

中子迁移方程的守恒差分方法 与特征值问题*

冯康 曾继荣 邵毓华 樊天蔚 (中国科学院计算中心)

CONSERVATIVE DIFFERENCE METHOD FOR NEUTRON TRANSPORT EQUATION AND EIGENVALUE PROBLEM

Feng Kang Zeng Ji-rong Shao Yu-hua Fan Tian-wei
(Computing Center, Academy of Sciences)

Abstract

The Boltzmann equation for neutron transport in configuration space (I) is expressed in an integral form of conservation (II) in suitable phase space. Based on this principle together with cellular subdivision and piece-wise linear approximation a conservative difference scheme is established and is applied to the eigenvalue problem for axisymmetric case. The conservativeness assures the accuracy of the method. For the determination of the principal eigenvalue λ_0 and its corresponding eigenfunction of (III) a method of artificial criticality is suggested, i.e., an artificial eigenvalue $k(\lambda)$ depending on the parameter λ is introduced (IV) and $\lambda = \lambda_0$ is obtained by adjusting λ so that $k(\lambda) = 1$. The numerical computation of the system of difference equations is carried out along the direction of the characteristics, thus gives an advantage in computing simplicity and an enormous saving in storage. This work was done in early 1960's and it seems to be worth while to publish it here since it still contains some novel points even at present.

本文给出数值求解中子迁移 Boltzmann 方程的一种基于积分守恒原理的差分方法, 把它运用于解算轴对称情况的特征值问题; 同时为了求主特征值和相应的特征函数, 给出了一种人为临界的方法. 有关方法的要点如下:

1. 将迁移方程

$$(\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla + \alpha)N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu) = S(\mathbf{r}) \quad (I)$$

连同边界条件

$$N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu) = 0, \text{ 当 } \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} \leq 0, H(\mathbf{r}) = 0 \text{ 时}$$

(其中 $H(\mathbf{r}) = 0$ 是位置空间域的边界方程, \mathbf{n} 为外法线方向) 表为适当的相空间内的积分守恒形式

$$\int_{\partial D} N \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_D \alpha N d\tau = \int_D S d\tau, \quad (II)$$

将相空间的解域剖分为小体积单元, 在每个单元上设 N 为变元的线性函数, 代入上列方

* 1979年11月9日收到.

程, 计算各个体积分及面积分而得到守恒的差分方程. 由于差分方程的守恒性, 保证了总体的精确度.

2. 对于特征值问题

$$\omega \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \omega, \nu) + \left(\alpha + \frac{\lambda}{\nu}\right) N(\mathbf{r}, \omega, \nu) = \int \beta N d\omega, \quad (\text{III})$$

为了定主特征值 $\lambda = \lambda_0$, 先视 λ 为参数, 引进伪特征值 $K(\lambda)$ 而考虑方程

$$\omega \cdot \nabla N + \left(\alpha + \frac{\lambda}{\nu}\right) N = k(\lambda) \int \beta N d\omega. \quad (\text{IV})$$

对于任定的 λ 值, 用迭代法求出 $K(\lambda)$, 然后调整 $\lambda = \lambda_0$, 以便伪特征值达到临界, 即 $k(\lambda_0) = 1$, 于是得所要求的主特征值 λ_0 , 这就是人为临界法. 每次迭代要求解具有给定源项的定常迁移方程.

3. 差分方程的解算过程, 按照特征线方向即中子飞行的方向进行, 因此, 算法简便并可以大大地节约存储量, 所要求的存储量仅与位置空间变量的节点个数同阶而与速度空间的分割无关.

上述工作是六十年代初期在中国科学院计算技术研究所进行的, 当时没有公开发表. 解算方法的主导思想由冯康提出, 格式的推导建立、程序编制和实际验算由曾继荣、邵毓华、樊天蔚完成. 本文稿由曾继荣执笔. 鉴于这个方法是相当有效的先进方法, 并且至今还保持它的若干独特之点, 因此, 我们接受一些同志的建议, 将以前的内部工作报告作了适当删节和整理, 在此发表. 在工作过程中得到崔蕴中同志的热情帮助. 在整理本文稿的过程中, 周毓麟同志、杜明笙同志提出许多宝贵的建议, 给予热情支持, 作者在此表示感谢.

