

单速一维均匀裸球堆 S_N 模拟的 MATLAB 实现

孙晓博

2010011732

工物系核 01 班

主要参考了杜书华《输运问题的计算机模拟》(湖南科学技术出版社)及胡永明《反应堆物理数值计算方法》(国防科技大学出版社),修改了书中的下标表述法以适应 MATLAB 编程。

1 待解题目

单速一维均匀裸球堆,堆尺寸 $R = 145.5436 \text{ cm}$,外表面为真空边界条件, $\Sigma_t = 0.050/\text{cm}$, $\Sigma_s = 0.030/\text{cm}$, $\nu\Sigma_f = 0.0225/\text{cm}$ 。

2 算法原理

一维球输运微分方程的守恒形式:

$$\frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \Phi(r, \mu) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \Phi(r, \mu) + \Sigma_t \Phi(r, \mu) = S(r) \quad (1)$$

其中 μ 按照 Gauss-Legendre 求积法离散为 μ_{2m} ($m = 1, 2, \dots, N$), 相应的权重为 ω_{2m} ; 半径 r 离散为 r_{2k} ($k = 1, 2, \dots, K$), 其中 K 为所取的网格数。这里可以注意到, 这些离散节点的下标都被人为规定为偶数, 这是因为不论是采取菱形格式还是步函数格式, 计算程序都需要在上述离散点之间及两侧还需要加入若干中间点, 规定节点下标为偶数就是为了在奇数下标处插入这些需要的中间点, 即 $\mu_{2m'+1}$ ($m' = 0, 1, 2, \dots, N$) 和 $r_{2k'+1}$ ($k' = 0, 1, 2, \dots, K$), 其中 $\mu_1 = -1$, $\mu_{2N+1} = 1$; $r_1 = 0$, $r_{2K+1} = R$ 。另外, 采取这套下标规定也是为了适应 MATLAB 语言的特点, 即 MATLAB 中数组首元素下标是 1, 而很多编程语言 (如 C/C++、Java 和 Python) 的数组首元素下标都是 0。

上述离散化操作将 $r - \mu$ 平面分割为若干网格 $\Delta_{k,m} = (r_{2k-1}, r_{2k+1}; \mu_{2m-1}, \mu_{2m+1})$ ($k = 1, 2, \dots, K$, $m = 1, 2, \dots, N$)。为了建立差分方程, 需要在每个网格 $\Delta_{k,m}$ 中对(1)式积分, 其中左边第一项积分为:

$$\begin{aligned} & \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} r^2 dr \int_{\mu_{2m-1}}^{\mu_{2m+1}} d\mu \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \Phi(r, \mu) \\ &= \int_{\mu_{2m-1}}^{\mu_{2m+1}} \mu [r_{2k+1}^2 \Phi(r_{2k+1}, \mu) - r_{2k-1}^2 \Phi(r_{2k-1}, \mu)] d\mu \\ &\approx \mu_{2m} \omega_{2m} [r_{2k+1}^2 \Phi(r_{2k+1}, \mu_{2m}) - r_{2k-1}^2 \Phi(r_{2k-1}, \mu_{2m})] \end{aligned}$$

左边第二项积分为:

$$\begin{aligned} & \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} r^2 dr \int_{\mu_{2m-1}}^{\mu_{2m+1}} d\mu \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \Phi(r, \mu) \\ &= \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} 2r dr \int_{\mu_{2m-1}}^{\mu_{2m+1}} d\mu \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1 - \mu^2}{2} \Phi(r, \mu) \\ &\approx (r_{2k+1}^2 - r_{2k-1}^2) [\alpha_{2m+1} \Phi(r_{2k}, \mu_{2m+1}) - \alpha_{2m-1} \Phi(r_{2k}, \mu_{2m-1})] \end{aligned}$$

其中 $\alpha_{2m+1} = (1 - \mu_{2m+1}^2)/2$

左边第三项积分为:

$$\begin{aligned} & \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} r^2 dr \int_{\mu_{2m-1}}^{\mu_{2m+1}} d\mu \cdot \Sigma_t \Phi(r, \mu) \\ &\approx \Sigma_t \cdot \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} \omega_{2m} \Phi(r, \mu_{2m}) r^2 dr \end{aligned}$$

