关于球谐函数方法中P_N和B_N近似的误差估计和收敛性问题

谢 仲 生
(西安交通大学)

本文讨论核反应堆计算中最常用的 P_N 和 B_N 近似间的关系、误差估计和收敛速度问题。导出了误差估计的表达式；对通常遇到的$\frac{B}{\sigma}<1$的情况下的误差和收敛速度问题作了具体的分析和讨论；证明了 B_N 近似的优越性。

为简单起见，讨论一维均质各向同性平面源情况。这时，定态中子迁移方程可写成

$$\mu\frac{\partial\varphi(x,u,\mu)}{\partial x}+\sigma(u)\varphi(x,u,\mu)=$$

$$=\frac{1}{2\pi}\sum_i\int_{\Omega'}\int_{u-r_i}^{u}\sigma_s^i(u')f^i(u-u';\mu_0)\varphi(x,u',\mu')\,du'\,d\Omega'+\frac{1}{2}S(x,u). \tag{1}$$

式中 σ 表示宏观截面，其它符号和脚标都是习惯上所使用的，不再加以说明。

在实际问题中通常应用球谐函数方法对方程 (1) 近似求解，其实质在于把中子通量和散射函数按球谐函数或勒让德多项式展开成级数。例如，对于一维平面问题可写成

$$\varphi(x,u,\mu)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\varphi_n(x,u)P_n(\mu), \tag{2}$$

$$f^i(u-u';\mu_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}f_n^i(u-u')P_n(\mu_0). \tag{3}$$

式中 $P_n(x)$为 n 阶勒让德多项式。在实际计算中通常只截取级数(2) 和 (3) 的前 $N+1$ 项作为近似解；根据截取及处理方法的不同，有 P_N 和 B_N 两种近似方法之分。

若在式(2)中只截取前$N+1$ 项，即认为 $n>N$时 $\varphi_n(x,u)\equiv 0$，将其代入方程(1)，经过整理便可得到 P_N 近似的方程如下[1,2]

$$\left.\begin{aligned}&\frac{n+1}{2n+1}\frac{\partial\varphi_{n+1}(x,u)}{\partial x}+\frac{n}{2n+1}\frac{\partial\varphi_{n-1}(x,u)}{\partial x}+\sigma(u)\varphi_n(x,u)=\\&\qquad=q_n(x,u)+S(x,u)\delta_{0n},\quad n=0,1,\cdots,N,\\&\varphi_{N+1}(x,u)\equiv 0.\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

式中 δ_{0n} 为 Kronecker Delta 符号 (若 $m=n$，则 $\delta_{mn}=1$；否则 $\delta_{mn}\equiv 0$)，而

$$q_n(x,u)=\sum_i\int_{u-r_i}^{u}\sigma_s^i(u')f_n^i(u-u')\varphi_n(x,u')\mathrm{d}u'. \tag{5}$$

若首先对方程(1)作富里埃变换，即

$$\boldsymbol{F}\varphi=\varphi(B,u,\mu)=\frac{1}{2\pi}\int\varphi(x,u,\mu)\mathrm{e}^{iBx}\mathrm{d}x,$$

然后再把 $\varphi(B,u,\mu)$按下列展开式写成

$$\varphi(B,u,\mu)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\varphi_n(B,u)P_n(\mu), \tag{6}$$

$$\varphi_n(B,u)=\boldsymbol{F}\varphi_n(x,u)=\int_{-1}^{+1}\varphi(B,u,\mu)P_n(\mu)\mathrm{d}\mu. \tag{7}$$

这样由方程(1)便可求得[1,3]

$$\sigma(u)\varphi_n(B,u)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)A_{l,n}(B,u)q_l(B,u)+$$

$$+A_{0,n}(B,u)S(B,u),\quad n=0,1,2,\cdots, \tag{8}$$

$$q_l(B,u)=\boldsymbol{F}q_l(x,u)=\sum_i\int_{u-r_i}^{u}\sigma_s^i(u')f_l^i(u-u')\varphi_l(B,u')\mathrm{d}u', \tag{9}$$

$$A_{l,n}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}\frac{P_l(\mu)P_n(\mu)}{1-\dfrac{iB\mu}{\sigma}}\mathrm{d}\mu, \tag{10}$$

$$\frac{(2l+1)}{\dfrac{iB}{\sigma}}A_{j,l}-(l+1)A_{j,l+1}-lA_{j,l-1}=\frac{\delta_{j,l}}{\dfrac{iB}{\sigma}}. \tag{11}$$

在方程 (8) 的右端求和项内令 $l>N$ 时 $q_l(B,u)\equiv0$，便得到 B_N 近似方程如下：

$$\sigma(u)\varphi_n(B,u)=\sum_{l=0}^{N}(2l+1)A_{l,n}q_l(B,u)+A_{0,n}S(B,u),\quad n=0,1,\cdots. \tag{12}$$

从上面看到，P_N 和 B_N 近似两者的截取方法不同，因而精度也必然不同。实际经验表明，B_N 近似的收敛速度和精度要比 P_N 近似的高。

文献[4]证明了球谐函数方法的收敛性。文献[5—7]曾对两种近似的收敛性问题作了一定的讨论。但是从数学理论上对这两种近似的收敛速度、精度以及这两种方法之间有什么联系等问题，应该说还没有得到充分的研究。本文从数学理论上对 P_N 和 B_N 近似的精度和收敛速度问题予以研究；并导出其误差估计的解析表达式。阐明这两种近似之间的关系，产生不同误差的原因。同时对核反应堆快谱计算中通常遇到的情况$\left(\frac{B}{\sigma}<1\right)$下这两种近似的误差和收敛速度作了进一步的具体分析和讨论。

