ординат [9]:

$$\mu_m \frac{\partial \Psi_m}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Psi_m}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Psi_m}{\partial z} + \Sigma_T(x,y,z) \cdot \Psi_m(x,y,z) = Q_m(x,y,z), \quad (3)$$

где индекс номера группы g опущен, индексу m ($m=1,2,\dots,M$) соответствует дискретное направление $\vec{\Omega}_m=(\mu_m,\eta_m,\xi_m)$ из квадратурного набора (с равными весами ES_n [10] или Чебышева-Лежандра CL_n [11]), причем величина поверхности единичной сферы измеряется в единицах 4π , т.е. $\sum_{m=1}^M \omega_m = 1$. Формулы МКЭ выводятся путем аппроксимации уравнения переноса по Галеркину методом взвешенных невязок [12].

Пусть разбиение области D на тетраэдры удовлетворяет условию неизменности свойств среды внутри каждого тетраэдра. Построим неструктурированную тетраэдральную сетку в выпуклой области D . По определению [6] неструктурированной тетраэдральной сеткой называется такая сетка, у которой каж-

дая вершина тетраэдра может быть общей вершиной произвольного числа тетраэдров, но каждая грань тетраэдра может быть общей с гранью только одного другого тетраэдра сетки.

Пусть вся расчетная область разбивается на I тетраэдров, и каждый i -тый тетраэдр является конечным элементом с номером i . На рис. 1 изображен типичный i -тый тетраэдр с вершинами в точках $P_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $P_2 = (x_2, y_2, z_2)$, $P_3 = (x_3, y_3, z_3)$ и $P_4 = (x_4, y_4, z_4)$. Далее везде используется согласованный порядок нумерации, т.е. для вершины 4 нумерация остальных вершин осуществляется против часовой стрелки, если смотреть из вершины 4, задавая элемент как 1234.

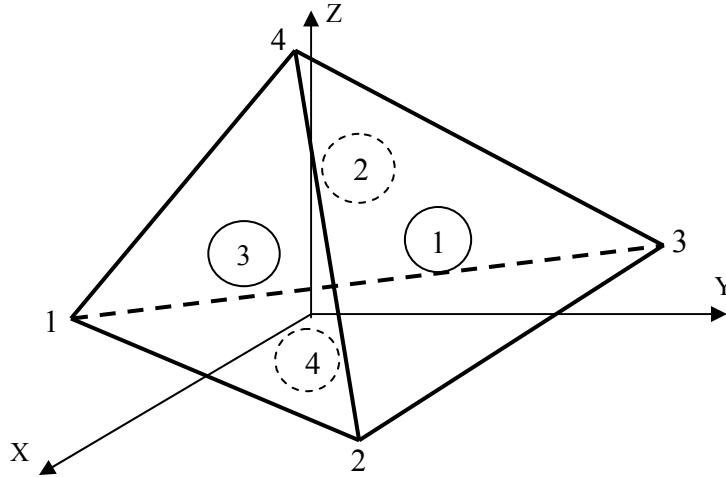


Рис. 1. Типичный i -тый тетраэдр с нумерацией вершин и граней

Вершины тетраэдра пронумерованы так, чтобы ориентация тройки векторов $\overline{P_4P_1}$, $\overline{P_4P_2}$, $\overline{P_4P_3}$ совпала с ориентацией правой системы координат. Тогда будет положительным ориентированный объем V_1 этого тетраэдра:

$$6V_1 = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}. \quad (4)$$

На рис. 1 в кружочках приведена типичная нумерация граней тетраэдра, при которой номер грани совпадает с номером противоположной вершины. Сопоставим i -тому тетраэдру функцию $\Psi_{m,i}(x, y, z)$, аппроксимирующую точное решение $\Psi_m(x, y, z)$ уравнения (3) внутри тетраэдра и равную нулю вне его. Тогда глобальное решение $\Psi_m(x, y, z)$ может быть записано следующим образом:

$$\Psi_m(x, y, z) = \sum_{i=1}^I \Psi_{m,i}(x, y, z).$$

Функция $\Psi_m(x, y, z)$ является разрывной на гранях тетраэдров сетки. Так как угловой поток задается в каждом тетраэдре независимо, существует его двусмысленное определение на гранях сетки. Для однозначного определения решения полагают, что значения функции плотности потока на каждой грани тетраэдра являются ее пределом при приближении к грани в том направлении, в котором частицы летят.

Определим аппроксимирующую функцию $\Psi_{m,i}(x, y, z)$ внутри i -го тетраэдра с помощью линейно-независимого набора четырех линейных базисных функций $L_i^k(x, y, z)$:

$$\Psi_{m,i}(x, y, z) = \sum_{k=1}^4 \Psi_{m,i}^k L_i^k(x, y, z), \quad (5)$$

где k – номер вершины i -го тетраэдра. Неизвестные коэффициенты $\Psi_{m,i}^k$ можно интерпретировать как значения $\Psi_{m,i}(x, y, z)$ в вершинах (x_k, y_k, z_k) i -го тетраэдра. Аналогичным образом вводится аппроксимация $q_{m,i}(x, y, z)$ правой части $Q_m(x, y, z)$ уравнения (3) внутри i -го тетраэдра:

$$q_{m,i}(x, y, z) = \sum_{k=1}^4 q_{m,i}^k L_i^k(x, y, z). \quad (6)$$

Линейные базисные функции $L_i^k(x, y, z)$ являются многочленами Лагранжа. По определению функция $L_i^k(x, y, z)$ в i -том тетраэдре равна единице, если, $x = x_k$, $y = y_k$ и $z = z_k$, и равна нулю в остальных трех вершинах тетраэдра: $x = x_j$, $y = y_j$ и $z = z_j$, где $j \neq k$. С другой стороны, линейные базисные функции являются барицентрическими координатами «главного» тетраэдра, изображенного на рис. 2 в локальной системе координат $\Sigma = \{O; u, v, w\}$.

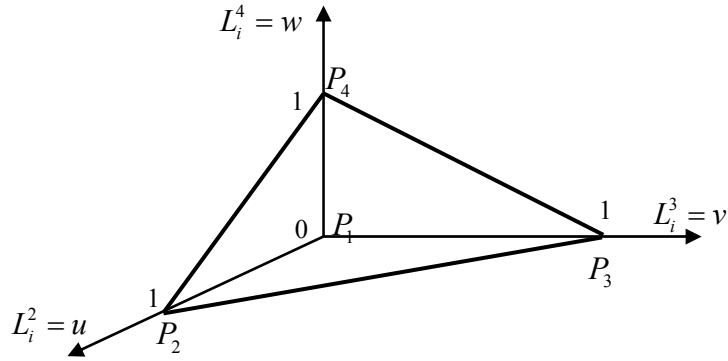


Рис. 2. «Главный» тетраэдр в локальной системе координат $\Sigma = \{O; u, v, w\}$

Барицентрическая система координат $\Sigma = \{O; u, v, w\}$ в трехмерном аффинном пространстве определяется заданием четырех точек P_1, P_2, P_3, P_4 , являющихся вершинами «главного» тетраэдра из этого пространства [13]. Барицентрическими координатами точки P являются такие веса L_i^k , $k = 1, \dots, 4$, которые, будучи приписаны точкам P_k , $k = 1, \dots, 4$, образуют систему, центр тяжести которой есть точка P : $P_\Sigma = (L_i^1, L_i^2, L_i^3, L_i^4)_\Sigma$. Если умножить барицентрические координаты точки на одно и то же число, то положение определяемой ими точки не изменится. На «главном» тетраэдре барицентрическими координатами являются базисные функции, которые определяются через локальные координаты (u, v, w) следующим образом:

$$\begin{aligned} L_i^1 &= 1 - u - v - w \\ L_i^2 &= u \\ L_i^3 &= v \\ L_i^4 &= w \end{aligned} \quad (7)$$

Каждая из базисных функций L_i^k равна единице в собственной вершине и нулю в других вершинах тетраэдра. Использование локальных координат упрощает вывод формул МКЭ. Совместно с уравнениями (7), отображение между глобальными декартовыми координатами i -го тетраэдра сетки, показанного на рис.1, и локальными барицентрическими координатами осуществляется путем представления глобальных координат (x, y, z) в виде линейной комбинации барицентрических координат $(L_i^1, L_i^2, L_i^3, L_i^4)$:

$$\begin{aligned}
1 &= L_i^1 + L_i^2 + L_i^3 + L_i^4 \\
x &= L_i^1 x_1 + L_i^2 x_2 + L_i^3 x_3 + L_i^4 x_4 \\
y &= L_i^1 y_1 + L_i^2 y_2 + L_i^3 y_3 + L_i^4 y_4 \\
z &= L_i^1 z_1 + L_i^2 z_2 + L_i^3 z_3 + L_i^4 z_4
\end{aligned} \tag{8}$$

