

# 动态中子输运方程迭代初值的选取方法<sup>\*1)</sup>

洪振英 袁光伟 傅学东

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

## 摘 要

研究离散纵标动态中子输运方程迭代求解时, 迭代初值的不同选取方法, 设计合理的迭代初值可以适当放宽对时间步长的限制, 缩短计算时间. 设计四种迭代初值并应用于数值求解中的等比格式和菱形格式, 其中等比格式形成非线性离散方程, 菱形格式形成线性离散方程. 考察不同迭代初值的计算效率, 分别对物理量变化平缓以及变化剧烈的问题进行考察. 数值算例表明构造的基于物理量随时间走势的预估值作为迭代初值优势明显, 这在保证计算精度的前提下提高了数值计算效率.

**关键词:** 离散纵标, 中子输运方程, 迭代初值, 等比格式, 菱形格式

**MR (2000) 主题分类:** 65M06

## METHODS OF DETERMINING ITERATIVE INITIAL VALUE FOR TIME-DEPENDENT NEUTRON TRANSPORT EQUATION

Hong Zhenying Yuan Guangwei Fu Xuedong

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

## Abstract

In this paper the methods of determining iterative initial value about iterative procedure for discrete ordinate time-dependent neutron transport equation are studied. Proper iterative initial value can extend time step limit, thereby save computing time. Four kinds of methods which are applied to exponential method and diamond method are studied and the different numerical results are compared. The discrete equation of exponential method is nonlinear and the discrete equation of diamond method is linear. The numerical results by using different initial value on problems of different physical process show that the method of choosing iterative initial value based on the physical process has higher computational efficiency than others. Thus one can select more rational method to solve time-dependent transport equation such that the corresponding method can improve the computational efficiency on the condition of keeping numerical precision.

**Keywords:** discrete ordinate, neutron transport equation, iterative initial value, exponential method, diamond difference

**2000 Mathematics Subject Classification:** 65M06

\* 2007 年 9 月 8 日收到.

<sup>1)</sup> 国家重点基础研究发展计划 (973 计划)(2005CB321703), 国家自然科学基金 (60533020) 和计算物理实验室基金资助项目.

## 1. 引言

中子输运方程广泛应用于核反应系统以及医学领域, 该方程形式是微分-积分方程, 除了特殊情形外, 它难以解析求解而只能数值求解. 一般几何下中子输运方程是七个独立变量的函数: 三个空间变量、两个角度变量、一个能量变量以及时间变量. 采用离散纵标方法求解中子输运方程时, 通过时间隐式离散方法得到相应的差分方程组, 此方程组阶数很高, 需要采用迭代法进行求解, 其中迭代初值的选择是比较关键的一步, 对收敛速度有较大的影响. 通常取前一时间层的值作为迭代初值<sup>[1-3]</sup>, 文献 [4] 对抛物型方程中迭代初值的多种选取方式进行了讨论. 对于核反应系统往往需要求解多介质问题, 一些物理参数 (如截面等) 往往在时间空间上出现间断, 从而导致中子通量的突变, 如果所求的中子通量在某时刻出现突变, 那么就需要缩短时间步长. 对于迭代收敛缓慢的困难已发展了许多加速收敛的方法, 如扩散综合加速<sup>[5,6]</sup>, 输运综合加速<sup>[7]</sup> 以及多重网格方法<sup>[8,9]</sup> 等, 这些方法需要构造输运方程的近似方程, 如低阶扩散方程或低阶输运方程. 对动态问题中迭代初值的选择很少有文献进行深入地讨论. 为了得到合理的数值结果, 如果只是简单地缩小时间步长, 对于计算规模不太大的物理问题有时还是有效的, 因为计算规模不大对计算时间的要求不是很迫切, 但是对于在很小时间尺度上物理量剧烈变化的问题, 如果迭代初值选取不够合适, 那么时间步长需要大幅度缩小, 有时是量级上的缩小 (例如从  $10^{-3}$  到  $10^{-4}$ ), 否则迭代失败或者是伪收敛从而不能给出合理的数值结果. 这将导致计算效率过低, 计算时间周期过长而无法满足物理问题求解的需要. 因此需要对中子输运方程迭代求解过程中的迭代初值进行深入研究, 构造合理的迭代初值, 考察不同迭代初值对中子输运方程数值求解的影响. 通过分析研究设计合理的迭代初值以减少迭代次数, 从而实现高效求解, 这有利于大型工程计算中的中子输运方程更广泛的应用. 本文针对多群动态中子输运方程的迭代求解, 在球几何输运问题中对构造的四种迭代初值进行深入探讨, 分别考察中子通量变化缓慢以及变化剧烈时, 不同迭代初值对计算效率的影响, 数值结果表明构造的基于物理量变化过程的迭代初值具有较好的计算效率.