一、P_N 和 B_N 近似间的关系

文献[6,7]曾指出，当系数 $A_{l,n}$ 用 $N+1$ 点高斯求积公式近似计算时，B_N 和 P_N 近似是等价的。下面我们用更直接明了的方法讨论两种近似之间的关系，并可更清楚地看出两者的根本差别所在。为此，对方程组 (4) 作富里埃变换，同时为简单起见，以下本文中均令

$$\varphi_n=\varphi_n(B,u),\quad q_n=q_n(B,u,),\quad S=S(B,u).$$

这样便得到 P_N 近似方程为

$$\left.\begin{aligned}&-\frac{n+1}{2n+1}iB\varphi_{n+1}-\frac{n}{2n+1}iB\varphi_{n-1}+\sigma\varphi_n=q_n+S\delta_{0n},\quad n=0,1,\cdots,N,\\&\varphi_{N+1}=0.\end{aligned}\right\}\qquad(13)$$

另一方面，我们若把 $A_{l,n}$ 的递推关系式(11)代入方程组(12)式的前$N+1$个方程中，并经过适当整理便可把 B_N 近似方程(12)化成和 P_N 近似相似的形式：

$$\left.\begin{aligned}&-\frac{n+1}{2n+1}iB\varphi_{n+1}-\frac{n}{2n+1}iB\varphi_{n-1}+\sigma\varphi_n=q_n+S\delta_{0n},\quad n=0,1,\cdots,N,\\&\left.\begin{aligned}&\varphi_{N+1}=\sum_{l=0}^{N}\frac{2l+1}{\sigma}A_{l,N+1}\,q_l+A_{0,N+1}\frac{S}{\sigma},\\&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\end{aligned}\right\}\end{aligned}\right\}\qquad(14)$$

或对方程组（12）的所有方程的系数均作上述变换推导，则有

$$\left.\begin{aligned}&-\frac{n+1}{2n+1}iB\varphi_{n+1}-\frac{n}{2n+1}iB\varphi_{n-1}+\sigma\varphi_n=q_n+S\delta_{0n},\ n=0,1,\cdots,N,\\&-\frac{n+1}{2n+1}iB\varphi_{n+1}-\frac{n}{2n+1}iB\varphi_{n-1}+\sigma\varphi_n=0,\qquad\quad n=N+1,\cdots.\end{aligned}\right\}\qquad(15)$$

这样，比较方程组（13），（14）和（15）可以清楚地看到：对于前 $N+1$ 个分量 $\varphi_n(B,u)$，P_N 和 B_N 近似的方程形式是一样的，即满足同样的数学方程组。所不同之处仅仅在于：P_N 近似在方程组中简单地令 $\varphi_{N+1}=0$，并截去了 $n>N$ 的所有方程；而 B_N 近似对 $n=N$的方程式中的 φ_{N+1} 则用（14）式的下式 $\varphi_{N+1}(B,u)$ 近似值来代入（14）式的上式中求解，同时对 $n>N$的 φ_n 也近似地用（14）式的下式表示。进一步比较(13)和（15）式还可以看出：B_N 近似仍然是保留无限个方程的方程组（即在展式（6）中保留无穷多项)，只不过在 $n>N$ 的方程右端中令 $q_n=0$ 而已。

这样，从数学上看，B_N 近似的处理显然要比 P_N 近似优越，B_N 近似可以看作是对 P_N 近似的一种改进。因而在N相同的情况下它具有更高的精度，所以目前在核反应堆设计的快谱计算中广泛地应用 B_N 近似。

二、B_N 和 P_N 近似的误差估计式

根据反应堆普遍理论，对于裸堆或堆芯部分可以近似地认为中子通量的空间与能量分布可以分离变量，且空间部分满足波动方程。这样可以证明中子通量的富里埃变换除 $B=B_n$外均等于零，因而[1,5,8]

$$\varphi(x,u,\mu)=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-iB_nx}\varphi(B_n,u,\mu),$$

其中 B_n 为波动方程的特征值，定态下只有 $n=0$ 的最小本征值 B_0 才有意义(B_0 称为曲率，简记为 B)。热堆的快谱计算便是根据这种近似原理应用方程(12) 或(13)进行计算的。这时方程中的 B 即以反应堆曲率代入。$\varphi_0(B,u)$即为所求的标量中子通量能谱分布[9]。

我们用 $\varepsilon(\mu)$及 $\varepsilon(\varphi_0)$分别表示中子角通量 $\varphi(B,u,\mu)$和 $\varphi_0(B,u)$（它具有标量中子通

量的物理意义)的平方偏差或收敛速度，其定义如下：

$$\varepsilon(\mu)=\int_0^{\infty}\int_{-1}^{+1}|\varphi^*(B,u,\mu)-\varphi(B,u,\mu)|^2\mathrm{d}\mu\mathrm{d}u, \tag{16}$$

$$\varepsilon(\varphi_0)=\int_0^{\infty}|\varphi_0^*(B,u)-\varphi_0(B,u)|^2\mathrm{d}u, \tag{17}$$

