

## 中子输运问题源项反演的反幂法

梅立泉, 李乃成

(西安交通大学理学院, 710049, 西安)

**摘要:** 对于包括裂变反应在内的中子输运源项反演问题, 研究关于源项有效倍增因子的  $k$ -特征值问题的求解. 基于球谐函数展开和有限差分离散, 给出了中子输运方程的源项反演逼近的反幂算法, 该方法的优势是在适当的初值条件下可以显著提高计算速度. 计算结果表明, 在对有效倍增因子有较好的预先估计值的情况下, 反幂法迭代 3 步, 误差就为 0.045 45%, 而乘幂法迭代 20 步, 误差为 0.109%, 由此可以看出反幂法计算速度更快, 计算结果更精确.

**关键词:** 反幂法; 中子输运方程; 有效倍增因子;  $k$ -特征值问题

**中图分类号:** O175.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)04-0493-04

## Inverse Power Method for Source Term Inversion in Neutron Transport Equation

Mei Liquan, Li Naicheng

(School of Sciences, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** Considering the inversion of the source term for neutron transport in such as fission reaction, the numerical solution of the effective multiplication factor related to  $k$ -eigenvalue problem is investigated. Based on the spherical harmonic functions expansion and finite difference for discretization of transport equation, an inverse power scheme is presented for calculation of the  $k$ -eigenvalue problem. This scheme can obviously speed up convergence rate under the proper initial value condition. The numerical results show that the error of the inverse power method gets only 0.045 45% at 3rd iterative step while the error of the standard power method is still reaching to 0.109% after 20 iterative steps, therefore the inverse power algorithm is endowed with higher computing rate and accuracy than the standard power method if an available estimate of the effective multiplication factor is pre-provided.

**Keywords:** inverse power method; neutron transport equation; effective multiplication factor;  $k$ -eigenvalue problem

随着现代科学技术的进步,特别是中子发现以后,伴随着核反应堆和核武器的出现,中子输运理论得到了极为迅速的发展.计算机技术的日新月异,使得数值求解粒子输运方程的方法得到了迅速发展和广泛应用.现在中子输运理论在反应堆、测井、油气层模拟、核武器设计等领域都有着非常重要的应用.

关于源项反演的中子输运理论主要包括 3 类特征值问题:最简单的定常  $c$ -特征值问题,时间相关

$\lambda$ -特征值问题和包含可裂变介质在内的时间相关  $k$ -特征值问题<sup>[1]</sup>.传统源项反演特征值问题求解使用的数值计算方法是乘幂法,乘幂法简单易行,但是其收敛速度较慢<sup>[2]</sup>.本文给出了一种计算有效倍增因子的反幂法,如果事先可以对倍增因子做出比较好的估计,该方法可以显著提高计算速度.本文通过有限差分建立反演模型的离散格式,然后用反幂法求解中子输运方程中的倍增因子,对计算结果进行分

析并与乘幂法的结果进行了比较.

## 1 方程及其离散

记  $k > 0$  为含可裂变介质物理系统的有效倍增因子, 它满足如下的中子输运方程<sup>[3]</sup>

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla \phi(x, \Omega, E) + \sigma_t(x, E) \phi(x, \Omega, E) - \\ \iint_{r \neq f} \sum \sigma_r(x, E') f_r(x, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \phi(x, \Omega', E') d\Omega' dE' = \\ \frac{1}{k} \iint \frac{1}{4\pi} \nu(x, E', E) \sigma_f(x, E') \phi(x, \Omega, E') d\Omega' dE' \end{aligned} \quad (1)$$

式中:  $\phi(x, \Omega, E) \geq 0$  为中子角通量, 是式(1)对应的非负特征函数;  $\sigma_t$  为宏观总截面;  $\sigma_r$  为  $r$  型反应截面;  $f_r(x, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$  为反应指示函数(即方向为  $\Omega'$ 、能量为  $E_0$  的中子发生核碰撞后产生方向为  $\Omega$ 、能量为  $E$  的中子的几率);  $\frac{1}{4\pi} \nu(x, E', E)$  为裂变反应指示函数. 此方程有空间  $x$ 、方向  $\Omega$  和能量  $E$  多个自由度, 数值求解的工作量将是相当巨大的.