## 2. 动态中子输运方程的数值求解

多群动态中子输运方程如下 (球几何输运问题):

$$\frac{\partial \varphi_g(r, \mu, t)}{v_g \partial t} + \frac{\mu \partial [r^2 \varphi_g(r, \mu, t)]}{r^2 \partial r} + \frac{\partial [(1 - \mu^2) \varphi_g(r, \mu, t)]}{r \partial \mu} + \Sigma_g^{tr} \varphi_g(r, \mu, t) = Q_g \quad (2.1)$$

其中  $r \in [0, R]$ ,  $\mu \in [-1, 1]$ ,  $t \in [0, T]$ ,  $R$  为半径,  $T$  为计算结束时间.  $\varphi_g(r, \mu, t)$  的含义是  $t$  时刻  $r$  处角方向  $\mu$  处第  $g$  群的中子角通量,  $V_g$  表示第  $g$  群的中子速度,  $\Sigma_g^{tr}$  表示第  $g$  群中子的总截面.

源项  $Q_g$  包含了裂变源, 散射源与独立外源, 其表达式为  $Q_g = \frac{1}{4\pi} [Q_g^f + Q_g^s + S_g]$ , 裂变源项为  $Q_g^f = \chi_g \sum_{g'}^G \nu \Sigma_{fg'} \phi_{g'}$  (其中  $\chi_g$  表示第  $g$  群的裂变中子谱,  $\nu$  是每次裂变的平均次级中子数,  $\Sigma_{fg'}$  为裂变截面), 各向同性散射源项  $Q_g^s = \sum_{g'}^g \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'}$  ( $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$  为散射截面),  $S_g$  是与通量无关的外源项.

$$\phi_g = 2\pi \int_{-1}^1 \varphi_g(r, \mu, t) d\mu \text{ 为积分通量.}$$

定解条件:

- (1) 初始条件:  $t = 0$  时,  $\varphi_g = \varphi_g^{(0)}$ .  
 (2) 边界条件:  $\varphi(R, \mu, t) = 0, \mu \leq 0$ .

对于上述中子输运方程的数值求解可以采用蒙特卡洛方法, 球谐函数方法, 离散纵标方法. 本文采用离散纵标方法进行求解, 这种方法在精度和计算经济性之间给出一种折中. 利用有限体积方法对中子输运方程进行离散, 对于时间、空间以及角度变量的外推采用等比格式 (EM), 此格式是非线性的, 理论上为二阶精度, 虽然等比格式的运算量比菱形格式稍大, 但它具有非负性、精度高的优点, 在计算非均匀多介质问题中, 它优于菱形格式. 同时本文也给出了一些问题的菱形格式计算结果. 在以下描述中, 为了简便起见在不至引起混淆的情况下略去能群下标  $g$ .

下面给出等比格式 (EM) 与菱形格式 (DD) 在空间、时间、角度变量上的外推形式. 等比格式外推形式如下:

时间变量外推

$$\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = \left( \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^2 / \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.2)$$

角度变量外推

$$\varphi_{m+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \left( \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^2 / \varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}, \quad (2.3)$$

空间变量外推

$$\varphi_{m,k}^{n+1} \varphi_{m,k+1}^{n+1} = \left( \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^2. \quad (2.4)$$

菱形格式外推形式为:

时间变量外推

$$\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = 2\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.5)$$

角度变量外推

$$\varphi_{m+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} = 2\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}, \quad (2.6)$$

空间变量外推

$$\varphi_{m,k}^{n+1} + \varphi_{m,k+1}^{n+1} = 2\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1}. \quad (2.7)$$