Решая систему линейных уравнений (8) относительно базисных функций, можно получить формулы $L_i^k(x, y, z)$, $k=1, \dots, 4$ в декартовой системе координат через заданные координаты четырех вершин тетраэдра. Запишем полученное решение, используя определители. Для базисной функции L_i^1 имеем следующую формулу:

$$L_i^1(x, y, z) = \frac{1}{6V_1}(a_1 + b_1x + c_1y + d_1z),$$

где коэффициенты имеют вид:

$$a_1 = \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \quad b_1 = - \begin{vmatrix} 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \quad c_1 = - \begin{vmatrix} x_2 & 1 & z_2 \\ x_3 & 1 & z_3 \\ x_4 & 1 & z_4 \end{vmatrix} \quad d_1 = - \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \\ x_4 & y_4 & 1 \end{vmatrix}. \tag{9}$$

Значениями b_1, c_1, d_1 являются удвоенные ориентированные площади трех проекций грани 1 i -го тетраэдра на координатные плоскости. Для полноты приведем остальные формулы, которые получаются циклической заменой индексов в порядке 1,2,3,4:

$$L_i^2(x, y, z) = \frac{1}{6V_2}(a_2 + b_2x + c_2y + d_2z)$$

$$L_i^3(x, y, z) = \frac{1}{6V_3}(a_3 + b_3x + c_3y + d_3z)$$

$$L_i^4(x, y, z) = \frac{1}{6V_4}(a_4 + b_4x + c_4y + d_4z)$$

$$\begin{aligned}
6V_2 &= \begin{vmatrix} 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \\ 1 & x_1 & y_1 & z_1 \end{vmatrix} & a_2 &= \begin{vmatrix} x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \\ x_1 & y_1 & z_1 \end{vmatrix} & b_2 &= - \begin{vmatrix} 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \\ 1 & y_1 & z_1 \end{vmatrix} & c_2 &= - \begin{vmatrix} x_3 & 1 & z_3 \\ x_4 & 1 & z_4 \\ x_1 & 1 & z_1 \end{vmatrix} & d_2 &= - \begin{vmatrix} x_3 & y_3 & 1 \\ x_4 & y_4 & 1 \\ x_1 & y_1 & 1 \end{vmatrix} \\
6V_3 &= \begin{vmatrix} 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \\ 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} & a_3 &= \begin{vmatrix} x_4 & y_4 & z_4 \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} & b_3 &= - \begin{vmatrix} 1 & y_4 & z_4 \\ 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} & c_3 &= - \begin{vmatrix} x_4 & 1 & z_4 \\ x_1 & 1 & z_1 \\ x_2 & 1 & z_2 \end{vmatrix} & d_3 &= - \begin{vmatrix} x_4 & y_4 & 1 \\ x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \end{vmatrix} \\
6V_4 &= \begin{vmatrix} 1 & x_4 & y_4 & z_4 \\ 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} & a_4 &= \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} & b_4 &= - \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} & c_4 &= - \begin{vmatrix} x_1 & 1 & z_1 \\ x_2 & 1 & z_2 \\ x_3 & 1 & z_3 \end{vmatrix} & d_4 &= - \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}
\end{aligned} \tag{10}$$

В соответствии с определением пространства, в котором аппроксимируется точное решение уравнения (3), имеется $4 \cdot I$ неизвестных, которые должны быть найдены для каждого направления m , где I – полное число тетраэдров. Поэтому необходимо получить $4 \cdot I$ уравнений для этих неизвестных. Достаточно построить систему четырех уравнений относительно четырех неизвестных на заданном тетраэдре, полагая, что плотность потока на входящей грани тетраэдра известна из граничных условий или из предыдущих вычислений в примыкающем тетраэдре. Входящей гранью тетраэдра является та его грань, через которую частицы входят. Входящая грань для одного тетраэдра является выходящей гранью для примыкающего к нему тетраэдра. Определение входящей грани зависит от рассматриваемого направления (μ_m, η_m, ξ_m) . Различаются три случая освещенности тетраэдра, когда одна, две или три грани освещены.

щены. На рис. 3 показано взаимное расположение тетраэдра и направления полета частиц $\vec{\Omega}_m$, при котором грани с номерами 2 и 3 являются входящими.

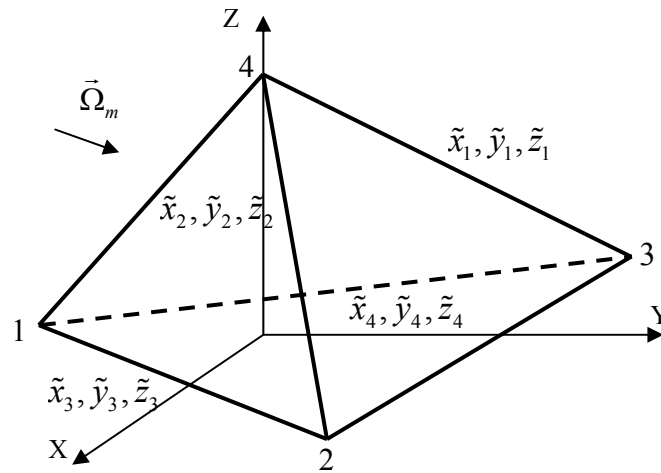


Рис. 3. Тетраэдр с двумя входящими гранями с номерами 2 и 3

Уравнения j -той грани являются уравнениями плоскости, содержащей три вершины тетраэдра, и записываются с использованием коэффициентов (9) и (10) следующим образом:

$$\begin{aligned}\tilde{x}_j : \quad x &= x_{j+1} - \frac{c_j}{b_j}(y - y_{j+1}) - \frac{d_j}{b_j}(z - z_{j+1}) \\ \tilde{y}_j : \quad y &= y_{j+1} - \frac{b_j}{c_j}(x - x_{j+1}) - \frac{d_j}{c_j}(z - z_{j+1}) \\ \tilde{z}_j : \quad z &= z_{j+1} - \frac{b_j}{d_j}(x - x_{j+1}) - \frac{c_j}{d_j}(y - y_{j+1}),\end{aligned}$$

где $j = 1, 2, 3, 4$ и $x_5 \equiv x_1, y_5 \equiv y_1, z_5 \equiv z_1$.

Для получения системы четырех уравнений относительно четырех неизвестных в i -том тетраэдре необходимо записать невязку уравнения (3). Приведем общее выражение невязки для всех случаев освещенности с использованием параметров γ_j ($j = 1, 2, 3, 4$). Пусть $\gamma_j = 1$, если поток частиц входит в тетраэдр через грань с номером j , и $\gamma_j = 0$, если поток выходит из тетраэдра через грань с номером j . Подставим аппроксимации углового потока $\psi_{m,i}(x, y, z)$ и правой части $q_{m,i}(x, y, z)$ в уравнение (3) и запишем выражение для невязки:

$$\begin{aligned}
R_{m,i}(x, y, z) = & \mu_m \frac{\partial \Psi_{m,i}(x, y, z)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Psi_{m,i}(x, y, z)}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Psi_{m,i}(x, y, z)}{\partial z} + \\
& + \Sigma_T(x, y, z) \cdot \Psi_{m,i}(x, y, z) - q_{m,i}(x, y, z) + \\
& + \gamma_1 \{ \mu_m [\Psi_{m,i}(x, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \delta(x - \tilde{x}_1) + \\
& \quad + \eta_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_1, y, \tilde{z}_1) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \delta(y - \tilde{y}_1) + \\
& \quad + \xi_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, z) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \delta(z - \tilde{z}_1) \} + \\
& + \gamma_2 \{ \mu_m [\Psi_{m,i}(x, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2)] \delta(x - \tilde{x}_2) + \\
& \quad + \eta_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_2, y, \tilde{z}_2) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2)] \delta(y - \tilde{y}_2) + \\
& \quad + \xi_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, z) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2)] \delta(z - \tilde{z}_2) \} + \\
& + \gamma_3 \{ \mu_m [\Psi_{m,i}(x, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3)] \delta(x - \tilde{x}_3) + \\
& \quad + \eta_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_3, y, \tilde{z}_3) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3)] \delta(y - \tilde{y}_3) + \\
& \quad + \xi_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, z) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3)] \delta(z - \tilde{z}_3) \} + \\
& + \gamma_4 \{ \mu_m [\Psi_{m,i}(x, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4)] \delta(x - \tilde{x}_4) + \\
& \quad + \eta_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_4, y, \tilde{z}_4) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4)] \delta(y - \tilde{y}_4) + \\
& \quad + \xi_m [\Psi_{m,i}(\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, z) - \Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4)] \delta(z - \tilde{z}_4) \}.
\end{aligned} \tag{11}$$