§1. 特征值问题

考虑中子迁移方程

$$\left[\frac{1}{\nu} \frac{\partial}{\partial t} + \omega \cdot \nabla + \alpha \right] N = \int \beta N d\omega + q, \quad (1)$$

其中 $N = N(t, \mathbf{r}, \omega, \nu)$, $q = q(t, \mathbf{r}, \omega, \nu)$, t 是时间, \mathbf{r} 是中子的位置向量, ν 是中子飞行速度, ω 表示中子的飞行方向, $\bar{\mu} = \omega \cdot \omega'$ 表示中子的散射角. $N(t, \mathbf{r}, \omega, \nu)$ 是中子的密度函数, α, β 是截面, $q(t, \mathbf{r}, \omega, \nu)$ 是独立中子源.

设 $q = 0$, 求 (1) 的分离变量形式的解:

$$N(t, \mathbf{r}, \omega, \nu) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\lambda_n t} N_n(\mathbf{r}, \omega, \nu), \quad (2)$$

其中 $N_n(\mathbf{r}, \omega, \nu)$ 满足下列方程:

$$\left[\omega \cdot \nabla + \left(\alpha + \frac{\lambda_n}{\nu}\right) \right] N_n(\mathbf{r}, \omega, \nu) = \int d\omega' \int d\omega'' \beta N_n(\mathbf{r}, \omega, \nu). \quad (3)$$

方程 (3) 与给定的边界条件一起构成求解特征值 λ_n 和相应的特征函数 N_n 的特征值问题. 由物理原则可知, 方程 (3) 有一个大于其他所有特征值的实部的实特征值 λ_0 , 相应的特征函数 N_0 非负, 且当 $t \rightarrow \infty$ 时, 初值问题 (1) 的解有如下的渐近形式:

$$N(t, \mathbf{r}, \omega, \nu) \sim e^{\lambda_0 t} N_0(\mathbf{r}, \omega, \nu).$$

由于 λ_0 通常不是按模最大的特征值, 我们用人工临介法求解. 在 (3) 中视 λ 为参数, 引进

附加特征值 $k(\lambda)$, 方程 (3) 变为

$$\left[\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla + \left(\alpha + \frac{\lambda}{\nu} \right) \right] N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu) = K(\lambda) \int d\nu' \int d\boldsymbol{\omega}' \beta N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}', \nu'). \quad (4)$$

显然, 如果选择 λ 使上式的最小特征值 $K_0(\lambda) = 1$, 则此 λ 就是 (3) 的最大特征值 λ_0 , 并且特征函数为 $N_0(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu)$. 命

$$\bar{N}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d\nu' \int \beta N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}', \nu') d\boldsymbol{\omega}'. \quad (5)$$

对 (4) 用迭代法求解. 记 $\bar{N}(\mathbf{r})$ 的第 m 次迭代值为 $\bar{N}^{(m)}$, $N^{(m)}$ 表示 $N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu)$ 的 m 次迭代值, 则有

$$\left[\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla + \left(\alpha + \frac{\lambda}{\nu} \right) N^{(m+1)} \right] = \bar{N}^{(m)}, \quad (6)$$

$$k^{(m+1)}(\lambda) = \int \bar{N}^{(m)} \cdot \bar{N}^{(m)} d\mathbf{r} / \int \bar{N}^{(m)} \cdot \bar{N}^{m+1} d\mathbf{r}. \quad (7)$$

当 $k^{(m)}(\lambda)$ 收敛到 $k(\lambda)$, 调整 λ 使得 $k_0(\lambda) = 1$, 即得所求的特征值 λ_0 . 注意到在迭代过程中 $N^{(m)}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu)$ 和 $N^{(m+1)}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, \nu)$ 只作为中间结果, 不必保留, 因此, 可以大大节省存储量.