下面以等比格式为例, 推导动态中子输运方程的离散形式, 菱形格式可类似推导. 把区间  $0 \leq r \leq R, -1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq t \leq T$  进行如下划分

$$\begin{aligned} 0 &= r_{-\frac{1}{2}} < r_0 < r_{\frac{1}{2}} < \cdots < r_{k-\frac{1}{2}} < r_k < r_{k+\frac{1}{2}} < \cdots < r_{K-\frac{1}{2}} < r_K < r_{K+\frac{1}{2}} = R, \\ -1 &= \mu_0 < \mu_{\frac{1}{2}} < \cdots < \mu_{m-\frac{1}{2}} < \mu_m < \mu_{m+\frac{1}{2}} < \cdots < \mu_{M-\frac{1}{2}} < \mu_M = 1, \\ 0 &= t^{-\frac{1}{2}} < t^0 < t^{\frac{1}{2}} < \cdots < t^{n-\frac{1}{2}} < t^n < t^{n+\frac{1}{2}} < \cdots < t^{N-\frac{1}{2}} < t^N < t^{N+\frac{1}{2}} = T, \end{aligned}$$

其中  $r_k = \frac{1}{2} (r_{k-\frac{1}{2}} + r_{k+\frac{1}{2}})$ ,  $\mu_m = \frac{1}{2} (\mu_{m-\frac{1}{2}} + \mu_{m+\frac{1}{2}})$ ,  $t^n = \frac{1}{2} (t^{n-\frac{1}{2}} + t^{n+\frac{1}{2}})$ .

方程 (2.1) 在单元  $r_k^{n+1} \leq r \leq r_{k+1}^{n+1}$ ,  $\mu_{m-\frac{1}{2}} \leq \mu \leq \mu_{m+\frac{1}{2}}$ ,  $t^{n+\frac{1}{2}} \leq t \leq t^{n+\frac{3}{2}}$  上积分, 经过运算得到如下离散方程:

$\mu_m \neq -1$  成立:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} - \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{v\Delta t^{n+1}} + \frac{\mu_m (A_{k+1}^{n+1} \varphi_{m,k+1}^{n+1} - A_k^{n+1} \varphi_{m,k}^{n+1})}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})}{2V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} w_m} \\ (\alpha_{m+\frac{1}{2}} \varphi_{m+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}) + \sum_{k+\frac{1}{2}}^{tr,n+1} \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = Q_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.8)$$

$\mu_m = -1$  成立:

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} - \varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{v\Delta t^{n+1}} - \frac{A_{k+1}^{n+1}\varphi_{o,k+1}^{n+1} - A_k^{n+1}\varphi_{o,k}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \\ & \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})\varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \Sigma_{k+\frac{1}{2}}^{tr,n+1}\varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = Q_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中  $V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{3} [(r_{k+1}^{n+1})^3 - (r_k^{n+1})^3]$ ,  $\alpha_{m\pm\frac{1}{2}} = (1 - \mu^2)_{m\pm\frac{1}{2}}$ ,  $A_k^{n+1} = (r_k^{n+1})^2$ ,  $A_{k+1}^{n+1} = (r_{k+1}^{n+1})^2$ ,  $\Delta t^{n+1} = t^{n+\frac{3}{2}} - t^{n+\frac{1}{2}}$ ,  $w_m = \mu_{m+\frac{1}{2}} - \mu_{m-\frac{1}{2}}$

把等比格式中对应时间、角度、空间变量的外推公式 (2.2),(2.3),(2.4) 代入方程 (2.8), 方程 (2.9) 式得到

$$a \left( \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^2 + b \varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} + c = 0, \quad (2.10)$$

其中  $\mu_m < 0$  时:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{v\Delta t^{n+1}\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}} - \frac{\mu_m A_k^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}\varphi_{m,k+1}^{n+1}} + \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{2V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}w_m\varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}; b = \Sigma_{k+\frac{1}{2}}^{tr,n+1}; \\ c &= - \left[ Q_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{v\Delta t^{n+1}} - \frac{\mu_m A_{k+1}^{n+1}\varphi_{m,k+1}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})\alpha_{m-\frac{1}{2}}\varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}w_m} \right]. \end{aligned}$$

$\mu_m > 0$  时:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{v\Delta t^{n+1}\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{\mu_m A_{k+1}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}\varphi_{m,k}^{n+1}} + \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})\alpha_{m+\frac{1}{2}}}{2V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}w_m\varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}; b = \Sigma_{k+\frac{1}{2}}^{tr,n+1}; \\ c &= - \left[ Q_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{v\Delta t^{n+1}} + \frac{\mu_m A_k^{n+1}\varphi_{m,k}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \frac{(A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1})\alpha_{m-\frac{1}{2}}\varphi_{m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}w_m} \right]. \end{aligned}$$