В (11) входит Дельта-функция Дирака, возникающая вследствие скачка разрывной функции на гранях i -того тетраэдра, где имеется входящий поток $\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_j, \tilde{y}_j, \tilde{z}_j)$ направления m через грань j , который имеет следующий вид для всех граней $j = 1, 2, 3, 4$:

$$\begin{aligned}
\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1) &= [\Psi_{\mathbf{B}m,i}^{2(1)} L_i^2 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{3(1)} L_i^3 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{4(1)} L_i^4](\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1) \\
\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2) &= [\Psi_{\mathbf{B}m,i}^{1(2)} L_i^1 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{3(2)} L_i^3 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{4(2)} L_i^4](\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2) \\
\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3) &= [\Psi_{\mathbf{B}m,i}^{1(3)} L_i^1 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{2(3)} L_i^2 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{4(3)} L_i^4](\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3) \\
\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4) &= [\Psi_{\mathbf{B}m,i}^{1(4)} L_i^1 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{2(4)} L_i^2 + \Psi_{\mathbf{B}m,i}^{3(4)} L_i^3](\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4).
\end{aligned} \tag{12}$$

Коэффициенты $\Psi_{\mathbf{B}m,i}^{k(j)}$ в правой части (12) можно интерпретировать как значения входящего потока в вершине k на грани $(\tilde{x}_j, \tilde{y}_j, \tilde{z}_j)$. В (12) учтено, что многочлены Лагранжа принимают нулевые значения на гранях, противоположных собственным вершинам:

$$L_i^k(\tilde{x}_k, \tilde{y}_k, \tilde{z}_k) \equiv 0, k = 1, 2, 3, 4.$$

Для функции $\Psi_{m,i}(x, y, z)$ невязка $R_{m,i}(x, y, z)$ не может быть тождественно равной нулю, так как вряд ли точное решение может быть задано линейными многочленами. Потребуем равенства нулю интегралов по тетраэдру от невязки с базовыми весовыми функциями $L_i^k(x, y, z)$, в соответствии с аппроксимацией по Галеркину:

$$\iint_V R_{m,i}(x, y, z) L_i^k(x, y, z) dx dy dz = 0, k = 1, 2, 3, 4. \tag{13}$$

Это выражение представляет собой линейную алгебраическую систему четырех уравнений относительно четырех неизвестных $\Psi_{m,i}^k$, $k = 1, 2, 3, 4$, которая невырожденная и разрешима явным способом.

Перепишем выражение для невязки (11) с учетом разложений по многочленам Лагранжа решения (5) и правой части (6) внутри тетраэдра и входящего потока $\Psi_{\mathbf{B}m,i}(\tilde{x}_j, \tilde{y}_j, \tilde{z}_j)$ на гранях тетраэдра (12). В результате получим следующее выражение для невязки:

$$\begin{aligned}
R_{m,i}(x, y, z) = & \mu_m [\psi_{m,i}^1 \frac{\partial L_i^1}{\partial x} + \psi_{m,i}^2 \frac{\partial L_i^2}{\partial x} + \psi_{m,i}^3 \frac{\partial L_i^3}{\partial x} + \psi_{m,i}^4 \frac{\partial L_i^4}{\partial x}] + \\
& + \eta_m [\psi_{m,i}^1 \frac{\partial L_i^1}{\partial y} + \psi_{m,i}^2 \frac{\partial L_i^2}{\partial y} + \psi_{m,i}^3 \frac{\partial L_i^3}{\partial y} + \psi_{m,i}^4 \frac{\partial L_i^4}{\partial y}] + \xi_m [\psi_{m,i}^1 \frac{\partial L_i^1}{\partial z} + \psi_{m,i}^2 \frac{\partial L_i^2}{\partial z} + \psi_{m,i}^3 \frac{\partial L_i^3}{\partial z} + \psi_{m,i}^4 \frac{\partial L_i^4}{\partial z}] + \\
& + \Sigma_T(x, y) \cdot [\psi_{m,i}^1 L_i^1 + \psi_{m,i}^2 L_i^2 + \psi_{m,i}^3 L_i^3 + \psi_{m,i}^4 L_i^4] - [q_{m,i}^1 L_i^1 + q_{m,i}^2 L_i^2 + q_{m,i}^3 L_i^3 + q_{m,i}^4 L_i^4] + \\
& + \gamma_1 \{ \mu_m [L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)})] (x, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1) \delta(x - \tilde{x}_1) + \\
& \quad + \eta_m [L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)})] (\tilde{x}_1, y, \tilde{z}_1) \delta(y - \tilde{y}_1) + \\
& \quad + \xi_m [L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)})] (\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, z) \delta(z - \tilde{z}_1) \} + \\
& + \gamma_2 \{ \mu_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)})] (x, \tilde{y}_2, \tilde{z}_2) \delta(x - \tilde{x}_2) + \\
& \quad + \eta_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)})] (\tilde{x}_2, y, \tilde{z}_2) \delta(y - \tilde{y}_2) + \\
& \quad + \xi_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)})] (\tilde{x}_2, \tilde{y}_2, z) \delta(z - \tilde{z}_2) \} + \\
& + \gamma_3 \{ \mu_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)})] (x, \tilde{y}_3, \tilde{z}_3) \delta(x - \tilde{x}_3) + \\
& \quad + \eta_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)})] (\tilde{x}_3, y, \tilde{z}_3) \delta(y - \tilde{y}_3) + \\
& \quad + \xi_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)}) + L_i^4 (\psi_{m,i}^4 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)})] (\tilde{x}_3, \tilde{y}_3, z) \delta(z - \tilde{z}_3) \} + \\
& + \gamma_4 \{ \mu_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)})] (x, \tilde{y}_4, \tilde{z}_4) \delta(x - \tilde{x}_4) + \\
& \quad + \eta_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)})] (\tilde{x}_4, y, \tilde{z}_4) \delta(y - \tilde{y}_4) + \\
& \quad + \xi_m [L_i^1 (\psi_{m,i}^1 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)}) + L_i^2 (\psi_{m,i}^2 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)}) + L_i^3 (\psi_{m,i}^3 - \psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)})] (\tilde{x}_4, \tilde{y}_4, z) \delta(z - \tilde{z}_4) \}.
\end{aligned} \tag{14}$$

Для записи системы линейных уравнений МКЭ надо подставить невязку (14) в (13), проинтегрировать с весом $L_i^k(x, y, z)$ для всех $k = 1, 2, 3, 4$ по i -тому тетраэдру и результат приравнять к нулю.

Приведем основные формулы, которые необходимы при интегрировании. Ввиду того, что существуют трудности в определении пределов интегрирования по тетраэдру и по его граням в глобальных декартовых координатах (x, y, z) необходимо перейти к интегрированию в локальных барицентрических координатах $(L_i^1, L_i^2, L_i^3, L_i^4)$ (7) с простыми пределами интегрирования. При этом подынтегральная функция умножается на соответствующий множитель, зависящий от выбранных координат, который называется якобианом. В трехмерном случае имеем:

$$dV = dx dy dz = \frac{\partial(1, x, y, z)}{\partial(L_i^1, L_i^2, L_i^3, L_i^4)} dudvdw,$$

где якобиан равен ориентированному объему тетраэдра, умноженному на 6:

$$\frac{\partial(1, x, y, z)}{\partial(L_i^1, L_i^2, L_i^3, L_i^4)} = \frac{\begin{vmatrix} \frac{\partial 1}{\partial L_i^1} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^2} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^3} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^4} \\ \frac{\partial x}{\partial L_i^1} & \frac{\partial x}{\partial L_i^2} & \frac{\partial x}{\partial L_i^3} & \frac{\partial x}{\partial L_i^4} \\ \frac{\partial y}{\partial L_i^1} & \frac{\partial y}{\partial L_i^2} & \frac{\partial y}{\partial L_i^3} & \frac{\partial y}{\partial L_i^4} \\ \frac{\partial z}{\partial L_i^1} & \frac{\partial z}{\partial L_i^2} & \frac{\partial z}{\partial L_i^3} & \frac{\partial z}{\partial L_i^4} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{vmatrix}} = 6V_1.$$

Интегрирование в локальных переменных по «главному» тетраэдру осуществляется с конечными пределами интегрирования, например:

$$\begin{aligned}
\int_V L_i^1 dx dy dz &= 6V_1 \int_0^1 \int_0^{1-u} \int_0^{1-u-v} u du dv dw = \frac{V_1}{4} \\
\int_V L_i^1 L_i^1 dx dy dz &= 6V_1 \int_0^1 \int_0^{1-u} \int_0^{1-u-v} u^2 du dv dw = \frac{V_1}{10} \\
\int_V L_i^1 L_i^2 dx dy dz &= 6V_1 \int_0^1 \int_0^{1-u} \int_0^{1-u-v} uv du dv dw = \frac{V_1}{20}.
\end{aligned} \tag{15}$$