其中 $\varphi^*(B,u,\mu)$为方程的精确解，$\varphi(B,u,\mu)$则是由 P_N 或 B_N 近似方法求得的近似解。φ_0^* 及φ_0 分别为 $\varphi^*(B,u,\mu)$及$\varphi(B,u,\mu)$展式的第一项富氏系数(以下标有 * 号的均表示精确解)，把(6)式代入(16)式并利用勒让德函数的正交性质可以求得

$$\varepsilon(\mu)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\int_0^{\infty}(\varphi_n^*-\varphi_n)\overline{(\varphi_n^*-\varphi_n)}\mathrm{d}u=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\int_0^{\infty}|\varphi_n^*-\varphi_n|^2\mathrm{d}u. \tag{18}$$

为便于分析，引进矢量函数 $\boldsymbol{\phi}=\{\varphi_n, n=0,1,\cdots\}$。因而对每一个 $\varphi(B,u,\mu)$ 便有一个矢量函数$\boldsymbol{\phi}$与之对应。$\boldsymbol{\phi}$为无穷维，对于每一个$\boldsymbol{\phi}$之前$N+1$ 个分量可组成一个 $N+1$ 维矢量函数 $\boldsymbol{\phi}^N=\{\varphi_n, n=0,1,\cdots,N\}$。我们把与所有解 $\varphi(B,u,\mu)$相对应的矢量函数$\boldsymbol{\phi}$的全体记为 $\mathrm{D}(\infty)$空间，而 $\boldsymbol{\phi}^N$ 全体记为 $\mathrm{D}(N)$。显然 $\mathrm{D}(N)\subset\mathrm{D}(\infty)$，所有分量 φ_n 在 u 的定义域内平方可积，即 $\varphi_n\in\mathrm{L}_2(u)$。我们在 $\mathrm{L}_2(u)$ 及矢量函数空间 $\mathrm{D}(N)$ 和 $\mathrm{D}(\infty)$ 中按下面定义引入范数

$$\|\varphi_n\|^2=\int_0^{\infty}|\varphi_n(B,u)|^2\mathrm{d}u,\quad \varphi_n\in\mathrm{L}_2(u), \tag{19}$$

$$\|\boldsymbol{\phi}^N\|_N^2=\sum_{n=0}^{N}\frac{2n+1}{2}\int_0^{\infty}|\varphi_n|^2\mathrm{d}u=\sum_{n=0}^{N}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n\|^2,\quad \boldsymbol{\phi}^N\in\mathrm{D}(N), \tag{20}$$

$$\|\boldsymbol{\phi}\|_\infty^2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n\|^2,\quad \boldsymbol{\phi}\in D(\infty). \tag{21}$$

显然，它们满足范数的定义。这样便有

$$\varepsilon(\mu)=\|\boldsymbol{\phi}^*-\boldsymbol{\phi}\|_\infty^2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n^*-\varphi_n\|^2, \tag{22}$$

$$\varepsilon(\varphi_0)=\|\varphi_0^*-\varphi_0\|^2. \tag{23}$$

下面求 P_N 和 B_N 近似的收敛速度和误差估计表达式。

1. P_N 近似

记 $\boldsymbol{\phi}^N=[\varphi_n, n=0,1,\cdots,N]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{S}=[s,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}}$，把方程(13)写成矩阵算子形式：

$$\boldsymbol{A}_N\boldsymbol{\phi}^N=\boldsymbol{S}, \tag{24}$$

$$\boldsymbol{A}_N=\begin{pmatrix}\sigma-\boldsymbol{Q}_0 & -iB & 0 & 0 & \cdots\cdots 0\\ -\frac{1}{3}iB & \sigma-\boldsymbol{Q}_1 & -\frac{2}{3}iB & 0 & \cdots\cdots 0\\ 0 & -\frac{2}{5}iB & \sigma-\boldsymbol{Q}_2 & -\frac{3}{5}iB & \cdots\cdots 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0\cdots\cdots & \cdots & 0 & \frac{-N}{2N+1}iB & \sigma-\boldsymbol{Q}_N\end{pmatrix},$$

其中$\boldsymbol{Q}_n$ 为散射积分算子。

$$\boldsymbol{Q}_n\varphi_n=q_n(B,u)=\sum_i\int_{u-r_i}^{u}\sigma_s^i f_n^i(u-u')\varphi_n(B,u')\mathrm{d}u'. \tag{25}$$

设精确解 $\varphi^*(B,u,\mu)$ 对应之矢量函数为 $\boldsymbol{\phi}^*=\{\varphi_n^*, n=0,1,\cdots\}$；$\boldsymbol{\phi}^{*N}=\{\varphi_n^*, n=0,1,\cdots,N\}$。显然 $\boldsymbol{\phi}^{*N}$ 满足

$$\boldsymbol{A}_N\boldsymbol{\phi}^{*N}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{R}_P, \tag{26}$$

$$\boldsymbol{R}_P=\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ \dfrac{N+1}{2N+1}iB\varphi_{N+1}^*\end{pmatrix}. \tag{27}$$

由(24)及(26)式可求得

$$\boldsymbol{A}_N(\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N)=\boldsymbol{R}_P, \tag{28}$$

因而

$$\|\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N\|_N=\|\boldsymbol{A}_N^{-1}\boldsymbol{R}_P\|_N.$$

令 $\boldsymbol{\phi}=\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_N,0,\cdots\}$。根据(22)式便得

$$\varepsilon_{P_N}(\mu)=\|\boldsymbol{\phi}^*-\boldsymbol{\phi}\|_\infty^2=\|\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N\|_N^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}|\varphi_n^*|^2, \tag{29}$$