$\mu_m = -1$  时:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{v\Delta t^{n+1}\varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{A_k^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}\varphi_{o,k+1}^{n+1}}; b = \frac{A_{k+1}^{n+1} - A_k^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} + \Sigma_{k+\frac{1}{2}}^{tr,n+1}; \\ c &= - \left[ Q_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\varphi_{o,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{v\Delta t^{n+1}} + \frac{A_{k+1}^{n+1}\varphi_{o,k+1}^{n+1}}{V_{k+\frac{1}{2}}^{n+1}} \right]. \end{aligned}$$

从而解出

$$\varphi_{m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (2.11)$$

当  $\mu_m < 0$ ,  $r$  为最外边界时, 有  $\varphi_{m,K}^{n+1} = 0$  (外边界条件,  $K$  表示外边界点). 这时对于  $r$ , 不能使用等比差分外推, 而采用步格式差分外推.

对上述离散方程需要采用迭代方法求解, 简单源迭代可以写成下面的形式:

$$L_{k,m}\varphi_{k,m}^{(s+1)} = Q_k^{f,(s)} + Q_k^{s,(s)} + S_k \quad (2.12)$$

$L$  是输运算符, 即

$$L = \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{(1 - \mu^2)}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} + \Sigma_g^{tr} \quad (2.13)$$

迭代求解  $t^{n+1}$  时刻的中子通量时, 需要给出迭代初值  $\phi_0$ , 从而计算散射源与裂变源, 因此可知迭代初值的选择在隐式迭代求解过程中是比较关键的一步, 好的迭代初值在给出合理计算结果的同时可以使得迭代易于收敛, 从而节省计算成本, 下面针对  $\phi_0$  的选择进行深入讨论.

### 3. 动态中子输运方程数值计算中迭代初值的选取

从中子输运方程的计算过程可以看出, 为了快速且准确的得出计算结果, 迭代过程是相当重要的. 除了应用各种加速方法以外, 迭代初值对迭代过程也是有影响的. 若迭代初值离真解较远, 迭代次数增加, 总的计算时间也增加, 而且会出现迭代失败的情况. 合理的较为准确的迭代初值使得迭代过程更容易达到它的收敛解, 这样可以在保证精度的前提下, 提高计算效率.

对于中子输运方程迭代求解中的迭代初值, 本文构造了不同的选取方式, 用来考察迭代初值对中子输运方程数值求解的影响.

设求解  $t^{n+1}$  时刻的物理量,  $\phi_0$  表示  $t^{n+1}$  时刻迭代初值, 下面给出具有代表性的四种迭代初值的选取形式:

#### 方法 1.

$\phi^0 = \phi^n$ ,  $\phi^n$  为  $t^n$  时刻的中子通量.

#### 方法 2.

$\phi^0 = \phi^{n+\frac{1}{2}} \alpha_k$ ,  $\phi^{n+\frac{1}{2}}$  为  $t^{n+\frac{1}{2}}$  时刻的中子通量.

#### 方法 3.

$\phi^0 = \phi_0^{n+1}$ , 即选取  $t^{n+1}$  时刻显式格式的解.

#### 方法 4.

$\phi^0 = \phi^n + (\phi^n - \phi^{n-1}) \frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}}$ , 外推出负用步格式修正.

其中  $\alpha_k$  为修正系数, 定义如下:

$$\alpha_k = \frac{\sum_g (\phi_{k,g}^{n+\frac{1}{2}} / V_g)}{\sum_g (\phi_{k,g}^n / V_g)}.$$

上述几种迭代初值中, 第一种采用的是传统做法即简单选取前一时间层的通量作为迭代初值, 第三种迭代初值采用二阶精度显式格式求解, 第四种方式综合考虑了前两个时间层  $t^{n-1}$ ,  $t^n$  的通量, 通过线性组合给出迭代初值, 但需要考虑外推出负的处理, 本文采用步格式修正方法. 对于第二种迭代初值, 采用  $t^{n+1/2}$  时刻的通量与修正系数乘积. 下面分析表明, 此种方式体现了选择的迭代初值基本符合在计算过程中通量随时间变化的规律, 即首先预测出通量的变化趋势, 在此基础上选择下一时间步的迭代初值, 具体分析过程如下:

定义中子增殖常数  $\lambda$  为

$$\lambda(t) = \frac{1}{N(t)} \frac{dN(t)}{dt},$$

则有  $N(t) = N(t_0) e^{\int_{t_0}^t \lambda(t) dt}$ . 设不同时刻  $t_1, t_2$ , 其中  $t_1 < t_2$ , 成立

$$N(t_1) = N(t_0) e^{\int_{t_0}^{t_1} \lambda(t) dt}, N(t_2) = N(t_1) e^{\int_{t_1}^{t_2} \lambda(t) dt}.$$

根据积分中值定理成立下面的关系:

$$N(t_2) = N(t_1) e^{\int_{t_1}^{t_2} \lambda(t) dt} \approx N(t_1) e^{\bar{\lambda} \Delta t} \quad (3.1)$$

其中  $\bar{\lambda} = \lambda(\xi)$ ,  $t_1 < \xi < t_2$ , 又由于  $\phi = Nv$  ( $v$  表示中子的速度), 所以成立

$$\phi_2 = N_2 v \approx N_1 e^{\bar{\lambda} \Delta t} v \approx \phi_1 e^{\bar{\lambda} \Delta t}. \quad (3.2)$$

上述表达式说明在一定的条件下, 不同时刻通量的变化具有一定的比例关系. 对  $\alpha_k$ ,  $e^{\frac{\bar{\lambda} \Delta t}{2}}$  进行泰勒展开, 则

$$\alpha_k \approx 1 + \frac{\Delta t}{2N} \frac{\partial N}{\partial t} + O(\Delta t^2), e^{\frac{\bar{\lambda} \Delta t}{2}} = 1 + \frac{\bar{\lambda} \Delta t}{2} + O(\Delta t^2), \quad (3.3)$$

因此  $\alpha_k \approx e^{\frac{\bar{\lambda} \Delta t}{2}}$ , 所以构造的第二种迭代初值, 体现了通量在时间上的一定比例关系, 即体现了物理量中子通量在时间上的变化趋势.

由于物理过程变化的程度会影响迭代情况, 尤其对于物理过程发生突变的问题, 迭代收敛困难, 一般需要缩短时间步长, 因此我们将分两种情形来考虑不同迭代初值对中子输运方程数值计算的影响, 即中子通量变化缓慢与中子通量变化剧烈两种情况. 尤其是在通量发生突变时, 我们不缩短时间步长而是利用原大时间步长进行计算, 由此考察在不同的物理变化过程中不同迭代初值对计算效率的影响.

## 4. 数值结果

### 4.1. 迭代初值在中子通量变化缓慢问题中的应用

对于物理过程中通量变化缓慢的问题, 我们考虑不同差分格式的计算结果, 为了对比计算结果, 选择反映中子通量随时间变化的物理量  $\lambda$  作为考察对象. 如果没有特殊说明本文一般采用  $S_4$  高斯求积组以及 NJOY 程序加工的中子参数. 对于线性离散方程以及非线性离散方程本文采用的迭代收敛准则为:  $\max_{g,k} \left| \frac{\varphi_{g,k}^{s+1} - \varphi_{g,k}^s}{\varphi_{g,k}^s} \right| < \epsilon$  (本文采用  $\epsilon = 10^{-6}$ ,  $s$  表示  $t$  时刻的迭代次数).

首先考虑单介质问题, 时间步长  $\Delta t$  取为  $10^{-3} \mu s$  (记为模型 1). 图 1 给出时间步长为  $10^{-3} \mu s$  等比格式采用不同迭代初值计算的中子数随时间的变化曲线, 从中可以看出不同迭代初值在不同时刻所计算的物理量是一致的, 整个计算过程中, 通量的变化比较缓慢. 表 1 给出等比格式和菱形格式在不同时间步长下计算物理量  $\lambda$  的结果, 表 2 给出了相应的计算时间. 图 2 给出了等比格式采用不同迭代初值对应的迭代次数曲线, 图 3 给出了菱形格式对应的迭代次数曲线.