В двумерном случае интегрирование производится по грани тетраэдра, у которой одна из координат не меняется. Например, при интегрировании по объему тетраэдра с весом $L_i^1(x, y, z)$ слагаемых невязки (14), описывающих разрыв решения в вершине 1 на поверхности $S^{(2)}$ грани 2 имеем:

$$\begin{aligned}
&\gamma_2 (\Psi_{m,i}^1 - \Psi_{\mathbf{B}^{(2)}}^{1(2)}) \iiint_V L_i^1 L_i^1 [\mu_m \delta(x - \tilde{x}_2) + \eta_m \delta(y - \tilde{y}_2) + \xi_m \delta(z - \tilde{z}_2)] dx dy dz = \\
&= \gamma_2 (\Psi_{m,i}^1 - \Psi_{\mathbf{B}^{(2)}}^{1(2)}) \iint_{S^{(2)}} L_i^1 L_i^1 \vec{\Omega}_m \cdot d\vec{s},
\end{aligned} \tag{16}$$

где $d\vec{s}$ - вектор площадки элементарной треугольной площадки на поверхности грани 2, направленный наружу по отношению к тетраэдру и перпендикулярно к грани 2. Площади проекций этой площадки на координатные плоскости Y-Z, Z-X и X-Y равны площадям элементарных треугольных площадок $ds_{yz}^{(2)}$, $ds_{zx}^{(2)}$ и $ds_{xy}^{(2)}$, соответственно. С учетом определения скалярного произведения векторов $\vec{\Omega}_m$ и $d\vec{s}$ поверхностный интеграл второго рода по грани 2 записывается следующим образом:

$$\iint_{S^{(2)}} L_i^1 L_i^1 \vec{\Omega}_m \cdot d\vec{s} = \mu_m \iint_{S_{y,z}^{(2)}} L_i^1 L_i^1 dy dz + \eta_m \iint_{S_{z,x}^{(2)}} L_i^1 L_i^1 dz dx + \xi_m \iint_{S_{x,y}^{(2)}} L_i^1 L_i^1 dx dy, \tag{17}$$

где $S_{y,z}^{(2)}$, $S_{z,x}^{(2)}$ и $S_{x,y}^{(2)}$ - проекции поверхности грани 2 на координатные плоскости Y-Z, Z-X и X-Y, соответственно.

Вычислим якобиан перехода в локальную систему координат, соответствующий первому интегралу:

$$dy dz = \frac{\partial(1, y, z)}{\partial(L_i^1, L_i^3, L_i^4)} dv dw.$$

Имеем:

$$\frac{\partial(1, y, z)}{\partial(L_i^1, L_i^3, L_i^4)} = \frac{\begin{vmatrix} \frac{\partial 1}{\partial L_i^1} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^3} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^4} \\ \frac{\partial y}{\partial L_i^1} & \frac{\partial y}{\partial L_i^3} & \frac{\partial y}{\partial L_i^4} \\ \frac{\partial z}{\partial L_i^1} & \frac{\partial z}{\partial L_i^3} & \frac{\partial z}{\partial L_i^4} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{\partial 1}{\partial L_i^1} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^3} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^4} \\ y_1 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_3 & z_4 \end{vmatrix}} = -b_2,$$

где якобиан равен удвоенной ориентированной площади треугольника с вершинами (y_1, z_1) , (y_3, z_3) и (y_4, z_4) . Для второго интеграла правой части (17) имеем:

$$dz dx = \frac{\partial(1, z, x)}{\partial(L_i^1, L_i^3, L_i^4)} dw du = \frac{\begin{vmatrix} \frac{\partial 1}{\partial L_i^1} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^3} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^4} \\ z_1 & z_3 & z_4 \\ x_1 & x_3 & x_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{\partial 1}{\partial L_i^1} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^3} & \frac{\partial 1}{\partial L_i^4} \\ y_1 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_3 & z_4 \end{vmatrix}} dw du = -c_2 dw du,$$

где якобиан равен удвоенной ориентированной площади треугольника с вершинами (x_1, z_1) , (x_3, z_3) , (x_4, z_4) . Приведем для полноты формулы для третьего интеграла в правой части (17):

$$dxdy = \frac{\partial(1, x, y)}{\partial(L_i^1, L_i^3, L_i^4)} dudv = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_3 & y_4 \end{vmatrix} dudv = -d_2 dudv,$$

где якобиан равен удвоенной ориентированной площади треугольника с вершинами $(x_1, y_1), (x_3, y_3), (x_4, y_4)$. Вектор $(-b_2, -c_2, -d_2)$ является внутренней нормалью к грани 2.

Вместо (16) для рассматриваемого слагаемого уравнения системы МКЭ с весом $L_i^1(x, y, z)$ имеем:

$$\begin{aligned} & \gamma_2 (\Psi_{m,i}^1 - \Psi_{\mathbf{B}}^{1(2)}{}_{m,i}) \iiint_V L_i^1 L_i^1 [\mu_m \delta(x - \tilde{x}_2) + \eta_m \delta(y - \tilde{y}_2) + \xi_m \delta(z - \tilde{z}_2)] dxdydz = \\ & = -\gamma_2 (\Psi_{m,i}^1 - \Psi_{\mathbf{B}}^{1(2)}{}_{m,i}) \cdot \\ & \cdot \{ \mu_m b_2 \iint_{S_{v,w}^{(2)}} (1-v-w)^2 dvdw + \eta_m c_2 \iint_{S_{u,w}^{(2)}} (1-u-w)^2 dudw + \xi_m d_2 \iint_{S_{u,v}^{(2)}} (1-u-v)^2 dudv \}, \end{aligned}$$

где интегрирование выполняется по проекциям поверхности граней «главного» тетраэдра на координатные плоскости OVW, OUW и OUV, соответственно.

Двумерные интегралы в локальных координатах вычисляются с конечными пределами интегрирования:

$$\begin{aligned} \iint_{S_{v,w}^{(2)}} (1-v-w)^2 dvdw &= \int_0^{1-v} \int_0^{1-v} (1-v-w)^2 dvdw = \frac{1}{12} \\ \iint_{S_{u,w}^{(2)}} (1-u-w)^2 dudw &= \int_0^{1-u} \int_0^{1-u} (1-u-w)^2 dudw = \frac{1}{12} \\ \iint_{S_{u,v}^{(2)}} (1-u-v)^2 dudv &= \int_0^{1-u} \int_0^{1-u} (1-u-v)^2 dudv = \frac{1}{12}. \end{aligned} \quad (18)$$

Используя аналитические формулы (15) и (18), можно записать уравнение МКЭ, полученное с весом L_i^1 .

Приведем окончательный вид системы линейных уравнений МКЭ, в которой объем i -того тетраэдра V вычисляется по формуле (4):

$$\begin{aligned}
& -[A_{m,i}^{(1)} + 2(\gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})]\Psi_{m,i}^1 - (A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^2 - \\
& -(\gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^3 - (\gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^4 + \\
& + \Sigma_i (2\Psi_{m,i}^1 + \Psi_{m,i}^2 + \Psi_{m,i}^3 + \Psi_{m,i}^4) \frac{V}{5} = \\
& = (2q_{m,i}^1 + q_{m,i}^2 + q_{m,i}^3 + q_{m,i}^4) \frac{V}{5} - \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} (2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)}) - \\
& - \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} (2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)}) - \gamma_4 A_{m,i}^{(4)} (2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)}); \\
& - (A_{m,i}^{(1)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^1 - [A_{m,i}^{(2)} + 2(\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})]\Psi_{m,i}^2 - \\
& - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + A_{m,i}^{(3)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^3 - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} + A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^4 + \\
& + \Sigma_i (\Psi_{m,i}^1 + 2\Psi_{m,i}^2 + \Psi_{m,i}^4) \frac{V}{5} = \\
& = (q_{m,i}^1 + 2q_{m,i}^2 + q_{m,i}^3 + q_{m,i}^4) \frac{V}{5} - \gamma_1 A_{m,i}^{(1)} (2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)}) - \\
& - \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)}) - \gamma_4 A_{m,i}^{(4)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)}); \\
& - (A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^1 - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + A_{m,i}^{(2)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^2 - \\
& - [A_{m,i}^{(3)} + 2(\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_4 A_{m,i}^{(4)})]\Psi_{m,i}^3 - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + A_{m,i}^{(4)})\Psi_{m,i}^4 + \\
& + \Sigma_i (\Psi_{m,i}^1 + \Psi_{m,i}^2 + 2\Psi_{m,i}^3 + \Psi_{m,i}^4) \frac{V}{5} = \\
& = (q_{m,i}^1 + q_{m,i}^2 + 2q_{m,i}^3 + q_{m,i}^4) \frac{V}{5} - \gamma_1 A_{m,i}^{(1)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)}) - \\
& - \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)}) - \gamma_4 A_{m,i}^{(4)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(4)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(4)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(4)}); \\
& - (A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)})\Psi_{m,i}^1 - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)})\Psi_{m,i}^2 - \\
& - (\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + A_{m,i}^{(3)})\Psi_{m,i}^3 - [A_{m,i}^{(4)} + 2(\gamma_1 A_{m,i}^{(1)} + \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} + \gamma_3 A_{m,i}^{(3)})]\Psi_{m,i}^4 + \\
& + \Sigma_i (\Psi_{m,i}^1 + \Psi_{m,i}^2 + \Psi_{m,i}^3 + 2\Psi_{m,i}^4) \frac{V}{5} = \\
& = (q_{m,i}^1 + q_{m,i}^2 + q_{m,i}^3 + 2q_{m,i}^4) \frac{V}{5} - \gamma_1 A_{m,i}^{(1)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(1)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(1)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(1)}) - \\
& - \gamma_2 A_{m,i}^{(2)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(2)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{3(2)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(2)}) - \gamma_3 A_{m,i}^{(3)} (\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{1(3)} + \Psi_{\mathbf{B} m,i}^{2(3)} + 2\Psi_{\mathbf{B} m,i}^{4(3)}).
\end{aligned} \tag{19}$$