§2. 轴对称迁移方程的守恒型、相空间及边界条件

以下考虑单群轴对称问题, 选取柱坐标系 (r, φ, z) (如图1). 令 $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_\omega$ 分别是 r, φ, z, ω 方向上的单位向量, 记 $\mu = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_\omega, -1 \leq \mu \leq 1$, ϕ 是 \mathbf{e}_r 与 \mathbf{e}_ω 在 xoy 平面上的投影的夹角, 这时速度方向可表为

$$\boldsymbol{\omega} = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi \mathbf{e}_r + \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi \mathbf{e}_\varphi + \mu \mathbf{e}_z,$$

单群轴对称迁移方程为

$$\begin{aligned} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi \frac{\partial N}{\partial r} - \sqrt{1 - \mu^2} \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial N}{\partial \varphi} \\ + \mu \frac{\partial N}{\partial z} + \left(\alpha + \frac{\lambda}{\nu} \right) N = \bar{N}(r, z), \end{aligned} \quad (8)$$

其中总中子流

$$\bar{N}(r, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^\pi \beta N(r, z, \phi', \mu') d\phi' d\mu'.$$

由于对称性, 今后只讨论 $0 \leq \phi \leq \pi$ 的情况.

令轴对称系统 B 的外边界 ∂B 的方程为 $H(r, \varphi, z) = 0$, 选取规范因子, 使向量 $\boldsymbol{\nu} = \left(\frac{\partial H}{\partial r}, \frac{\partial H}{\partial \varphi}, \frac{\partial H}{\partial z} \right)$ 表示 ∂B 的外法线单位向量, 边界条件为

$N(r, \phi, z, \mu) = 0$, 当 $\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\nu} \leq 0, H(r, z) = 0$ 时, 因方程 (8) 中不出现 μ 的偏导数, 故可视 μ 为参数. 考虑三维相空间 (r, ϕ, z) , 取柱坐标系:

$$\begin{cases} x' = r \cos \phi, \\ y' = r \sin \phi, \\ z' = z, \end{cases}$$

引进向量

$$\mathbf{Q} = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \psi \mathbf{e}_r - \sqrt{1 - \mu^2} \sin \psi \mathbf{e}_\phi + \mu \mathbf{e}_z. \quad (9)$$

在相空间中, 迁移方程可写为守恒型:

$$\operatorname{div}(N\mathbf{Q}) + \alpha'N = \bar{N} \quad (10)$$

($\alpha' = \alpha + \lambda/\nu$). 在任意区域 D 上, 对方程 (10) 积分, 利用高斯公式可得

$$\iiint_{\partial D} N\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \iiint_D \alpha'N dv = \iiint_D \bar{N} dv, \quad (11)$$

这里 ∂D 表示区域 D 的外边界, dv 是相空间体积元, $d\sigma$ 是面积元. 由于相空间内所考虑的区域与 B 重合, 故可令 $\mathbf{n} = \left(\frac{\partial H}{\partial r}, \frac{\partial H}{\partial \psi}, \frac{\partial H}{\partial z} \right)$ 表示相空间区域 S 的外边界 ∂S 的外法线向量. 由于相空间的边界条件等价于物理空间的边界条件, 因而有

$$N = 0, \text{ 当 } \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n} \leq 0, H(r, z) = 0 \text{ 时.} \quad (12)$$

上式取等号得到一条曲线

$$\begin{cases} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \psi \frac{\partial H}{\partial r} + \mu \frac{\partial H}{\partial z} = 0, \\ H(r, z) = 0, \end{cases}$$

称之为分界线. 在它的一侧有边界条件 $N = 0$, 另一侧不给条件. 又由于对称性, 在 z 轴上有对称条件

$$N(0, z, \pi - \psi, \mu) = N(0, z, \psi, \mu). \quad (13)$$

以下从守恒方程 (11), (12) 及 (13) 出发, 建立差分方程.

§3. 几何剖分、插值和离散化

首先视速度空间为一单位球面, 球面上每一点表示一个方向. 选取格网线 $\mu_l (l = 1, 2, \dots, n)$, 对每一个小区间 (μ_l, μ_{l+1}) , 选取格网线 $\psi_{l,k}$ 分单位球面为相等的面积块¹⁾, $\mu_l, \psi_{l,k}$ 选取如下:

$$\begin{cases} \mu_1 = -1 + \frac{2}{\frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right)}, \\ \mu_l = \mu_{l-1} + l(1 + \mu_1), & l = 2, 3, \dots, \frac{n}{2} - 1, n \text{ 为偶数} \\ \mu_{\frac{n}{2}} = 0, \\ \mu_{\frac{n}{2}+l} = -\mu_{\frac{n}{2}-l}, \\ \psi_{l,k} = \frac{k\pi}{2l}, & l = 1, 2, \dots, \frac{n}{2}, k = 0, 1, \dots, 2l, \end{cases}$$