从数值结果看, 不同迭代初值以及不同时间步长计算的物理量是一致的. 从计算时间看, 不同时间步长的计算时间是不同的, 大时间步长每个计算时刻所用的迭代次数相对较多, 但总计算时间较少, 从而在保证一定计算精度的前提下节省计算成本, 对于不同的迭代初值, 计算的物理量是吻合的, 但是计算效率不同, 简单选择  $t^n$  时刻的中子通量作为迭代初值的效率最低, 取迭代初值为  $\phi_0 = \phi^{n+\frac{1}{2}} \alpha_k$  的计算时间最少, 效率最高, 显式求解以及多时间层中子通量外推次之, 但也明显优于第一种迭代初值方式.

从等比格式和菱形格式计算时间 (见表 2) 对比情况看, 对于第二种迭代初值菱形格式的计算时间均小于等比格式的计算时间, 其余三种迭代初值基本上菱形格式的计算时间要大于等比格式的计算时间, 这是因为菱形格式易出负, 对其进行步格式修正使得数值解易在收敛解附近振荡, 而菱形格式在利用基于物理量变化趋势的迭代初值时 (第二种迭代初值), 由于初值较其它几种迭代初值更加接近收敛解, 从而菱形格式外推时出负次数较少, 迭代易收敛, 采用  $4\Delta t$  计算时其计算时间仅为第一种迭代初值的四分之一, 说明构造的第二种迭代初值计算效率较高.

## 4.2. 迭代初值在中子通量发生突变问题中的应用

前面考察了物理量中子通量变化比较缓慢的情况,下面给出多介质计算中通量发生突变时,不同迭代初值对计算结果的影响.这里中子总截面在时间上给定大的跳跃,使得中子通量发生突变,系统 $\lambda$ 从负值变为正值(记为模型2),即在 $0.1\mu s$ 时刻第二介质区总截面 $\Sigma_t$ 发生变化,即在此时刻总截面为原来的50倍,但此时刻并不缩短时间步长,物理量突变前后采用统一时间步长 $4\Delta t$ .同时考察了物理量突变后,缩短时间步长的计算结果,本文采用 $3\Delta t$ 的时间步长进行计算.表3,表4给出了模型2中等比格式采用原时间步长(记为方式1)以及缩短时间步长(记为方式2)时,不同迭代初值的计算结果以及所用时间.图4,图5给出不同迭代初值计算的中子增殖常数 $\lambda$ 以及最后时刻能谱的图形对比情况.图6给出整个计算过程中不同迭代初值每个时间步迭代次数的图形对比情况(等比格式).

由表3,表4可知物理量发生突变时,时间步长采用方式1与方式2所计算的物理量是吻合的,在计算时间上除了第二种迭代初值方法外,其余三种迭代初值大时间步长的计算时间均小于缩短时间步长的计算时间.表明对于物理量发生突变的问题,可以适当保持原时间步长.不论采用何种时间步长,不同迭代初值计算效率的规律是相同的.

从计算结果看,最终结束时刻 $\lambda$ 值是一致的,从计算效率看,第二种所用的时间最少,约为第一种的二分之一.此模型中我们在 $0.1\mu s$ 时刻使总截面参数发生间断,使得通量变化剧烈.从图4可以看出在 $0.1\mu s$ 时刻, $\lambda$ 有一明显突变,从不同迭代初值的计算结果看,不论是计算的 $\lambda$ 还是能谱,不同迭代初值得到的计算结果吻合的相当好.从图6给出了整个计算过程迭代次数走势看,在中子通量突变之前第二种迭代初值明显优于其它迭代初值,其迭代次数约为第一种迭代初值的四分之一,在通量突变处不同迭代初值所计算的迭代次数都明显增加,这是因为在这种状态下,中子通量的变化比较剧烈,迭代初值离收敛解较远,此时第二种方法虽没有明显的优势但突变附近的迭代次数也少于其它三种迭代初值的迭代次数,在突变过后第二种方法的优势之处又显示出来,在突变后第四种迭代初值的迭代次数虽然要高于第二种但却明显低于其它两种,说明了高精度外推方法的潜力.从计算具有中子通量突变问题的迭代次数和计算时间上看,基于物理量变化趋势的迭代初值较给定的其它三种迭代初值迭代次数明显减少,具有较好的计算效率.