或

$$\varepsilon_{P_N}(\mu)=\|\boldsymbol{A}_N^{-1}\boldsymbol{R}_P\|_N^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}|\varphi_n^*|^2\leqslant\|\boldsymbol{A}_N^{-1}\|_N^2\|\boldsymbol{R}_P\|_N^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}|\varphi_n^*|^2$$

$$=\frac{(N+1)^2}{2(2N+1)}\|\boldsymbol{A}_N^{-1}\|_N^2|iB\varphi_{N+1}^*|^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}|\varphi_n^*|^2 \tag{30}$$

及

$$\varepsilon_{P_N}(\varphi_0)=|\varphi_0^*-\varphi_0|^2=\left|a_{1,N+1}\frac{N+1}{2N+1}iB\varphi_{N+1}^*\right|^2. \tag{31}$$

式中 $a_{1,N+1}$ 为算子 $\boldsymbol{A}_N^{-1}$ 阵的第一行第 $N+1$ 列的元。

(29)—(31)式便是 P_N 近似的误差估计式。可以看到其收敛速度与 $|\varphi_{N+1}^*|$ 有关。

2．B_N 近似

设以 $\boldsymbol{\phi}^N=\{\varphi_n, n=0,1,\cdots,N\}$ 表示 B_N 近似所求得解 $\boldsymbol{\phi}=\{\varphi_n, n=0,1,\cdots\}$ 的前 $N+1$ 个分量所组成的矢量函数；$\boldsymbol{\phi}^{*N}=\{\varphi_n^*, n=0,1,\cdots,N\}$ 表示与精确解对应之 $\boldsymbol{\phi}^*$ 的前 $N+1$ 个分量所组成的矢量函数。同样方法自方程(14)可以求得

$$\boldsymbol{A}_N(\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N)=\boldsymbol{R}_B, \tag{32}$$

$$\boldsymbol{R}_B=\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ \dfrac{N+1}{2N+1}iB(\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1})\end{pmatrix}. \tag{33}$$

因而

$$\|\phi^{*N}-\phi^N\|_N=\|A_N^{-1}R_B\|_N.$$

这样，由(22)、(23)式便求得 B_N 近似的平方偏差(收敛速度)的估计式为：

$$\varepsilon_{B_N}(\mu)=\|\phi^*-\phi\|_\infty^2=\|\phi^{*N}-\phi^N\|_N^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n^*-\varphi_n\|^2, \tag{34}$$

或

$$\varepsilon_{B_N}(\mu)\leqslant\|A_N^{-1}R_B\|_N^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n^*-\varphi_n\|^2\leqslant\frac{(N+1)^2}{2(2N+1)}\cdot$$

$$\|A_N^{-1}\|_N^2\|iB(\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1})\|^2+\sum_{n=N+1}^{\infty}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n^*-\varphi_n\|^2, \tag{35}$$

及
$$\varepsilon_{B_N}(\varphi_0)=\|\varphi_0^*-\varphi_0\|^2=\|a_{1,N+1}\frac{N+1}{2N+1}iB(\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1})\|^2. \tag{36}$$

从上述公式可以看到其收敛速度系与 $|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}|$ 有关。在通常情况下(例如 $\alpha<1$ 时，详见下节)可以证明 $|\varphi_n^*|$ 将随着 n 的增大而减小，$\varphi_\infty^*\to0$，且 $|\varphi_n^*-\varphi_n|<|\varphi_n^*|$。这便证明了在 N 相同的情况下，B_N 近似的精度或收敛速度将比 P_N 近似高。

三、$\alpha=\dfrac{B}{\sigma(u)}<1$ 时的误差和收敛速度

在一般实际问题中，反应堆曲率 $B\simeq\dfrac{\pi}{R}$(R——堆的特征尺寸)通常是一个很小的量，即 $B\ll1$，因而对通常遇到的计算问题多数满足 $\alpha=\dfrac{B}{\sigma}<1$，即 $R>\pi\lambda\left(\lambda=\dfrac{1}{\sigma}\right.$，中子平均总自由程$\left.\right)$条件。下面对 $\alpha<1$ 的情况下的误差估计作进一步的讨论和分析。

首先分析一下 $|\varphi_n^*|$ 和 $|q_n^*|$ 随 n 衰减的速率。让我们观察(25)式。由于我们仅限于讨论 $|\varphi_n^*|$ 或 $|q_n^*|$ 的数量级大小及由于球谐函数方法所带来的误差，并且 $\sigma_s(u)\varphi_n(B,u)$ 本身又是 u 的缓慢变化函数，因而可以把(25)式积分号内 $\sigma_s(u')\varphi_n(B,u')$ 在 u 处展成泰勒级数取一项($n>0$ 时)或二项($n=0$ 时)便得

$$q_n=\sigma_s(u)\varphi_nT_n+\xi\frac{\partial\sigma_s\varphi_n}{\partial u}\delta_{0n},\quad n=0,1,\cdots,N. \tag{37}$$

式中

$$T_n=\int_{u-r}^{u}f_n(u-u')\mathrm{d}u', \tag{38}$$

$$\xi=\int_{u-r}^{u}(u-u')f_0(u-u')\mathrm{d}u'\to\mathrm{O}\left(\frac{1}{A}\right).$$