本文对中子输运方程中源项的有效倍增因子  $k$ , 应用数值计算方法进行反演. 设  $\phi^{(0)}(x, \Omega, E)$  为中子角通量的初始估计值, 求解源项有效倍增因子的传统方法是基于下式的迭代方法

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla \phi^{(i)} + \sigma_t \phi^{(i)} - \iint \sum_{r \neq f} \sigma_r f_r \phi^{(i)}(x, \Omega', E') d\Omega' dE' = \\ \iint \frac{1}{4\pi} \nu \sigma_f \phi^{(i-1)}(x, \Omega', E') d\Omega' dE' \\ \forall i = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

则  $\phi^{(i)}/\phi^{(i-1)}$  趋近于有效倍增因子  $k^{[4]}$ .

首先, 考虑中子输运方程关于方向变量  $\Omega$  的离散化. 用球谐函数将中子角通量  $\phi$  和反应指示函数  $f$  展开, 有

$$\left. \begin{aligned} f(x, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) = \\ \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n f_{n,m}(x, E', E) Y_{n,m}(\theta, \varphi) Y_{n,m}^*(\theta', \varphi') \\ \phi(x, \Omega, E) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \phi_{n,m}(x, E) Y_{n,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

将式(3)代入式(1), 再利用球谐函数的正交性

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{n,m}(\theta, \varphi) Y_{n',m'}^*(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{n,n'} \delta_{m,m'}$$

得到原方程的一个等价形式, 选取有限项  $n = 0, 1, 2, \dots, J$ , 可得到式(1)的近似形式, 此近似形式通

常称为  $P_J$  近似方程

$$\begin{aligned} A_1 \left( \frac{\partial \phi_{n-1,m+1}(x, E)}{\partial x_1} + i \frac{\partial \phi_{n-1,m+1}(x, E)}{\partial x_2} \right) + \\ A_2 \left( -\frac{\partial \phi_{n-1,m+1}(x, E)}{\partial x_1} - i \frac{\partial \phi_{n-1,m+1}(x, E)}{\partial x_2} \right) + \\ A_3 \left( -\frac{\partial \phi_{n-1,m-1}(x, E)}{\partial x_1} + i \frac{\partial \phi_{n-1,m-1}(x, E)}{\partial x_2} \right) + \\ A_4 \left( \frac{\partial \phi_{n+1,m-1}(x, E)}{\partial x_1} - i \frac{\partial \phi_{n+1,m-1}(x, E)}{\partial x_2} \right) + \\ A_5 \frac{\partial \phi_{n-1,m}(x, E)}{\partial x_3} + A_6 \frac{\partial \phi_{n+1,m}(x, E)}{\partial x_3} + \\ \sigma_t(x, E) \phi_{n,m}(x, E) - \\ \int \sigma_r(x, E') f(E', E) \phi_{n,m}(x, E') dE' = \\ \frac{1}{k} \int \frac{1}{4\pi} \sigma_f(x, E') f(E', E) \phi_{n,m}(x, E') dE \\ n = 0, 1, 2, \dots, J; m = -n, \dots, 0, \dots, n \end{aligned} \quad (4)$$

式中:  $A_1 \sim A_6$  是与  $n$  和  $m$  有关的常数<sup>[5]</sup>. 对一维平板几何问题,  $P_J$  近似方程可写为

$$\begin{aligned} \mu_n \frac{\partial \phi_n(x, E)}{\partial x} + \sigma_t(x, E) \phi_n(x, E) - \\ \frac{1}{2} \int \sum_{j=1}^J (\sigma_r f_r)(x, E') \omega_j \phi_j(x, E') dE' = \\ \frac{1}{k} \int \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \nu(x, E, E') \sigma_f(x, E') \omega_j \phi_j(x, E') dE' \end{aligned} \quad (5)$$

应用对关于能量变量的能群分解技术<sup>[3]</sup>, 关于位置变量应用差分离散, 得到如下的特征问题

$$\begin{aligned} \mu_n (\phi_{l+1,n}^{(i)} - \phi_{l,n}^{(i)}) + \frac{1}{2} h \sigma_t (\phi_{l+1,n}^{(i)} + \phi_{l,n}^{(i)}) - \\ \frac{h}{4} \sum_{j=1}^J \sigma_r f_r \omega_j (\phi_{l+1,n}^{(i)} + \phi_{l,n}^{(i)}) = \\ \frac{k}{4} \sum_{j=1}^J \nu \sigma_f h \omega_j (\phi_{l+1,j}^{(i-1)} + \phi_{l,j}^{(i-1)}) \\ n = 1, 2, \dots, J; l = 1, 2, \dots, I \end{aligned} \quad (6)$$

式中:  $i = 1, 2, \dots$  为迭代步;  $\phi_{l,n}^{(i)}$  为第  $l$  个空间点第  $n$  个方向点在第  $i$  迭代步上的中子通量;  $h = x_{l+1} - x_l$  为空间步长;  $\omega_j$  为权重系数, 满足  $\sum_{j=1}^J \omega_j = 2$ .