В системе (19) используются величины $A_{m,i}^{(j)}$, которые определяются по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
A_{m,i}^{(1)} &= \frac{1}{3}(\bar{\Omega}_m, \bar{n}_{1,i}) = -\frac{1}{6}(\mu_m b_1 + \eta_m c_1 + \xi_m d_1), \\
A_{m,i}^{(2)} &= \frac{1}{3}(\bar{\Omega}_m, \bar{n}_{2,i}) = \frac{1}{6}(\mu_m b_2 + \eta_m c_2 + \xi_m d_2), \\
A_{m,i}^{(3)} &= \frac{1}{3}(\bar{\Omega}_m, \bar{n}_{3,i}) = -\frac{1}{6}(\mu_m b_3 + \eta_m c_3 + \xi_m d_3), \\
A_{m,i}^{(4)} &= \frac{1}{3}(\bar{\Omega}_m, \bar{n}_{4,i}) = \frac{1}{6}(\mu_m b_4 + \eta_m c_4 + \xi_m d_4),
\end{aligned} \tag{20}$$

где $\bar{n}_{j,i}$ - внешняя нормаль к j -той грани i -го тетраэдра. Компонентами вектора нормали являются ориентированные площади проекций j -той грани на координатные плоскости:

$$\bar{n}_{1,i} = \frac{1}{2}(-b_1, -c_1, -d_1), \bar{n}_{2,i} = \frac{1}{2}(b_2, c_2, d_2), \bar{n}_{3,i} = \frac{1}{2}(-b_3, -c_3, -d_3), \bar{n}_{4,i} = \frac{1}{2}(b_4, c_4, d_4).$$

Смысл величин $A_{m,i}^{(j)}$ вытекает из определения скалярного произведения векторов (20): если $A_{m,i}^{(j)} > 0$, то частицы, летящие в направлении $\vec{\Omega}_m$, выходят из i -го тетраэдра через грань j , если $A_{m,i}^{(j)} < 0$, то частицы, летящие в направлении $\vec{\Omega}_m$, входят в i -тый тетраэдр через грань j .

Система линейных уравнений (19) справедлива для всех случаев освещенности тетраэдра. Для ее решения используется прямой метод Гаусса-Жордана [13].

После того, как для всех направлений m вычислены значения $\Psi_{m,i}^k$ - плотности потока в вершинах i -го тетраэдра, необходимо вычислить угловые моменты плотности потока в его вершинах, если правая часть уравнения переноса (3) $Q_m(x, y, z)$ содержит источники, зависящие от решения. Средние значения Ψ_i^k плотности потока в вершинах i -го тетраэдра:

$$\Psi_i^k = \sum_{m=1}^M \Psi_{m,i}^k \omega_m$$

служат для получения решения уравнения переноса (1) в i -том тетраэдре:

$$\Psi_i = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 \Psi_i^k.$$

4 Алгоритм решения на неструктурированной тетраэдральной сетке

При решении уравнения переноса (3) на сетке, состоящей из произвольных тетраэдров, необходимо задать массивы координат узлов сетки $X(n)$, $Y(n)$ и $Z(n)$ для $n = 1, \dots, N_{nod}$, где N_{nod} - полное число узлов. Кроме того, необходимо пронумеровать тетраэдры сетки $i = 1, \dots, N_{elm}$ внутри расчетной области и присвоить номера тем «тетраэдрам», которые расположены за границей расчетной области и примыкают к внешним граням сетки. Их нумерация начинается с номера $N_{elm} + 1$ и заканчивается номером $N_{elm} + N_B$, где N_B - общее число граней на внешней границе области расчета.

Для тетраэдров сетки формируется двумерный целый массив, в котором каждому тетраэдру соответствует строка из 12-ти элементов с описанием всей геометрической информации о тетраэдре и его соседях. Первые четыре элемента содержат номера узлов вершин тетраэдра в соответствии с порядком их нумерации, как показано на рис. 1. В последующих четырех элементах задаются номера тетраэдров, примыкающих к его граням, в порядке нумерации граней. Остальные четыре элемента предназначены для задания граничных условий на каждой грани признаками от 0 до 8. Эти признаки так же располагаются в порядке нумерации граней. Значение 0 означает, что соответствующая грань тетраэдра находится на границе с заданным значением входящего потока, либо внутри пространственной области. Положительное значение означает, что на соответствующей грани может быть задано условие симметрии (отражения). Значение 1 соответствует левой боковой грани, которая принадлежит плоскости OYZ. Значение 2 соответствует передней боковой грани, которая принадлежит плоскости OXZ. Значение 3 или 7 означает, что это нижняя грань, которая принадлежит плоскости OXY. Значение 6 или 8 означает, что это верхняя грань, которая параллельна плоскости OXY. Значения 4 и 5 соответствуют правой и задней боковым граням и пока не задействованы. Для того чтобы сэкономить оперативную память, в последние четыре элемента записывается со знаком «минус» вспомогательная информация, связанная с гранями тетраэдра, расположенными внутри пространственной области. Модуль этого числа 1 до 4 является номером вершины, которая расположена напротив данной грани в примыкающем тетраэдре, если он не совпадает с номером грани в данном тетраэдре.

Поясним на конкретном примере. Пусть, например, для i -го тетраэдра задается строка из 12 чисел:

$$\underbrace{1, 2, 8, 78}_{\text{номера узлов тетраэдра}}, \underbrace{3, 1801, 1802, 1803}_{\text{номера смежных тетраэдров}}, \underbrace{-4, 1, 2, 3}_{\text{признаки граней тетраэдра}}.$$

Это означает, что вершина с номером 1 имеет координаты $x(1), y(1), z(1)$, вершина с номером 2 имеет координаты $x(2), y(2), z(2)$, вершина с номером 3 имеет координаты $x(8), y(8), z(8)$ и вершина с номером 4 имеет координаты $x(78), y(78), z(78)$. К грани с номером 1 примыкает тетраэдр с номером 3, к грани с номером 2 примыкает тетраэдр с номером 1801, к грани с номером 3 примыкает тетраэдр с номером 1802 и к грани с номером 4 примыкает тетраэдр с номером 1803. Так как признак, соответствующий первой грани отрицательный (-4), то грань с номером 1 – внутренняя, и в примыкающем тетраэдре с номером 3 противоположная вершина имеет номер 4. Эта грань также имеет номер 4 в тетраэдре с номером 3. Грань с номером 2 – внешняя, и на ней задано граничное условие симметрии на левой границе пространственной области. Грань с номером 3 – внешняя, и на ней задано граничное условие симметрии на передней границе. Грань с номером 4 – внешняя, на ней задано граничное условие симметрии на нижней границе пространственной области. Заданной геометрической информации достаточно для правильного учета входных и выходных значений потока при решении системы уравнений (19) в этом тетраэдре.

Алгоритм решения уравнения переноса на тетраэдральной сетке заключается в следующем. Перед началом расчета, используя координаты узлов, для i -го тетраэдра вычисляются: объем V_i по формуле (4), коэффициенты на гранях $b_i^{(j)}, c_i^{(j)}, d_i^{(j)}$, $j=1,2,3,4$ по формулам (9) и (10), и для всех направлений $\bar{\Omega}_m$ величины $A_{m,i}^{(j)}$ по формулам (20). Затем вычисляются параметры $\gamma_{m,i}^{(j)}$, равные нулю, если поток выходит из ячейки через j -ю грань, и единице, если входит в нее через j -ю грань. Кроме того, перед началом расчета для каждого направления $\bar{\Omega}_m$ из квадратурного набора ($m=1,2,\dots,M$) формируется массив $NORD(i)$, $i=1,\dots,N_{elm}$ номеров тетраэдров в том порядке, в котором они должны рассчитываться, т.е. должна решаться система линейных уравнений (19), в соответствии с освещенностью каждого тетраэдра. При этом образуется один из 14-ти вариантов системы (19) в зависимости от значений признаков $\gamma_{m,i}^{(1)}, \gamma_{m,i}^{(2)}, \gamma_{m,i}^{(3)}$ и $\gamma_{m,i}^{(4)}$ освещенности граней.