这里为简单起见，略去了对不同元素 i 的求和，这并不影响结果的一般性。可以看到当散射在质心系为各向同性(S 波散射)情况时，T_n 即相当于文献[10]中的 $T_{n,0}^0(T_0=T_{0,0}^0=1$，$T_1=T_{1,0}^0=\bar{\mu},\cdots$，关于前几项的 T_n 的表达式列于附录中)。根据艾姆斯特(Amester)定理[10]，当 $A>1$ 时，$T_{n,0}^0(T_n)$ 以大于 $\left(\dfrac{1}{A}\right)^n$ 阶的速率趋于零。因而除氢以外有

$$q_n\simeq\sigma_s\varphi_nT_n\to\sigma_s\varphi_n\left(\frac{1}{A}\right)^n. \tag{39}$$

对于氢（$A=1$），由附录知道，$T_n\to\left(\frac{e}{n}\right)^{3/2}$，因而 $q_n\to\sigma_s\varphi_n\left(\frac{e}{n}\right)^{3/2}$，也是随着 n 的增大而递减。

现在讨论 $|\varphi_n^*|$ 的大小。为方便起见，令 $\varphi_{2n}^*=\psi_{2n}$，$-i\varphi_{2n+1}^*=\psi_{2n+1}$，$n=0,1,\cdots$；显然 $|\varphi_n^*|=|\psi_n|$。若对方程(26)中 φ_n^* 作这样置换，并对散射算子 $\boldsymbol{Q}_n$ 作(37)式近似，则对任意给定 N，(26)式便成为一个具有三对角线实系数的方程组，应用追赶法消元便可解得

$$\psi_n=(-1)^{n+1}\frac{n}{2n+1}\frac{B}{\beta_n}\psi_{n-1}+\left(\prod_{K=n}^{N}(-1)^{K+1}\frac{K+1}{2K+1}\frac{B}{\beta_K}\right)\psi_{N+1},\quad n=1,2,\cdots,N. \tag{40}$$

式中系数 β_n 由下列递推公式给出

$$\beta_n=\sigma_n+\frac{(n+1)^2B^2}{(2n+1)(2n+3)\beta_{n+1}},\quad \beta_N=\sigma_N. \tag{41}$$

其中

$$\sigma_n=\sigma-\sigma_sT_n. \tag{42}$$

由于 $\alpha<1$，若略去高阶小量，一般地对于 $n>0$，近似有 $\beta_n\simeq\sigma_n$，同时可证明(40)式右端第二项当 N 增大时逐渐减小($\sim\alpha^{N-n}$)，而当 $N\to\infty$ 时则趋于零。事实上，只要当 N 的取数足够大($N\gg n$)，例如 $N\geqslant N^*$ 时，便可认为

$$|\psi_n|\simeq\frac{n}{2n+1}\frac{B}{\beta_N}|\psi_{n-1}|<\frac{n}{2n+1}\cdot\frac{\sigma}{\sigma_n}\cdot\alpha\cdot|\psi_{n-1}|. \tag{43}$$

这样，$|\varphi_n^*|=|\psi_n|$ 以 $\frac{|\varphi_n^*|}{|\varphi_{n-1}^*|}\simeq\frac{n}{2n+1}\alpha$ 速率递减。若我们取 $|\varphi_0^*|$ 的大小作为单位加以比较，则由(43)式便得

$$|\varphi_n^*|\simeq\left(\prod_{K=1}^{n}\frac{K\alpha}{2K+1}\cdot\frac{\sigma}{\sigma_K}\right)|\varphi_0^*|\simeq\xi_n\alpha^n|\varphi_0^*|=O(\xi_n\alpha^n),\quad n=1,2,\cdots. \tag{44}$$

$$|q_n^*|\to\sigma_s\xi_n\left(\frac{\alpha}{A}\right)^n|\varphi_0^*|\simeq O\left(\xi_n\left(\frac{\alpha}{A}\right)^n\right), \tag{45}$$

$$\xi_n=\prod_{K=1}^{n}\frac{K}{2K+1}\frac{\sigma}{\beta_n}\simeq\prod_{K=1}^{n}\frac{K}{2K+1}\frac{\sigma}{\sigma_K}. \tag{46}$$

下文表 2 中列出了氢和石墨介质 P_5 近似(基本上可认为收敛)所求得的各 $|\varphi_n|$ 值，这些结果基本上与(43)式或(44)式符合。下面我们应用所得结果对 P_N 和 B_N 近似的误差进行分析。

1. P_N 近似 首先证明(29)式中 $\|\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N\|$ 项与 $|\varphi_{N+1}^*|$ 相比为高阶小量。为此，令 $\psi'_{2n}=\varphi_{2n}^*-\varphi_{2n}$，$\psi'_{2n+1}=-i(\varphi_{2n+1}^*-\varphi_{2n+1})$，则由(28)式应用追赶消元法可得

$$\left.\begin{aligned}&\psi'_0=\varphi_0^*-\varphi_0=\left(\prod_{K=0}^{N}(-1)^{K+1}\frac{K+1}{2K+1}\frac{B}{\beta_K}\right)\psi'_{N+1},\\&\psi'_n=(-1)^{n+1}\frac{n}{2n+1}\frac{B}{\beta_n}\psi'_{n-1}+\left(\prod_{K=n}^{N}(-1)^{K+1}\frac{K+1}{2K+1}\frac{B}{\beta_K}\right)\psi'_{N+1},\\&\qquad n=1,2,\cdots,N.\end{aligned}\right\} \tag{47}$$