下面讨论特征问题(6)的特征值求解.

## 2 乘幂法

式(6)所描述的迭代过程可以用下面矩阵方程的形式表示

$$\mathbf{A} \Phi^{(i)} = \mathbf{B} \Phi^{(i-1)} \quad (7)$$

式中:  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  均为稀疏的  $I \times J \times G$  阶方阵, 其中  $I$  代表空间点的个数,  $J$  表示离散的方向数,  $G$  为能量群

的个数.不妨设  $G=1$ ,  $\Phi$  是  $I \times J$  维向量,其分量表示离散的位置和方向点上的中子通量.矩阵  $A$  可以看作是输运-反应矩阵,其元素与输运散射相互作用有关,而矩阵  $B$  可以认为是裂变相关矩阵,  $B\Phi$  对应于裂变反应的影响.

采用迭代法计算中子输运方程源项有效倍增因子  $k$  就是解线性方程组(7),直到中子通量的比值  $\|\Phi^{(i)}\|/\|\Phi^{(i-1)}\|$  达到要求的精度为止,此时该值即为  $k$  的近似值.这种方法等价于用乘幂法求解矩阵  $C=A^{-1}B$  的特征值,因为  $C$  的最大的特征值的绝对值恰好等于  $k$ <sup>[5]</sup>.

乘幂法是求一般矩阵按模最大的特征值和相应的特征向量的一种迭代方法,其步骤如下.

算法 1(乘幂法)

取初值  $\Phi^{(0)}$

计算矩阵  $A$ 、 $B$  和  $C$

for  $i=1,2,\dots$ ,do

    令  $\Psi^{(i)}=C\Phi^{(i-1)}$

    求  $\Psi^{(i)}$  绝对值最大的分量  $\max(\Psi^{(i)})$

    令  $\Phi^{(i)}=\Psi^{(i)}/\max(\Psi^{(i)})$

    若  $\max(\Psi^{(i)})\approx\max(\Psi^{(i-1)})$  或  $\|\Phi^{(i)}\|\approx\|\Phi^{(i-1)}\|$ , 停止计算

end do

由算法 1,可迭代计算出源项有效倍增因子

$$k = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{\|\Phi^{(i)}\|}{\|\Phi^{(i-1)}\|} = \lim_{i \rightarrow \infty} \max(\Psi^{(i)}) \quad (8)$$

### 3 反幂法及其应用

与乘幂法类似,反幂法是求矩阵  $C$  的特征值的另一种数值算法,其优点在于当已知特征值的较好估计时,反幂法的收敛速度大大高于乘幂法,而且该方法适用于任何临界问题.假设我们已经对有效倍增因子  $k$  有了一个较好的估计值  $\gamma$ ,按照

$$\Phi^{(i)} = (C - \gamma I)^{-1} \Phi^{(i-1)} \quad (9)$$

式中:  $I$  为单位阵;  $\Phi^{(0)}$  为中子通量在离散化了的的空间点、方向点和能群上的初始估计值.易知  $(C - \gamma I)^{-1}$  的按模最大特征值为  $\frac{1}{k - \gamma}$ .

采用反幂法迭代,计算中子输运问题源项有效倍增因子及近似中子通量的步骤如下.