Численные эксперименты показали, что описанный выше линейный метод конечных элементов с аппроксимацией по Галеркину позволяет получать решение на неструктурированных тетраэдральных сетках с высокой степенью точности.

5 Результаты тестовых расчетов

Приведем результаты расчетов описанным выше методом на неструктурированной тетраэдральной сетке двух односторонних задач [8] с изотропным источником. Первая задача предназначена для проверки точности расчета пространственного распределения потока в трехмерной защитной композиции, которая имеет внутри изогнутый пустотный канал, расположенный в области с полным поглощением частиц. Точное решение этой задачи получено [8] путем численного интегрирования в точках, где велико влияние лучевого эффекта. Вторая задача имеет аналогичную геометрию расчетной области, в которой полностью поглощающее вещество заменено веществом с сечением рассеяния равным половине величины полного сечения взаимодействия. Ее решение получено методом Монте-Карло [8].

Защитная композиция состоит из двух областей с веществом и пустотным каналом. Изотропный источник расположен в области с веществом. Пустотный канал изогнут так, чтобы препятствовать прохождению излучения от источника. Геометрия и размеры представлены на рис. 4. Граничные условия отражения задаются на координатных плоскостях $x=0$, $y=0$ и $z=0$. На внешней границе области заданы вакуумные граничные условия.

Решение обеих задач приводится в центрах ячеек равномерной пространственной сетки, заданной с шагом $h=10$ см в подобластях расчетной области, в которых проявляется лучевой эффект. Это три основные подобласти: А) точки расположены параллельно оси Y при $x=5$ см и $z=5$ см; В) точки расположены параллельно оси X при $y=55$ см и $z=5$ см; С) точки расположены параллельно оси X при $y=95$ см и $z=35$ см.

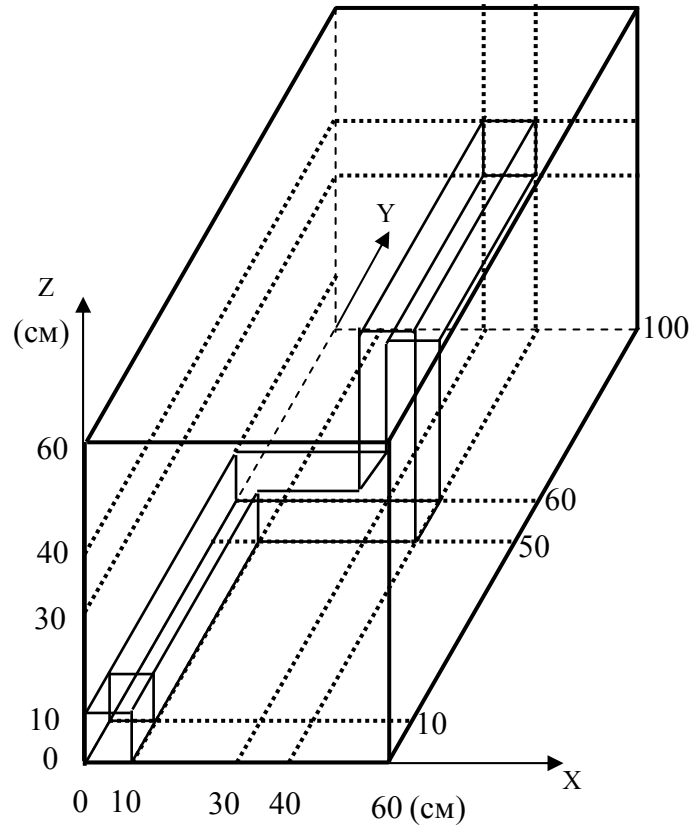


Рис. 4. Геометрия задачи защиты с пустотным каналом.

В табл. 1 приведены значения макросечений для двух задач и источника Q , расположенного в левом нижнем углу расчетной области.

Таблица 1. Макросечения

Зоны	Q (н см ⁻³ с ⁻¹)	Σ_T (см ⁻¹)	Задача 1 $\Sigma_{s,0}$ (см ⁻¹)	Задача 2 $\Sigma_{s,0}$ (см ⁻¹)
1	1.	0.1	0.	0.05
2	0.	10 ⁻⁴	0.	0.5 × 10 ⁻⁴
3	0.	0.1	0.	0.05

Для численного решения обеих задач методом конечных элементов задана неструктурированная тетраэдральная сетка, состоящая из 225000 тетраэдров. Ее узлы совпадают с узлами равномерной кубической сетки, построенной с шагом $h = 2$ см. Кубическая сетка задается так, чтобы соблюдалось условие неизменности свойств среды внутри каждого куба. Известно, что куб можно разбить на пять тетраэдров, причем центральный тетраэдр имеет объем в два раза больший, чем остальные 4 тетраэдра, окружающие его. На рис. 5 показаны два способа разбиения куба на 5 тетраэдров. С помощью таких кубов строится неструктурированная тетраэдральная сетка путем их расстановки в шахматном порядке. Средняя аппроксимационная характеристика такой сетки равна 0.7 [14], т.е. близка к идеальному случаю 1 для сетки, состоящей из правильных тетраэдров. Среднее значение потока в «центральном тетраэдре» кубической ячейки принималось за решение в заданных точках, т.к. центр этого тетраэдра совпадает с центром кубической ячейки.

Вычисления проводились с использованием однопроцессорной версии модуля МКЕ3D программы ODETTA. Использовались два набора угловых квадратур с максимально возможным порядком n : квадратура Карлсона с равными весами ES_{72} , имеющая полное число направлений $M = 5328$, и квадратура Чебышева-Лежандра CL_{50} с меньшим числом направлений $M = 5000$. Итерационный процесс заканчивался, когда

максимальная относительная ошибка в средних потоках между двумя соседними итерациями не превышала $\varepsilon = 10^{-6}$.

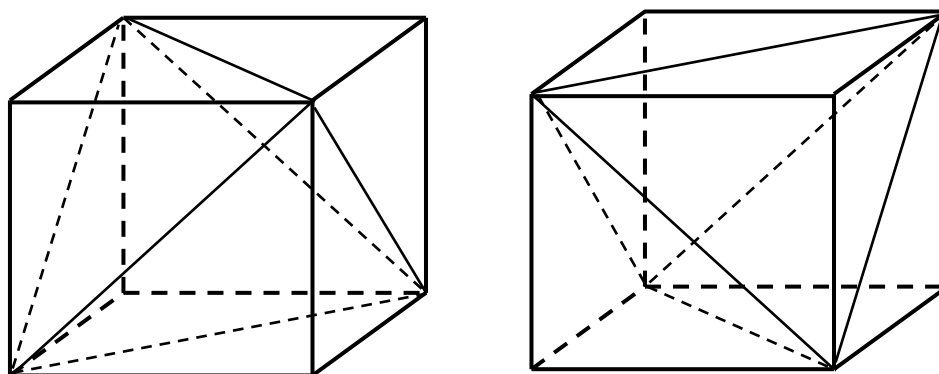


Рис. 5. Разбиение куба на пять тетраэдров двумя способами

Значения потоков для вариантов А, В и С и точное решение задачи 1 приведены в табл. 2 и показаны на рис. 6, 7 и 8. Кроме того, в табл. 2 приведены в процентном выражении относительные отклонения МКЭ от табличных значений «точного решения» в соответствующих точках i :

$$\varepsilon_i^{rel} = (\Psi_i^{MKE} - \Psi_i^{TBL}) / \Psi_i^{TBL} \cdot 100\%,$$

где через Ψ_i^{TBL} обозначено табличное значение решения в точке i .