其中 $|\psi'_{N+1}|=|\varphi_{N+1}^*|$。对上式加以分析并略去高阶小量，可得

$$\max_{N\geqslant n\geqslant 0}|\varphi_n^*-\varphi_n|=|\varphi_N^*-\varphi_N|\simeq O(\alpha|\varphi_{N+1}^*|)=O(\xi_{N+1}\alpha^{N+2}).$$

这样便得

$$\|\boldsymbol{\phi}^{*N}-\boldsymbol{\phi}^N\|_N^2=\sum_{n=0}^{N}\frac{2n+1}{2}\|\varphi_n^*-\varphi_n\|^2\simeq O(\xi_{N+1}^2\alpha^{2(N+2)}),$$

因而它比起$\|\varphi_{N+1}^*\|^2=O(\xi_{N+1}^2\alpha^{2(N+1)})$来说为高阶小量，可略去。$\varepsilon_{P_N}(\mu)$[(29)式]便主要取决于$\|\varphi_{N+1}^*\|$的大小，即

$$\varepsilon_{P_N}(\mu)\simeq\frac{2N+3}{2}\|\varphi_{N+1}^*\|^2\simeq O(\xi_{N+1}^2\alpha^{2(N+1)}). \tag{48}$$

另一方面，由(47)及(31)式有

$$\varepsilon_{P_N}(\varphi_0)=\|\varphi_0^*-\varphi_0\|\simeq\left\|\left(\prod_{K=0}^{N}\frac{K+1}{2K+1}\frac{B}{\beta_K}\right)\varphi_{N+1}^*\right\|^2\simeq O\left(\left(\frac{\sigma}{\beta_0}\xi_N\xi_{N+1}\right)^2\alpha^{4(N+1)}\right). \tag{49}$$

式(48)与(49)便是P_N近似在$\alpha<1$情况下的误差估计式。可以看出其收敛速度与$\|\varphi_{N+1}^*\|$有关，其平方偏差随N的增大而逐渐减小。

同时还可以看到，收敛速度与曲率B或α有直接关系，反应堆的体积越大(B或α越小)则P_N近似的收敛速度越快(平方偏差越小)。这从表1中也可初步地看出，当$\alpha=0.1$时，对于H或C，P_3近似即可基本收敛；而当$\alpha=0.8$时，需P_5才趋于收敛。这是因为堆体积越大，则大部分体积内的中子通量越接近于各向同性，因而中子角通量可以用(6)式中阶数较低(N较小)的级数来表示就可以得到满意的结果。

此外，还可以看到对于原子量A越大的重元素，其收敛速度越快。因为A越大，σ/σ_n就越小，越接近于1，因而ξ_n就要比轻元素的小。例如当$N=3$时，对于氢，$\xi_3=\frac{8}{35}$；而对于石墨($A=12$)，$\xi_3=\frac{2}{35}$，约为氢的1/4，因而在相同N下其收敛速度比氢来得快。这点从表1中也可看出。从物理上解释，这是因为A越大则在实验室系中散射越接近于各向同性的缘故。

由(48)，(49)式知$\varepsilon_{P_N}(\varphi_0)\simeq(\varepsilon_{P_N}(\mu))^2$。这说明标量中子通量$\varphi_0$的收敛速度要比$\varphi(B,u,\mu)$的快得多。一般讲，$|\varphi_n|$的收敛速度随$n$的减小而增大(近似有$\varepsilon_{P_N}(\varphi_n)\simeq O(\alpha^{4(N+1)-2n})$)。关于这方面的原因，文献[5]中已作了定性的解释。

最后，$\varepsilon_{P_N}(\varphi_0)$和$\varepsilon_{P_N}(\mu)$均随$N$的增大而减小，不论$N$是偶次还是奇次。这样，从理论上讲，如果合理地选择边界条件[11,12]，P_{2N}近似有可能比P_{2N-1}近似取得更高的精度[2,13]。但是应该指出，上面定义的误差系均方偏差，这相当于平均收敛的意思，即对通量分布的总体(体积、能量、方向)平均而言所得的结果。然而，实际上在局部地区，例如分界面附近，偶次近似的通量分布可能有比较大的误差，例如P_2近似时在分界面上将出现中子通量φ_0的不连续并有一突跃变化[13]，这也正是偶次近似的缺陷，而这种情况在前面定义的误差公式中是表现不出来的。

2. B_N近似　B_N近似的平方偏差((34)—(36)式)和$|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}|$有关，而根据(8)，(12)式并考虑(39)式可得

$$\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}\simeq\sum_{l=0}^{N}\frac{2l+1}{\sigma}\sigma_s A_{l,N+1}T_l(\varphi_l^*-\varphi_l)+\sum_{l=N+1}^{\infty}\frac{2l+1}{\sigma}A_{l,N+1}q_l^*. \tag{50}$$

表 1　P_N 近似计算的 φ_0 值

P_N \ φ_0	H (A=1)			C (A=12)		
	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$
P_1	100.00	6.25	1.563	283.2	17.70	4.425
P_2	101.07	7.316	2.629	284	18.50	5.226
P_3	101.06	7.261	2.437	284	18.47	5.113
P_4	101.06	7.263	2.458	284	18.47	5.127
P_5	101.06	7.263	2.456	284	18.47	5.124
P_6	101.06	7.263	2.456	284	18.47	5.124