算法 2(反幂法)

计算矩阵  $A$ 、 $B$  和  $C=A^{-1}B$

三角分解  $C - \gamma I = LR$

for  $i=1,2,\dots$ ,do

    当  $i=1$  时,令  $u=(1,1,\dots,1)^T$

$i \neq 1$  时,解  $Lu=\Phi^{(i-1)}$

    解  $R\Psi^{(i)}=u$

    求  $\Psi^{(i)}$  绝对值最大的分量  $\max(\Psi^{(i)})$

    令  $\Phi=\Psi^{(i)}/\max(\Psi^{(i)})$

    若  $\max(\Psi^{(i)})\approx\max(\Psi^{(i-1)})$  或  $\|\Phi^{(i)}\|\approx\|\Phi^{(i-1)}\|$ , 停止计算

end do

由算法 2,可迭代计算出源项有效倍增因子

$$k = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{\|\Phi^{(i)}\|}{\|\Phi^{(i-1)}\|} = \lim_{i \rightarrow \infty} \left( \gamma + \frac{1}{\max(\Psi^{(i)})} \right) \quad (10)$$

下面讨论矩阵  $A$ 、 $B$  的计算,假定平板是均匀的,并赋予如下的边值条件

$$\phi_{0,j}^{(i)} = 0 \quad j = \frac{J}{2} + 1, \dots, J$$

$$\phi_{I,j}^{(i)} = 0 \quad j = 1, \dots, \frac{J}{2}$$

若向量  $\Phi$  按下列顺序存储

$$\Phi = [\phi_{0,1}, \phi_{0,2}, \dots, \phi_{0,J/2}, \phi_{1,1}, \phi_{1,2}, \dots, \phi_{1,J}, \dots, \phi_{I-1,J}, \phi_{I,J/2+1}, \dots, \phi_{I,J}]^T$$

则由式(6),得矩阵  $A$ 、 $B$  为如下的  $I \times J$  阶分块矩阵

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & E & & & \\ & F & E & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & F & E \\ & & & & F & D_2 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} P_1 & Q & & & \\ & Q & Q & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & Q & Q \\ & & & & Q & P_2 \end{bmatrix}$$

在矩阵  $A$  中,  $D_1 = (d_{i,j})$  为  $J \times J/2$  矩阵,其元素为

$$d_{j,j} = -\mu_j + \frac{1}{2}h\sigma_t - \frac{1}{4}h\sigma_r f_r \omega_j$$

$$j = 1, \dots, J/2$$

$$d_{i,j} = -\frac{1}{4}h\sigma_r f_r \omega_j$$

$$j = 1, \dots, J/2; i \neq j; i = 1, \dots, J$$

$D_2$  为  $J \times J/2$  矩阵,其元素为

$$d_{j,j-J/2} = -\mu_j + \frac{1}{2}h\sigma_t - \frac{1}{4}h\sigma_r f_r \omega_j$$

$$j = J/2 + 1, \dots, J$$

$$d_{i,j} = -\frac{1}{4}h\sigma_r f_r w_j$$

$$j = J/2 + 1, \dots, J; i \neq J/2 + j; i = 1, \dots, J$$

$E = (e_{i,j})$ 、 $F = (f_{i,j})$  为  $J \times J$  矩阵, 其元素为

$$e_{j,j} = \mu_j + \frac{1}{2}h\sigma_t - \frac{1}{4}h\sigma_r f_r w_j \quad j = 1, \dots, J$$

$$e_{i,j} = -\frac{1}{4}h\sigma_r f_r w_j \quad j = 1, \dots, J; i \neq j; i = 1, \dots, J$$

$$f_{j,j} = -\mu_j + \frac{1}{2}h\sigma_t - \frac{1}{4}h\sigma_r f_r w_j \quad j = 1, \dots, J$$

$$f_{i,j} = -\frac{1}{4}h\sigma_r f_r w_j \quad j = 1, \dots, J; i \neq j; i = 1, \dots, J$$

在矩阵  $B$  中,  $P_1 = (P_{i,j})$  为  $J \times J/2$  矩阵, 其元素为

$$P_{i,j} = \frac{1}{4}h\nu\sigma_f w_j \quad j = 1, \dots, J/2; i = 1, \dots, J$$

$P_2$  为  $J \times J/2$  矩阵, 其元素为

$$P_{i,j} = \frac{1}{4}h\nu\sigma_f w_{J/2+j} \quad j = 1, \dots, J/2; i = 1, \dots, J$$