Таблица 2. Значения средних потоков Ψ_i задачи 1

Случай	(x,y,z) (см)	Аналитический метод ($см^{-2} c^{-1}$)	МКЭ ($см^{-2} c^{-1}$)		Отклонение ε_i^{rel} (%)	
			ES_{72}	CL_{50}	ES_{72}	CL_{50}
А	(5, 5, 5)	5.95659×10^{-0}	5.94197×10^{-0}	5.94199×10^{-0}	-0.24	-0.24
	(5, 15, 5)	1.37185×10^{-0}	1.37626×10^{-0}	1.37627×10^{-0}	0.32	0.32
	(5, 25, 5)	5.00871×10^{-1}	5.00796×10^{-1}	5.00678×10^{-1}	-0.01	-0.03
	(5, 35, 5)	2.52429×10^{-1}	2.51993×10^{-1}	2.51753×10^{-1}	-0.17	-0.26
	(5, 45, 5)	1.50260×10^{-1}	1.50061×10^{-1}	1.49500×10^{-1}	-0.13	-0.50
	(5, 55, 5)	9.91726×10^{-2}	9.87777×10^{-2}	9.79989×10^{-2}	-0.39	-1.18
	(5, 65, 5)	4.22623×10^{-2}	4.19551×10^{-2}	4.16284×10^{-2}	-0.72	-1.49
	(5, 75, 5)	1.14703×10^{-2}	1.13431×10^{-2}	1.14823×10^{-2}	-1.10	0.10
	(5, 85, 5)	3.24662×10^{-3}	3.22429×10^{-3}	3.42724×10^{-3}	-0.68	5.56
В	(5, 95, 5)	9.48324×10^{-4}	9.61792×10^{-4}	1.03245×10^{-3}	1.42	8.87
	(5, 55, 5)	9.91726×10^{-2}	9.87777×10^{-2}	9.79989×10^{-2}	-0.39	-1.18
	(15, 55, 5)	2.45041×10^{-2}	2.45826×10^{-2}	2.45173×10^{-2}	0.32	0.05
	(25, 55, 5)	4.54477×10^{-3}	4.52264×10^{-3}	4.49896×10^{-3}	-0.48	-1.00
	(35, 55, 5)	1.42960×10^{-3}	1.41969×10^{-3}	1.40139×10^{-3}	-0.69	-1.97
	(45, 55, 5)	2.64846×10^{-4}	2.66089×10^{-4}	2.66348×10^{-4}	0.46	0.56
С	(55, 55, 5)	9.14210×10^{-5}	9.01639×10^{-5}	9.08081×10^{-5}	-1.37	-0.67
	(5, 95, 35)	3.27058×10^{-5}	3.35830×10^{-5}	3.49321×10^{-5}	2.68	6.80
	(15, 95, 35)	2.68415×10^{-5}	2.72373×10^{-5}	2.69204×10^{-5}	1.47	0.29
	(25, 95, 35)	1.70019×10^{-5}	1.69874×10^{-5}	1.67010×10^{-5}	0.08	-1.76
	(35, 95, 35)	3.37981×10^{-5}	3.22000×10^{-5}	3.27135×10^{-5}	-4.72	-3.20
	(45, 95, 35)	6.04893×10^{-6}	6.22586×10^{-6}	6.36226×10^{-6}	2.92	5.17
(55, 95, 35)	3.36460×10^{-6}	3.36027×10^{-6}	3.26570×10^{-6}	-0.12	-2.93	

Из табл. 2 видно, что численное решение задачи 1, полученное с использованием обеих квадратур, совпадает с точным решением по порядку величины и в первом знаке. Исключение составляет точка (5,95,5), расположенная в левом нижнем углу расчетной области, где относительное отклонение составляет 8.87% при расчете с квадратурой CL_{50} . Имеются и другие точки, в которых отклонение больше 1%, например, (5,85,5), (5,95,35) и (45,95,35).

Это связано с лучевым эффектом, который возникает при использовании грубой сетки по угловым направлениям. Точность численного решения задачи 1 в чисто поглощающей среде зависит от количества направлений, для которых решается уравнение переноса. Частица, вылетающая из точки (x_1, y_1, z_1) в направлении $\vec{\Omega}_m = (\mu_m, \eta_m, \xi_m)$, летит вдоль характеристики уравнения переноса по прямой, заданной в параметрическом виде:

$$x = x_1 + \mu_m \cdot \tau, \quad y = y_1 + \eta_m \cdot \tau, \quad z = z_1 + \xi_m \cdot \tau.$$

В рассматриваемой задаче частицы, попадающие в тетраэдр с центром в точке $(5, 95, 5)$ и с координатами $4 \leq x \leq 6$, $94 \leq y \leq 96$, $4 \leq z \leq 6$, вылетают из источника в направлении с положительными направляющими косинусами. Можно убедиться в том, что в квадратурном наборе CL_{50} имеется только одно направление $\vec{\Omega}_m = (\mu_{\min}, \eta_{\max}, \xi_{\min})$, $\mu_{\min} = 0.031396$, $\eta_{\max} = 0.99902$, $\xi_{\min} = 0.031098$ (с весом $\omega_m = 0.00031088$), по которому можно попасть в этот тетраэдр, например, из точки $(2.33, 10, 2.35)$, расположенной на поверхности источника. Для сравнения в квадратурном наборе ES_{72} имеются два таких направления (с весом $\omega_m = 0.00018769$): $\vec{\Omega}_1 = (\mu_{\min}, \eta_{\max}, \xi_{\min})$, $\mu_{\min} = 0.021676$, $\eta_{\max} = 0.99940$, $\xi_{\min} = 0.027027$ и $\vec{\Omega}_2 = (\mu_2, \eta_2, \xi_{\min})$, $\mu_2 = 0.065256$, $\eta_2 = 0.99750$. Поэтому расчет с использованием квадратуры ES_{72} точнее.

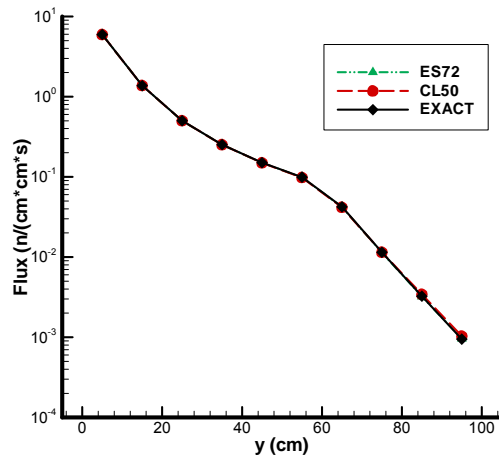


Рис. 6. Средний поток частиц и точное решение задачи 1 для случая A

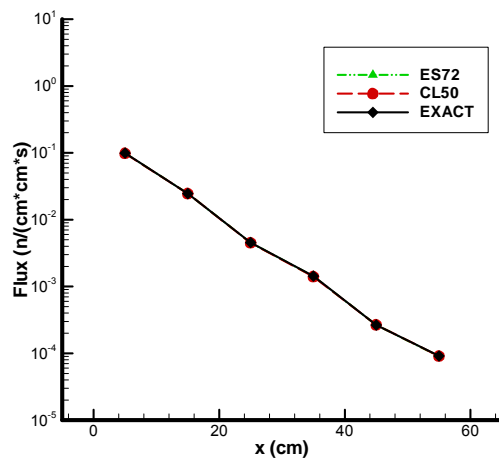


Рис. 7. Средний поток частиц и точное решение задачи 1 для случая B

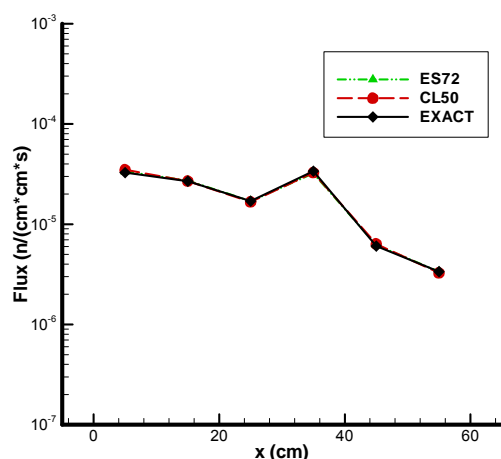


Рис. 8. Средний поток частиц и точное решение задачи 1 для случая C

Заметим, что для обеих квадратур в точках (5,55,5), (35,55,5) и (35,95,35), расположенных на концах пустотного канала, МКЭ дает пониженные средние значения плотности потока по сравнению с точным решением. В поглощающей среде эти значения как больше, так и меньше точного решения.

На рис. 6 заметно, что численное решение, полученное с использованием ES_{72} квадратуры с большим числом направлений, ближе к точному решению, чем решение, полученное с использованием CL_{50} квадратуры. На рис. 7-8 средние значения плотности потока практически совпадают с точным решением.

Значения средних потоков задачи 2, рассчитанные методом конечных элементов и методом Монте-Карло [8], для вариантов А, В и С и относительные отклонения МКЭ от этого «опорного решения» в соответствующих точках приведены в табл. 3 и показаны на рис. 9, 10 и 11.