对于位置空间, 可以选择这样的格网, 使得外边界都落在节点上. 为了明确起见, 以 (r, z) 平面上的单位圆为例说明选取方法. 取分点

$$z_j = r_j = j \frac{\sqrt{2}}{J}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, J/2, J \text{ 取偶数}$$

1) 在实际计算中, 由于扩散近似的考虑, 可取

$$\bar{\mu}_l = \frac{1}{2} (\mu_{l-1} + \mu_l) \sqrt{\frac{n^2 + 2n}{n^2 + 2n - 2}}.$$

$$z_j = r_i = \sqrt{1 - \left[(J-j) \frac{\sqrt{2}}{J} \right]^2}, \quad j = i = \frac{J}{2} + 1, \frac{J}{2} + 2, \dots, J,$$

过分点 (r_i, z_j) 作平行于 r 轴和 z 轴的两直线来作剖分线 (如图 2).

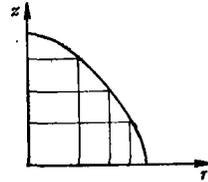


图2

对于上述分割, 在相空间中视 μ_l 为参数, 对固定的 $\bar{\mu}_l$ 得到下列几种单元:

- 1) 在内点区域得到柱体积元, 顶点坐标依次为 $(r_i, z_j, \phi_k), (r_{i+1}, z_j, \phi_k), (r_i, z_{j+1}, \phi_k), (r_{i+1}, z_{j+1}, \phi_k), (r_i, z_j, \phi_{k+1}), (r_{i+1}, z_j, \phi_{k+1}), (r_i, z_{j+1}, \phi_{k+1}), (r_{i+1}, z_{j+1}, \phi_{k+1})$.

2) 边界体积元

6个顶点的坐标依次为

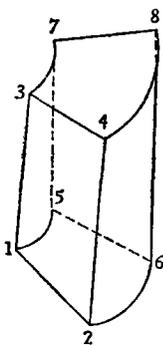


图3

- 3) $\phi = \pi$ 的内点单元. 四个顶点的坐标为 $(r_i, z_j), (r_{i+1}, z_j), (r_i, z_{j+1}), (r_{i+1}, z_{j+1})$.

4) $\phi = \pi$ 的边界单元.

顶点坐标为 $(r_i, z_j), (r_{i+1}, z_j), (r_i, z_{j+1})$.

在区域 D 上, 设 $N(r, z, \phi, \mu_l)$ 分别对每个变元线性, 即有

$$N(r, z, \phi, \mu_l) = (\Delta r_i \Delta z_j \Delta \phi_k)^{-1} \sum_{i', j', k' = 0, 1} (-1)^{i'+j'+k'} (r - r_{i+i'}) \times (z - z_{j+j'}) (\phi - \phi_{k+k'}) N_{i+i', j+j', k+k'}, \quad (14)$$

其中 $N_{i, j, k} = N(r_i, \phi_k, z_j, \mu_l)$, $\Delta r_i = r_{i+1} - r_i$, $\Delta \phi_k = \phi_{k+1} - \phi_k$, $\Delta z_j = z_{j+1} - z_j$.

命

$$A_l = \sqrt{1 - \bar{\mu}_l^2}, \quad B_l = \bar{\mu}_l, \quad D_k = \frac{1}{\Delta \phi_k} (\cos \phi_{k+1} - \cos \phi_k),$$

$$\bar{r}_i = \frac{1}{2} (r_i + r_{i+1}), \quad \Delta s_j = s_{j+1} - s_j,$$

$$A(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} (1 - s^2)^{1/2} ds, \quad B(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} s ds,$$

$$C(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} s(1 - s^2)^{1/2} ds, \quad D(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} s^2 ds,$$

$$E(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} (1 - s^2) ds, \quad F(s_j) = \frac{1}{\Delta s_j} \int_{s_j}^{s_{j+1}} s(1 - s^2) ds, \quad (15)$$

将(14)代入(11)式, 计算各个积分, 得到差分方程, 这里设 α, β 在每个小区域上是常数. 以下列出各种体积元的差分方程.