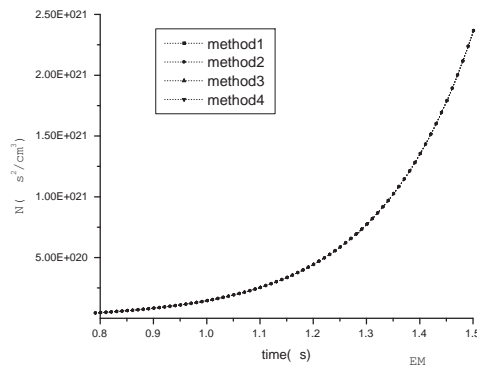


图1 等比格式不同迭代初值计算的中子数(模型1)

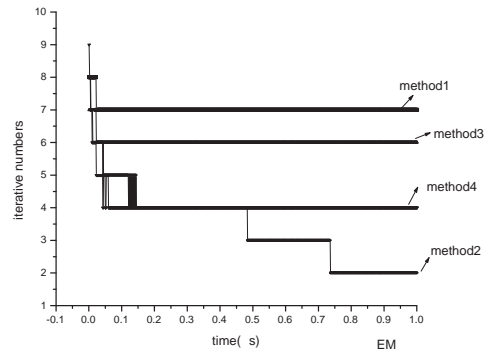


图 2 等比格式不同迭代初值的迭代次数 (模型 1)

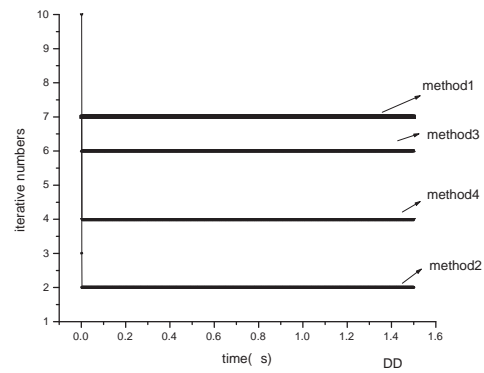


图 3 菱形格式不同迭代初值的迭代次数 (模型 1)

表 1 等比格式和菱形格式不同迭代初值计算的  $\lambda$ (模型 1)

迭代初值	时间步长	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4
等比格式	$\Delta t$	5.57194	5.57196	5.57194	5.57194
	$2\Delta t$	5.57188	5.57190	5.57188	5.57186
	$4\Delta t$	5.57151	5.57159	5.57151	5.57148
菱形格式	$\Delta t$	5.57194	5.57196	5.57194	5.57194
	$2\Delta t$	5.57188	5.57190	5.57188	5.57186
	$4\Delta t$	5.57158	5.57164	5.57158	5.57156



表 2 等比格式和菱形格式不同迭代初值的计算时间 (s)(模型 1)

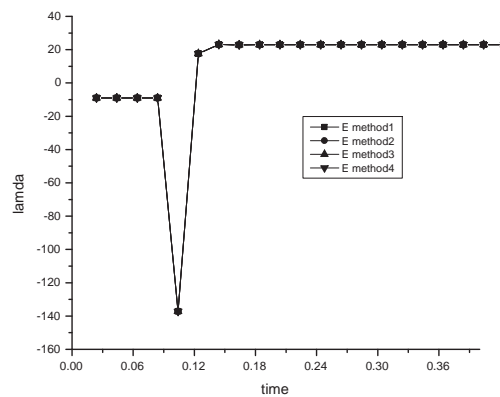
迭代初值	时间步长	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4
等比格式	$\Delta t$	88	39	87	49
	$2\Delta t$	62	29	60	35
	$4\Delta t$	43	25	40	26
菱形格式	$\Delta t$	92	32	84	52
	$2\Delta t$	67	19	63	39
	$4\Delta t$	48	12	45	30

表 3 等比格式不同迭代初值计算的  $\lambda$ (模型 2)

迭代初值	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4
方式 1	22.9315	22.9315	22.9315	22.9315
方式 2	22.9423	22.9423	22.9423	22.9423

表 4 等比格式不同迭代初值的计算时间 (s)(模型 2)

迭代初值	方法 1	方法 2	方法 3	方法 4
方式 1	238	124	236	181
方式 2	247	118	250	183

图 4 等比格式不同迭代初值计算的  $\lambda$  (模型 2)