Таблица 3. Значения средних потоков ψ_i задачи 2

Случай	(x,y,z) (см)	Метод Монте-Карло ($см^{-2} с^{-1}$)	МКЭ ($см^{-2} с^{-1}$)		Отклонение ϵ_i^{rel} (%)	
			ES_{72}	CL_{50}	ES_{72}	CL_{50}
А	(5, 5,5)	8.61578×10^{-0}	8.59227×10^{-0}	8.59227×10^{-0}	-0.27	-0.27
	(5,15,5)	2.16130×10^{-0}	2.16707×10^{-0}	2.16707×10^{-0}	0.26	0.26
	(5,25,5)	8.93784×10^{-1}	8.93756×10^{-1}	8.93756×10^{-1}	-0.00	-0.01
	(5,35,5)	4.78052×10^{-1}	4.77487×10^{-1}	4.77487×10^{-1}	-0.11	-0.17
	(5,45,5)	2.89424×10^{-1}	2.89190×10^{-1}	2.89190×10^{-1}	-0.08	-0.29
	(5,55,5)	1.92698×10^{-1}	1.92243×10^{-1}	1.92243×10^{-1}	-0.23	-0.70
	(5,65,5)	1.04982×10^{-1}	1.04646×10^{-1}	1.04646×10^{-1}	-0.32	-0.75
	(5,75,5)	3.37544×10^{-2}	3.35965×10^{-2}	3.35965×10^{-2}	-0.46	-0.11
	(5,85,5)	1.08158×10^{-2}	1.07654×10^{-2}	1.07654×10^{-2}	-0.46	1.57
(5,95,5)	3.39632×10^{-3}	3.41182×10^{-3}	3.41182×10^{-3}	0.45	2.84	
В	(5,55,5)	1.92698×10^{-1}	1.92243×10^{-1}	1.92243×10^{-1}	-0.23	-0.70
	(15,55,5)	6.72147×10^{-2}	6.73657×10^{-2}	6.73657×10^{-2}	0.22	0.10
	(25,55,5)	2.21799×10^{-2}	2.21557×10^{-2}	2.21557×10^{-2}	-0.10	-0.22
	(35,55,5)	9.90646×10^{-3}	9.89238×10^{-3}	9.89238×10^{-3}	-0.14	-0.30
	(45,55,5)	3.39066×10^{-3}	3.39410×10^{-3}	3.39410×10^{-3}	0.10	0.18
	(55,55,5)	1.05629×10^{-3}	1.05820×10^{-3}	1.05820×10^{-3}	0.18	0.20
С	(5,95,35)	3.44804×10^{-4}	3.47844×10^{-4}	3.47844×10^{-4}	0.88	1.28
	(15,95,35)	2.91825×10^{-4}	2.90547×10^{-4}	2.90547×10^{-4}	-0.43	-0.60
	(25,95,35)	2.05793×10^{-4}	2.05773×10^{-4}	2.05773×10^{-4}	-0.00	-0.20
	(35,95,35)	2.62086×10^{-4}	2.59564×10^{-4}	2.59564×10^{-4}	-0.96	-0.76
	(45,95,35)	1.05367×10^{-4}	1.06397×10^{-4}	1.06397×10^{-4}	0.97	1.13
	(55,95,35)	4.44962×10^{-5}	4.45719×10^{-5}	4.45719×10^{-5}	0.17	-0.07

Из табл. 3 видно, что разница между решениями МКЭ и методом Монте-Карло значительно меньше, благодаря наличию рассеяния. Характер поведения относительного отклонения не изменился. На концах

пустотного канала в МКЭ остаются пониженные значения. Результаты расчетов, полученные МКЭ в приближении ES_{72} и методом Монте-Карло, отличаются менее чем на 1%. Численное решение МКЭ с квадратурой CL_{50} - менее точное. Наибольшее относительное отклонение составляет 2.84% в т. (5,95,5).

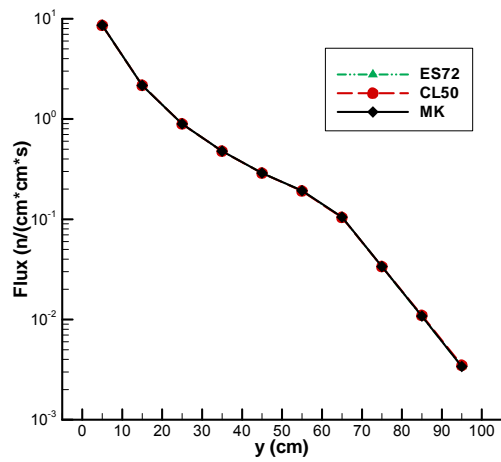


Рис. 9. Средний поток частиц и точное решение задачи 2 для случая A

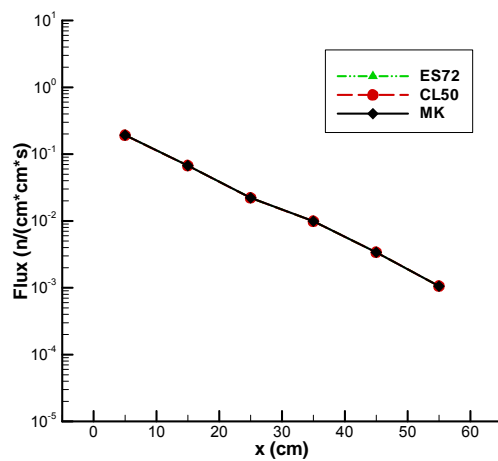


Рис. 10. Средний поток частиц и точное решение задачи 2 для случая B

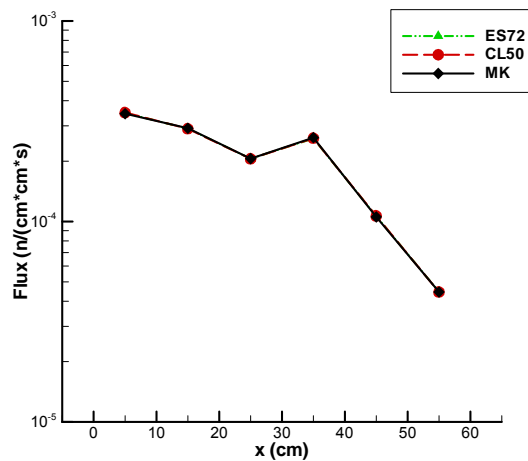


Рис. 11. Средний поток частиц и точное решение задачи 2 для случая C

6 Заключение

Для решения уравнения переноса частиц на неструктурированных тетраэдральных сетках разработан и реализован метод конечных элементов, основанный на линейных базисных функциях с аппроксимацией по Галеркину. Анализ результатов расчета тестовой задачи показал, что МКЭ обладает следующими достоинствами: консервативность, высокий порядок точности, положительность по построению, основанная на разложении решения в ряд по положительным линейным базисным функциям. Дополнительным преимуществом МКЭ является возможность его использования для решения задач защиты быстрых реакторов на неструктурированных тетраэдральных сетках, которые являются адаптивными и экономичными. Получение приемлемого численного решения в областях с большими градиентами потоков достигается разбиением отдельных тетраэдров, расположенных в этих областях, на более мелкие и не приводит к существенному увеличению размеров сетки, как при использовании регулярных прямоугольных сеток.

Список литературы

1. Сычугова Е.П. Решение уравнения переноса методом конечных элементов на неструктурированных треугольных сетках // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2013. № 85. 24 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-85>
2. Сычугова Е.П. Пространственная аппроксимация уравнения переноса на треугольной сетке линейным разрывным методом конечных элементов // Математическое моделирование (в печати).
3. Childs R.L., Rhoades W.A. Theoretical Basis of the Linear Nodal and Linear Characteristic Methods in the TORT Computer Code // ORNL/tm-12246, Oak Ridge National Laboratory, (January 1993).
4. McGhee J.M., Wareing T.A., Barnett D.A. Attila User's Manual. Transpire Inc., 15 January 2007.
5. Discontinuous Finite Element S_N Methods on Three-Dimensional Unstructured Grids. Wareing Todd A. и др. // J. Nucl. Sci. Eng., 2001, V. 138, P. 256-268.
6. Morel Jim E., Warsa James S. An S_n Spatial Discretization Scheme for Tetrahedral Meshes // J. Nucl. Sci. Eng., 2005, V. 151, P. 157-166.
7. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. The Finite Element Method, 4th ed., Vol. 1, McGraw-Hill, London (1994).
8. Takeda T, Ikeda H. 3-D Neutron Transport Benchmarks, Department of Nuclear Engineering Osaka University, Japan, NEACRP L-330, March 1991.
9. «Вычислительные методы в физике реакторов» // Сб. статей под ред. Х. Гринспена, К. Келбера, Д. Окренга. Москва: Атомиздат, 1972.
10. Carlson B.G. A Method of Characteristics and Other Improvements in Solution Methods for the Transport Equation // J. Nucl. Sci. Eng., 1976, V. 61, P. 408-425.
11. Walters W.F. Use of the Chebyshev-Legendre quadrature set in discrete-ordinate codes // Los Alamos National Laboratory Report LA-UR-87-3621, 1987.
12. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация // Пер. с англ. М.: Мир, 1986, 318 с.
13. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1989.
14. Галанин М.П., Щеглов И.А. Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: прямые методы // Препринты ИПМ им.М.В. Келдыша. 2006. № 10. 32 с.