1) 柱体积元的差分方程:

$$\sum_{i', j', k' = 0, 1} b_{i+i', j+j', k+k'} N_{i+i', j+j', k+k'} = \sum_{i', j' = 0, 1} \bar{b}_{i+i', j+j'} \bar{N}_{i+i', j+j'}, \quad (16)$$

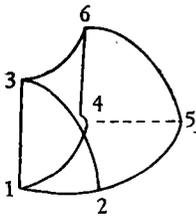


图4

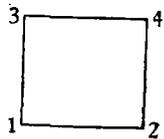


图5

其中

$$b_{i+i', j+j', k+k'} = (-1)^{i'+k'} \frac{2}{\Delta r_i \Delta \phi_k} A_i (r_{i+i'} D_k + \bar{r}_i \sin \phi_{k+k'}) \\ + \left[\frac{1}{6} (\alpha' - (-1)^{i'} \frac{1}{3 \Delta z_j} B_i) \right] (2\bar{r}_i + r_{i+i'}), \\ \bar{b}_{i+i', j+j'} = \frac{1}{3} \beta (2\bar{r}_i + r_{i+i'}).$$

2) 边界体积元的差分方程(设边界为一单位圆):

$$C_{i,j,k} N_{i,j,k} + C_{i+1,j,k} N_{i+1,j,k} + C_{i,j+1,k} N_{i,j+1,k} + C_{i,j,k+1} N_{i,j,k+1} \\ + C_{i+1,j,k+1} N_{i+1,j,k+1} + C_{i,j+1,k+1} N_{i,j+1,k+1} = \bar{C}_{i,j} \bar{N}_{i,j} \\ + \bar{C}_{i,i+1} \bar{N}_{i,i+1} + \bar{C}_{i+1,j} \bar{N}_{i+1,j} \quad (17)$$

其中

$$C_{i,j,k+k'} = (-1)^{k'} \frac{A_i}{2} \left[(A(z_j) z_{j+1} - C(z_j) + \frac{1}{2} r_i \Delta z_j) \sin \phi_{k+k'} + r_i \Delta z_j D_k \right] \\ - \frac{1}{12} B_i \Delta \phi_k \Delta r_i (r_{i+1} + 2r_i) + \frac{1}{12} \alpha' \Delta \phi_k [E(z_j) z_{j+1} - F(z_j) \\ + r_i (A(z_j) z_{j+1} - C(z_j)) - r_i^2 \Delta z_j], \\ C_{i,i+1,k+k'} = (-1)^{k'} A_i \left[A(z_j) z_j - C(z_j) + \frac{1}{2} r_i \Delta z_j \right] D_k - \frac{1}{2} B_i \Delta \phi_k \\ \cdot [B(z_j) z_j - D(z_j)] - \frac{1}{2} \alpha' \Delta \phi_k \left[E(z_j) z_j - F(z_j) + \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right], \\ C_{i+1,j,k+k'} = (-1)^{k'+1} A_i \left[(A(z_j) z_{j+1} - C(z_j)) \left(D_k + \frac{1}{2} \sin \phi_{k+k'} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{4} r_i \Delta z_j \sin \phi_{k+k'} \right] + \frac{1}{12} \alpha' \Delta \phi_k \left[2(E(z_j) z_{j+1} - F(z_j)) \right. \\ \left. - r_i (A(z_j) z_{j+1} - C(z_j)) - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right] \\ \left. + \frac{1}{2} B_i \Delta \phi_k \left[B(z_j) z_{j+1} - D(z_j) - \frac{1}{6} \Delta r_i (2r_{i+1} + r_i) \right], \right.$$

$k' = 0, 1.$

$$\bar{C}_{i,j} = \frac{1}{6} \beta \Delta \phi_k [E(z_j) z_{j+1} - F(z_j) + r_i (A(z_j) z_{j+1} - C(z_j)) - r_i^2 \Delta z_j],$$

$$\bar{C}_{i,i+1} = \frac{1}{2} \beta \Delta \phi_k \left[F(z_j) - E(z_j) z_j - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right],$$

$$\bar{C}_{i+1,j} = \frac{1}{6} \beta \Delta \phi_k \left[2(E(z_j) z_{j+1} - F(z_j)) - r_i A(z_j) z_{j+1} - C(z_j) - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right].$$

3) $\phi = \pi$ 的正规面积单元.