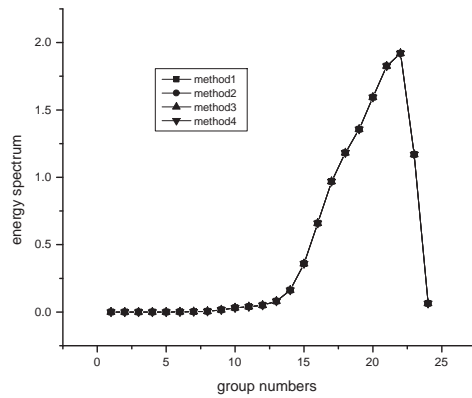


图 5 等比格式不同迭代初值计算的能谱 (模型 2)

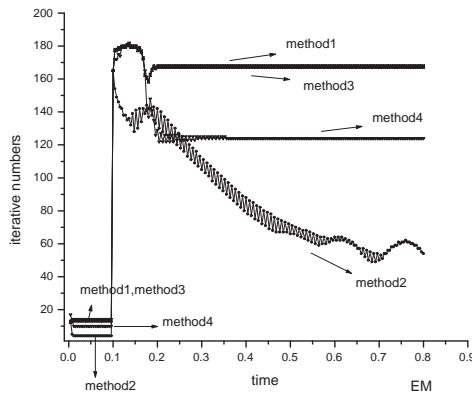


图 6 等比格式不同迭代初值的迭代次数 (模型 2)

## 5. 结 论

本文研究了动态中子输运方程迭代求解中迭代初值选取的方法, 并考察了不同迭代初值对输运方程数值计算的影响, 从计算结果看迭代初值的选取对整个数值模拟的计算效率有较大的影响. 通过对中子通量变化缓慢和中子通量发生突变问题的数值结果看, 不同迭代初值计算的各物理量吻合的相当好; 对于给定的四种迭代初值, 在通量变化不是很大时, 迭代初值选择为第二种的计算效率明显较高, 第四种的效率次之. 大时间步长计算时, 菱形格式采用第二种迭代初值所用计算时间仅为传统迭代初值的四分之一; 当通量随时间的变化比较剧烈时, 第二种选取方法与第四种方法计算效率较高, 从迭代次数上看仍然是第二种方法占优势, 此方法是基于物理变化过程给出相应通量的预估值, 体现了所计算物理量中子积分通量在时间上的变化规律, 而且此种迭代初值在等比格式和菱形格式的计算中均具有较好的计算效率, 表现了此种迭代初值的健壮性. 因此在选择合理高效迭代初值的情况下, 可以适当放宽数值计算时

对时间步长的限制,这在保证计算精度的前提下可以节省计算成本,提高计算效率,如果加上其它相应的加速手段效果会更好.

### 参 考 文 献

- [1] Dinshaw Balsara. Fast and accurate discrete ordinates methods for multidimensional radiative transfer. Part I, basic methods[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2001, 69: 671-707.
- [2] Lewis E E, Miller W F. Computational methods of neutron transport[M]. La Grange Park. American Nuclear Society, Inc. 1993.
- [3] 杜书华, 张树发, 王元璋, 等. 输运问题的计算机模拟 [M]. 长沙: 湖南科技出版社, 1989.
- [4] 袁光伟. 非线性抛物型方程迭代加速计算方法 [G]. 计算物理实验室年报, 2004.
- [5] Wareing T A, Walters W F and Morel J E. A Diffusion Accelerated Solution Method for the Nonlinear Characteristic Scheme in Slab Geometry[J]. Nucl.Sci. Eng., 1996, 124: 72-81.
- [6] Morel J E, Dendy J E and Wareing T A. Diffusion Accelerated Solution of the 2-D Sn Equations with Bilinear-Discontinuous Differencing[J]. Nucl. Sci. Eng., 1993, 115: 304-319.
- [7] Ramone G L and Adams M L. A Transport Synthetic Acceleration Method for Transport Iterations[J]. Nucl. Sci. Eng., 1997, 125: 257-283.
- [8] Lansrud D. A Spatial Multigrid Iterative Method for One-Dimensional Discrete-Ordinates Transport Problems[C]. Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, 2005.
- [9] Morel J E and Manteuffel T A. An Angular Multigrid Acceleration Technique for Sn Equations with Highly Forward-Peaked Scattering[J]. Nucl. Sci. Eng., 1991, 107: 330-342.