表 2　对氢和碳 P_5 近似的 $|\varphi_n|$ 计算值

$\|\varphi_n\|$	H (A=1)			C (A=12)		
	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$
$\|\varphi_0\|$	101.06	7.263	2.456	284.0	18.47	5.124
$\|\varphi_1\|$	10.00	2.500	1.25	10.0	2.500	1.25
$\|\varphi_2\|$	0.5316	0.5065	0.4469	0.3996	0.3854	0.3499
$\|\varphi_3\|$	0.2272×10^{-1}	0.8369×10^{-1}	0.1350	0.1708×10^{-1}	0.6358×10^{-1}	0.1052
$\|\varphi_4\|$	0.9671×10^{-3}	0.1375×10^{-1}	0.3989×10^{-1}	0.7571×10^{-3}	0.1086×10^{-1}	0.3219×10^{-1}
$\|\varphi_5\|$	0.4395×10^{-4}	0.2499×10^{-2}	0.1450×10^{-1}	0.3441×10^{-4}	0.1974×10^{-2}	0.1170×10^{-1}

式中$(\varphi_l^*-\varphi_l)$和前面一样，可由(32)式求出；同时可以证明，略去高阶小量后有

$$|\varphi_l^*-\varphi_l|\simeq\left(\prod_{K=l}^{N}\frac{K+1}{2K+1}\frac{\sigma}{\beta_K}\right)\alpha^{N+1-l}|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}|. \tag{51}$$

另一方面，前面已知 $T_l\simeq O\left(\frac{1}{A^l}\right)$，且 $|A_{l,N+1}|\simeq O(\alpha^{|N+1-l|})$（见附录），将这些结果代入(50)式有

$$\left[1-\sum_{l=0}^{N}(2l+1)\frac{\sigma_s}{\sigma}\cdot O\left(\frac{\alpha^{2(N+1-l)}}{A^l}\right)\right][\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}]\simeq\sum_{l=N+1}^{\infty}\frac{2l+1}{\sigma}A_{l,N+1}q_l^*.$$

由于 $|q_l^*|\simeq O\left(\xi_l\left(\frac{\alpha}{A}\right)^l\right)$，因而略去高阶小量便可得

$$|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}|\simeq|A_{N+1,N+1}\ q_{N+1}^*|\simeq O\left(\xi_{N+1}\left(\frac{\alpha}{A}\right)^{N+1}\right).$$

这样，再应用(51)式结果便可证明

$$\|\phi^{*N}-\phi^N\|_N^2=\sum_{l=0}^{N}\frac{2l+1}{2}\|\varphi_l^*-\varphi_l\|^2\simeq O\left(\xi_{N+1}^2\left(\frac{\alpha^{N+2}}{A^{N+1}}\right)^2\right).$$

它和$\|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}\|^2$比较，为高阶小量。最后根据(34)和(36)式便得到在 $\alpha<1$ 时 B_N 近似的收敛速度或误差估计式为：

$$\varepsilon_{B_N}(\mu)\simeq\frac{2N+3}{2}\|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}\|^2\simeq O\left(\xi_{N+1}^2\left(\frac{\alpha}{A}\right)^{2(N+1)}\right), \tag{52}$$

$$\varepsilon_{B_N}(\varphi_0)=\|\varphi_0^*-\varphi_0\|^2\simeq O\left(\frac{\sigma}{\beta_0}\xi_N\xi_{N+1}^2\frac{\alpha^{4(N+1)}}{A^{2(N+1)}}\right). \tag{53}$$

对于氢，上式中的 $1/A^{2(N+1)}$ 须用 $\left(\frac{e}{N+1}\right)^3$ 代替。

由此可以看到，前面对 P_N 近似所得到的关于收敛性和误差估计的全部结论对 B_N 近似也同样成立，就不再一一列举。

此外，由上面讨论可以看出，P_N 近似的收敛速度与 $|\varphi_{N+1}^*| \simeq O(\xi_{N+1}\alpha^{N+1})$ 成比例，而 B_N 近似则与 $|\varphi_{N+1}^*-\varphi_{N+1}|$ 或 $|q_{N+1}^*|$ $\left(O\left[\xi_{N+1}\left(\frac{\alpha}{A}\right)^{N+1}\right]\right)$ 成比例，$\frac{\alpha}{A}<\alpha$，因而在 N 相同情况下，B_N 近似的收敛速度或精度要比 P_N 近似高，A 越大则越显著。这些结论从比较表 1 和表 3 的初步计算结果就可看出。

最后，为了定性说明上述结论，对纯氢和石墨两种介质作了简要粗略的计算，计算用(12)，(13)式进行。计算时假定中子为单能，并略去了中子的吸收（$\Sigma_a=0$）。计算结果列于表 1，2，3 中。

表 3　B_N 近似计算结果*

φ_0 / B_N	H (A=1)			C (A=12)		
	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.8$
B_0	300.2	19.53	5.384	300.2	19.53	5.384
B_1	101.75	6.884	2.258	283.5	18.47	5.122
B_2	101.04	7.274	2.453	283.5	18.47	5.123
B_3	101.04	7.274	2.453	283.5	18.47	5.123
B_4	101.04	7.274	2.451	283.5	18.47	5.123