令 $\phi_k = \pi$, $\Delta \phi_k \rightarrow 0$, 对 (16) 式求极限, 则得到差分方程

$$\sum_{i',j'=0,1} b'_{i+i', j+j', 2l} N_{i+i', j+j', 2l} = \sum_{i',j'=0,1} \bar{b}'_{i+i', j+j'} \bar{N}_{i+i', j+j'} \quad (18)$$

其中

$$b'_{i+i', j+j', 2l} = (-1)^{i'} A_l \frac{\bar{r}_i}{\Delta r_i} + (2\bar{r}_i + r_{i+i'}) \left(\frac{1}{6} \alpha' - (-1)^{i'} \frac{B_l}{3\Delta z_j} \right),$$

$$\bar{b}'_{i+i', j+j'} = \frac{1}{6} \beta (2\bar{r}_i + r_{i+i'}), \quad i', j' = 0, 1.$$

4) $\phi = \pi$ 的边界单元.

令 $\phi = \pi, \Delta\phi_k \rightarrow 0$, 对 (17) 式求极限, 得到 $\phi = \pi$ 的边界“面积”单元的差分方程:

$$C'_{i, j, 2l} N_{i, j, 2l} + C'_{i, j+1, 2l} N_{i, j+1, 2l} + C'_{i+1, j, 2l} N_{i+1, j, 2l}$$

$$= \bar{C}'_{i, j} \bar{N}_{i, j} + \bar{C}'_{i, j+1} N_{i, j+1} + \bar{C}'_{i+1, j} \bar{N}_{i+1, j}, \quad (19)$$

其中

$$C'_{i, j, 2l} = \frac{1}{2} A_l \left[z_{j+1} A(z_j) - C(z_j) + \frac{1}{2} r_i \Delta z_j \right] - \frac{1}{6} B_l \Delta r_i (r_{i+1} + 2r_i)$$

$$+ \frac{1}{6} \alpha' [z_{j+1} E(z_j) - F(z_j) + r_i (z_{j+1} A(z_j) - C(z_j)) - r_i^2 \Delta z_j],$$

$$C'_{i, j+1, 2l} = B_l [D(z_j) - z_j B(z_j)] + \frac{1}{2} \alpha' \left[F(z_j) - E(z_j) z_j - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right],$$

$$C'_{i+1, j, 2l} = -\frac{1}{2} A_l \left[z_{j+1} A(z_j) - C(z_j) + \frac{1}{2} r_i \Delta z_j \right] + B_l [B(z_j) z_{j+1} - D(z_j)]$$

$$- \frac{1}{6} \Delta r_i (2r_{i+1} + r_i) + \frac{1}{6} \alpha' \left[2(E(z_j) z_{j+1} - F(z_j)) \right.$$

$$\left. - r_i (A(z_j) z_{j+1} - C(z_j)) - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right],$$

$$\bar{C}_{i, j} = \frac{1}{6} \beta [z_{j+1} E(z_j) - F(z_j) + r_i (z_{j+1} A(z_j) - C(z_j)) + r_i^2 \Delta z_j],$$

$$\bar{C}_{i, j+1} = \frac{1}{2} \beta \left[F(z_j) - E(z_j) z_j - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right],$$

$$\bar{C}'_{i+1, j} = \frac{1}{6} \beta \left[2(z_{j+1} E(z_j) - F(z_j)) - r_i (z_{j+1} A(z_j) - C(z_j)) - \frac{1}{2} r_i^2 \Delta z_j \right].$$

5) 对于下半球面, 边界单元的差分方程可在 (18), (19) 式中用 $j-1$ 代替 $j+1$ 而得到. 如果区域上、下对称, 只需计算一半区域即可.