$Q = (q_{i,j})$  为  $J \times J$  矩阵, 其元素为

$$Q_{i,j} = \frac{1}{4}h\nu\sigma_f w_j \quad j = 1, \dots, J; i = 1, \dots, J$$

#### 4 数值算例

分别利用乘幂法和反幂法编写了程序求解中子输运方程(1)的有效倍增因子  $k$ , 并对两种算法的收敛速度、误差进行了比较。

算例中取平板厚度为 16.0,  $\sigma_r f_r = 0.7$ ,  $\nu\sigma_f = 0.5^{[6]}$ , 取空间间隔数  $I=60$ , 故得步长  $h=16.0/60$ , 又方向变量离散数  $J=4$ , 将以上参数代入式(6), 并将其化为式(7)的形式, 其中  $A$ 、 $B$  均为  $240 \times 240$  的稀疏矩阵。在反幂法中取最大特征值的一个预先估计值  $\gamma=1.66$ , 两种算法的迭代结果与误差如表 1 所示。

表 1 乘幂法与反幂法的迭代结果

| 迭代<br>次数 | 乘幂法         |             | 反幂法         |             |
|----------|-------------|-------------|-------------|-------------|
|          | 计算结果        | 误差          | 计算结果        | 误差          |
| 1        | 1.665 263 6 | 0.056 363 6 | 1.618 445 4 | 0.009 545 4 |
| 2        | 1.662 536 0 | 0.053 636 3 | 1.610 718 0 | 0.001 818 1 |
| 3        | 1.657 990 9 | 0.049 090 9 | 1.609 354 5 | 0.000 454 5 |
| 4        | 1.652 081 8 | 0.043 181 8 | 1.608 904 1 | 0.000 004 1 |
| 5        | 1.645 263 6 | 0.036 363 6 |             |             |
| 6        | 1.639 809 0 | 0.030 909 0 |             |             |
| ⋮        |             |             |             |             |
| 19       | 1.610 718 8 | 0.001 818 1 |             |             |
| 20       | 1.609 990 9 | 0.001 090 9 |             |             |

从表 1 可以看出, 乘幂法迭代 20 步得到解的误差为 0.001 090 9, 反幂法迭代 3 步的结果的误差为 0.000 454 5, 反幂法迭代 3 步结果比乘幂法迭代 20 步的结果还要好得多。进一步利用反幂法对不同参数下的中子输运方程源项进行了反演, 结果见表 2。

表 2 不同参数下反幂法得到的有效倍增因子

| 平板厚度    | $\sigma_r$ | $\nu\sigma_f$ | $\gamma$ | $k$       |
|---------|------------|---------------|----------|-----------|
| 16.0    | 0.7        | 0.5           | 1.66     | 1.608 904 |
| 16.0    | 0.5        | 0.7           | 1.39     | 1.370 574 |
| 16.0    | 0.3        | 0.9           | 1.28     | 1.266 238 |
| 16.0    | 0.1        | 1.1           | 1.21     | 1.207 865 |
| 2.0     | 0.1        | 1.1           | 0.94     | 0.934 462 |
| 2.0     | 0.3        | 0.9           | 0.94     | 0.921 051 |
| 2.0     | 0.5        | 0.7           | 0.94     | 0.900 733 |
| 2.0     | 0.7        | 0.5           | 0.94     | 0.866 333 |
| 2.578 6 | 0.1        | 1.1           | 1.00     | 0.999 962 |
| 2.578 6 | 0.3        | 0.9           | 1.00     | 0.999 964 |
| 2.578 6 | 0.5        | 0.7           | 1.00     | 0.999 948 |
| 2.578 6 | 0.7        | 0.5           | 1.00     | 0.999 920 |

以上计算结果表明, 在已知倍增因子的一个较好估计值时, 反幂法能有效地求解中子输运临界问题的源项有效倍增因子, 且其收敛速度大大高于标准的乘幂法。

#### 参考文献:

- [1] Modak R S, Gupta A. A simple scheme for the direct evaluation of time-eigenvalues of neutron transport equation [J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2003, 30(1): 211-222.
- [2] Quarteroni A, Sacco R, Saleri F. Numerical mathematics [M]. Berlin: Springer Verlag, 2002: 196-202.
- [3] 杜书华. 输运问题的计算机模拟 [M]. 长沙: 湖南科学出版社, 1989: 36-73.
- [4] Lewis E E, Miller W F. Computational methods of neutron transport [M]. New York: John Wiley and Sons, 1984.
- [5] Mei Liquan. A spectral streamline diffusion finite element coupled method of unsteady transport equation in the field of neutron logging [J]. *J Appl Math and Mech*, 1999, 20(7): 739-749.
- [6] Allen J, Berry R M. The inverse method for calculation of multiplication factors [J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2002, 29(8): 929-935.

(编辑 杜秀杰)