* 表中的收敛值与 P_N 近似收敛值略有差异，可能是计算系数时舍入误差引起。

感谢张自立、汪荣鑫同志对本文提出了许多宝贵意见。

附录

A. $T_n(T_{n,0}^0)$ 的计算公式

根据 (38) 式当在 C 系散射为各向同性（S 波散射）时可求得

$$T_0=1;\ T_1=\frac{2}{3A};$$

$$T_2=\frac{1}{2}[(5-3A^2)/4]+[3(A^2-1)^2/8A]\ln[(A+1)/(A-1)]\simeq\frac{1}{5A^2};$$

$$T_3=T_5=T_7=0;$$

$$T_4=\frac{1}{8}\{[(105A^4-190A^2+81)/12]-[5(A^2-1)^2(7A^2-1)/8A]\ln[(A+1)/(A-1)]\}$$

$$\simeq-\frac{1}{63A^4};$$

$$T_6=\frac{1}{16}\{[(-3465A^6+7665A^4-5130A^2+919)/64]+$$

$$+[(A^2-1)^2(3465A^4-1890A^2+105)/128]\ln[(A+1)/(A-1)]\}\simeq\frac{1}{429A^6}。$$

对于H$(A=1)$则有[6,7]

$$T_0=1;\ T_1=\frac{2}{3};\ T_2=\frac{1}{4};\ T_3=T_5=0;\ T_4=-\frac{1}{24};\ T_6=\frac{1}{64};T_{2n+1}=0, n=1,2,\cdots.$$

$$T_{2n}=\frac{(-1)^{n+1}(2n-3)!}{2^{2n-2}(n-2)!(n+1)!}\longrightarrow\left(\frac{e}{n}\right)^{3/2}\frac{(-1)^{n+1}}{2\sqrt{\pi}},\ n=2,3,\cdots.$$

B. 当 $\alpha<1$ 时 B_N 近似的系数 $A_{l,n}$

根据(10)式，当$\alpha<1$时有

$$A_{00}=\frac{\mathrm{tg}^{-1}\alpha}{\alpha}\simeq 1-\frac{\alpha^2}{3}+\frac{\alpha^4}{5}-\frac{\alpha^6}{7}+\cdots=\frac{(i\alpha)^0}{0!}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{2n+1}\alpha^{2n}.$$

同时根据$A_{l,n}$的递推公式(11)应用数学归纳法可以求得当$\alpha<1$时

$$A_{0,l}=\frac{(i\alpha)^l}{l!}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left[\sum_{K=0}^{E\left(\frac{l}{2}\right)}(-1)^K C_{E\left(\frac{l}{2}\right)}^K\frac{[2(l-K)-1]\cdot[2(l-K)-3]\cdots 3\cdot 1}{2n+2(l-K)+1}F_K(l)\right]\cdot\alpha^{2n},$$

其中

$$C_n^K=\frac{n(n-1)\cdots[n-(K-1)]}{K!}\text{为二项式系数，}$$

$$F_K(l)=\begin{cases}1, & \text{当 } K=0,\\ \mathrm{odd}(l)\cdot[\mathrm{odd}(l)-2]\cdots[\mathrm{odd}(l)-2(K-1)], & \text{当 } K\neq 0.\end{cases}$$

$E\left(\frac{l}{2}\right)$表示数$\frac{l}{2}$的整数部分，odd 表示取等于或小于$l$的最大奇数值。同时可求得

$$A_{n,l}=\begin{cases}\dfrac{A_{0,n}}{l!(i\alpha)^l}A(l), & \text{当 } l<n,\\[2ex] \dfrac{A_{0,l}}{n!(i\alpha)^n}A(n), & \text{当 } l\geqslant n.\end{cases}$$

其中

$$A(l)=\sum_{K=0}^{E\left(\frac{l}{2}\right)}(-1)^K C_{E\left(\frac{l}{2}\right)}^K[2(l-K)-1]\cdot[2(l-K)-3]\cdots 3\cdot 1\cdot F_K(l)\cdot(i\alpha)^{2K}.$$

因而有

$$|A_{0,l}|\simeq \mathrm{O}(\alpha^l);\ |A_{n,l}|\simeq \mathrm{O}(\alpha^{|l-n|}).$$

参 考 文 献

[1] G. I. Bell et al., Nuclear Reactor Theory, New York, VNR, 1970.

[2] Г. И. Марчук, Методы расчета ядерных реакторов, Атомиздат, 1961.

[3] USAEC, Reactor Handbook (2nd Edition), Vol. Ⅲ, Part A, Physics, Interscience Publishers, 1962, p. 114.

[4] B. C. Владимиров, Математические задачи односкоростной теории переноса частиц, Изд. Акад. Наук СССР, 1961.

[5] A. M. Weinberg et al., Physical Theory of Neutron Chain Reactors, The University of Chioago Press, 1958.

[6] J. H. Ferziger, The Theory of Neutron Slowing Down in Nuclear Reactors, Cambridge, 1966.

[7] P. F. Zweifel, *J. Appl. Phys.*, **26**, 923 (1956).

[8] USAEC Report: APEX-121, WAPD-114；格拉斯登，原子核反应堆理论纲要，科学出版社，1958.

[9] USAEC Report: GA-1850, WAPD-TM-218, BAW-1230.

[10] H. Amester, *J. Appl. Phys.*, **29**, 623 (1958).

[11] Г. Я. Румянцев, Исследование кристических параметров реакторных систем, 1961, стр. 34.

[12] 谢仲生，原子能，12，1141 (1964).

[13] Г. И. Марчук, Теория и методы расчета ядерных реакторов, Атомиздат, 1960, стр. 25.