6) 边界条件,

$$N_{i, j, k, l} = 0, \quad \text{当 } H(r_i, z_j) = 0, \quad \sqrt{1 - \bar{\mu}_i^2} \cos \phi_k \frac{\partial H}{\partial r} + \bar{\mu}_i \frac{\partial H}{\partial z} \leq 0 \text{ 时}, \quad (20)$$

7) 对称条件,

$$N(0, z_j, \phi_k, \bar{\mu}_i) = N(0, z_j, \pi - \phi_k, \bar{\mu}_i),$$

$$l = 1, 2, \dots, n, \quad j = 0, 1, 2, \dots, J, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l. \quad (21)$$

8) 如果区域上、下对称, 则

$$N(r_i, 0, \phi_k, \bar{\mu}_l) = N(r_i, 0, \phi_k, \bar{\mu}_{n-l}),$$

$$l = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n \quad i = 0, 1, \dots, J, \quad K = 0, 1, \dots, 2l. \quad (22)$$

注意, 在差分方程的推导中, 对边界面上的 N , 可以严格按分界线插值而不用 (14). 这时可以得到更精确但也更复杂的差分公式. 计算表明, 两种处理办法的计算效果差别不大, 这里给出的公式简单适用.

§4. 迭代解法

差分方程(16)–(18)同边界条件(20)以及对称条件(21), (22) (如果对 $z=0$ 对称) 一起得到一组线性代数方程组. 如果给定总流 $\bar{N}_{i,j}$, 对所有的角流 $N_{i,j,k,l}$, 可沿中子飞行方向逐个解出. 具体计算过程如下: 从小的 $\bar{\mu}_l$ 开始计算, 然后按 $\bar{\mu}_l$ 增加的次序逐个计算 $N_{i,j,k,l}$. 对于固定的 $\bar{\mu}_l$, 若 $\bar{\mu}_l < 0$, 从大的 z 开始, 对 z 从上到下计算; 反之, 若 $\bar{\mu}_l > 0$, 则从小的 z 开始, 对 z 从下到上计算. 对于固定的 $\bar{\mu}_l, \phi_k$, 从 π 开始由大到小计算. 若 $\phi_k \geq \pi/2$, 从大的 r 开始, 对 r 由大到小计算 $N_{i,j,k,l}$; 反之, 当 $\phi_k < \pi/2$ 时, 则对 r 从小到大计算 $N_{i,j,k,l}$.

上述过程完成后叫做一次内迭代, 在每次迭代之后估计附加特征值 k_p :

$$k_p^{(m)} = \frac{\sum_{i=0}^J \sum_{j=0}^j \bar{N}_{i,j}^{(m)} \bar{N}_{i,j}^{(m)}}{\sum_{j=0}^J \sum_{i=0}^i \bar{N}_{i,j}^{(m)} \bar{N}_{i,j}^{(m+1)}}$$

m 表示迭代次数, k_p 对应于 λ_p . 求出 k_p 之后对 $\bar{N}_{i,j}^{(m+1)}$ 作中心规格化, 并用 $\bar{N}_{i,j}^{(m+1)}$ 代替 $\bar{N}_{i,j}^{(m)}$ 作下次迭代的初值. 如果 $|k_p^{(m)} - k_p^{(m+1)}| > \epsilon_0$ (ϵ_0 是控制误差), 则继续迭代; 反之, 如果 $|k_p^{(m)} - k_p^{(m+1)}| \leq \epsilon_0$, 则停止迭代. 然后检查 $|k_p^{(m)} - 1| \leq \epsilon$ 是否成立. 如果成立, 则对应的 λ_p 就是所要求的特征值. 反之, 调整 λ_p , 取

$$\lambda_{p+1} = (\alpha v + \lambda_p) k_p^{(m)} - \alpha v$$

代替 λ_p , 重复上述迭代过程, 直到 $|k_p^{(m)} - 1| \leq \epsilon_0$ 为止. 上述迭代过程具有计算方便和节省存储量的优点.

§5. 结 束 语

从上述不难看出, 本文提出的方法同时具有有限元法和 s_n 方法的优点, 在处理曲面边界, 多种介质等方面, 具有有限元方法的灵活性和通用性, 便于统一处理内部区域的交界面和曲面边界条件. 此外, 差分方程还自动保持局部的和总体的守恒条件, 从而可靠性得到基本的保证. 另一方面, 差分方程的求解又像 s_n 方法一样简单, 可以逐次递推求解, 差分方程的精度也高于 s_n 方法.

实际计算结果表明, 从守恒原理出发来处理轴对称迁移方程是有效的, 可靠性得到基本的保证, 甚至在格网较粗的情况下也能取得具有必要精度的结果. 对特征值问题所用的迭代修正方法(人工临界方法)和解算过程, 可以大大节省存储量. 这种方法可以应用到一般的轴对称问题.