右边源项同平几何一样处理。由此可将微分方程(1)式写成差分形式：

$$\begin{aligned} & \frac{\mu_{2m}}{V_{2k}} (A_{2k+1} \Phi_{2k+1,2m} - A_{2k-1} \Phi_{2k-1,2m}) \\ & + \frac{A_{2k+1} - A_{2k-1}}{V_{2k}} \cdot \frac{\alpha_{2m+1} \Phi_{2k,2m+1} - \alpha_{2m-1} \Phi_{2k,2m-1}}{\omega_{2m}} + \Sigma_t \Phi_{2k,2m} \\ & = S_{2k} \end{aligned} \quad (2)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{2k+1} &= r_{2k+1}^2 \\ V_{2k} &= \frac{1}{3} (r_{2k+1}^3 - r_{2k-1}^3) \\ \Phi_{2k,2m} &= \frac{1}{V_{2k}} \int_{r_{2k-1}}^{r_{2k+1}} \Phi(r, \mu_{2m}) r^2 dr \\ S_{2k} &= \frac{\Sigma_s + \nu \Sigma_f}{2} \cdot \sum_{m=1}^N (\Phi_{2k,2m} \cdot \omega_{2m}) \end{aligned}$$

边界条件：外边界（球面）真空，内边界（球心）对称

$$\Phi_{2K+1,2m} = 0 \quad (\mu_{2m} < 0) \quad (3)$$

$$\Phi_{1,2m} = \Phi_{1,2N+2-2m} \quad (\mu_{2m} < 0) \quad (4)$$

在求解差分方程(2)前还有一个小问题，即 α_{2m+1} 的值，之前已经给出了理论上的公式

$$\alpha_{2m+1} = \frac{1 - \mu_{2m+1}^2}{2} \quad (5)$$

但实际求解时并不使用该公式，而是使用另一种递推的方法：考虑将差分方程(2)式用到无限介质的情况，这种情况下通量应该与空间位置和角方向无关，因而不应该有净中子流，那么守恒定律要求

$$\frac{\mu}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} r^2 \Phi + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \Phi = 0$$

按照之前建立差分方程的积分方法得到对应于无限介质的差分关系

$$\frac{\mu_{2m}}{V_{2k}} (A_{2k+1} \Phi_{2k+1,2m} - A_{2k-1} \Phi_{2k-1,2m}) + \frac{A_{2k+1} - A_{2k-1}}{V_{2k}} \cdot \frac{\alpha_{2m+1} \Phi_{2k,2m+1} - \alpha_{2m-1} \Phi_{2k,2m-1}}{\omega_{2m}} = 0$$

在没有净中子流的条件下，中子通量应当是处处相等的非零常数，由此可知

$$\frac{\mu_{2m}}{V_{2k}} (A_{2k+1} - A_{2k-1}) + \frac{A_{2k+1} - A_{2k-1}}{V_{2k}} \cdot \frac{\alpha_{2m+1} - \alpha_{2m-1}}{\omega_{2m}} = 0$$

于是得到递推关系式

$$\alpha_{2m+1} - \alpha_{2m-1} = -\mu_{2m} \omega_{2m} \quad (6)$$

采用理论公式(5)式可算出 $\alpha_1 = 0$ ，除了这一点之外，其他所有的 α_i 都不用(5)式。这主要是守恒原则的要求，即输运方程中任何函数在网格内的积分必须使用同样的积分方法，既然其它函数使用的都是 Gauss-Legendre 求积法（属于数值求积方法），那么 α_i 也必须使用 Gauss-Legendre 求积法，而不能使用精确的理论求积公式。更进一步的计算可以看出，除了 $\alpha_1 = \alpha_{2N+1} = 0$ 这两点之外，用递推公式(6)和理论公式(5)算出的 α_i 都不一致。

为求解差分方程，还需要引入若干方程，其中包括菱形关系式

$$\Phi_{2k,2m} = \frac{1}{2} (\Phi_{2k+1,2m} + \Phi_{2k-1,2m}) = \frac{1}{2} (\Phi_{2k,2m+1} + \Phi_{2k,2m-1}) \quad (7)$$

另外还需要 $\mu = -1$ 处的角度边界条件，将 $\mu = -1$ 代入输运微分方程(1)得到

$$-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \Phi(r, -1) + \frac{2}{r} \Phi(r, -1) + \Sigma_t \Phi(r, -1) = S(r)$$

相应的差分方程 ($\mu_1 = -1$) 为

$$\frac{A_{2k+1} - A_{2k-1}}{V_{2k}} \Phi_{2k,1} - \frac{1}{V_{2k}} (A_{2k+1} \Phi_{2k+1,1} - A_{2k-1} \Phi_{2k-1,1}) + \Sigma_t \Phi_{2k,1} = S_{2k} \quad (8)$$

$$k = 1, 2, \dots, K$$

又知外表面真空边界条件 $\Phi_{2K+1,1} = 0$ ，再加上菱形关系式就可以解出 $\Phi_{2k,1}$ ，以此作为角度方向边界的通量初值。

以上已经做好了全部的准备，可以采用如下步骤计算各点通量：

- (1) 按照之前的公式计算 μ_m 、 ω_{2m} 、 r_k 、 A_{2k+1} 、 V_{2k} 和 α_{2m+1} ，给定迭代初值 $\Phi_{2k,2m}^{(0)}$
- (2) 计算第 i 轮迭代的源项

$$S_{2k}^{(i)} = \frac{\Sigma_s + \nu \Sigma_f}{2} \cdot \sum_{m=1}^N \left(\Phi_{2k,2m}^{(i)} \cdot \omega_{2m} \right) \quad (9)$$

- (3) 计算 $\mu = -1$ 的角边界通量：根据菱形关系式可得

$$\Phi_{2k-1,1}^{(i+1)} = 2\Phi_{2k,1}^{(i+1)} - \Phi_{2k+1,1}^{(i+1)} \quad (10)$$

代入(8)式可得

$$\Phi_{2k,1}^{(i+1)} = \frac{V_{2k} S_{2k}^{(i)} + (A_{2k+1} + A_{2k-1}) \Phi_{2k+1,1}^{(i+1)}}{A_{2k+1} + A_{2k-1} + \Sigma_t V_{2k}} \quad (11)$$

$$k = K, K-1, \dots, 2, 1$$

由以上两式，再加上 $\Phi_{2K+1,1} = 0$ 的边界条件就可以算出全部的 $\Phi_{2k+1,1}$ 和 $\Phi_{2k,1}$ ，以此作为每次迭代前的角边界通量。

- (4) 对于 $\mu_{2m} < 0$ ：根据菱形关系式可得

$$\Phi_{2k-1,2m}^{(i+1)} = 2\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} - \Phi_{2k+1,2m}^{(i+1)} \quad (12)$$

$$\Phi_{2k,2m+1}^{(i+1)} = 2\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} - \Phi_{2k,2m-1}^{(i+1)} \quad (13)$$

代入(2)式可得

$$\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} = \frac{V_{2k} S_{2k}^{(i)} + E_{2k,2m} \Phi_{2k+1,2m}^{(i+1)} + G_{2k,2m} \Phi_{2k,2m-1}^{(i+1)}}{E_{2k,2m} + G_{2k,2m} + \Sigma_t V_{2k}} \quad (14)$$

$$k = K, K-1, \dots, 2, 1$$

$$m = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2}$$

其中

$$E_{2k,2m} = |\mu_{2m}| \cdot (A_{2k+1} + A_{2k-1})$$

$$G_{2k,2m} = (A_{2k+1} - A_{2k-1}) \cdot \frac{\alpha_{2m+1} + \alpha_{2m-1}}{\omega_{2m}}$$

对于 $\mu_{2m} < 0$ 的情况，已知外表面的边界条件 $\Phi_{2K+1,2m} = 0$ ，再加上之前算出 $\mu = -1$ 的角度边界条件 $\Phi_{k,1}$ ，这就是 $\mu < 0$ 的迭代初项，之后按照(12)式、(13)式和(14)式以 $k = K, K-1, \dots, 2, 1$ 和 $m = 1, 2, \dots, N/2$ 的顺序即可求出 $\mu < 0$ 的所有节点的值。

- (5) 对于 $\mu_{2m} > 0$ ：根据菱形关系式可得

$$\Phi_{2k+1,2m}^{(i+1)} = 2\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} - \Phi_{2k-1,2m}^{(i+1)} \quad (15)$$

$$\Phi_{2k,2m+1}^{(i+1)} = 2\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} - \Phi_{2k,2m-1}^{(i+1)} \quad (16)$$

代入(2)式可得

$$\Phi_{2k,2m}^{(i+1)} = \frac{V_{2k} S_{2k}^{(i)} + E_{2k,2m} \Phi_{2k-1,2m}^{(i+1)} + G_{2k,2m} \Phi_{2k,2m-1}^{(i+1)}}{E_{2k,2m} + G_{2k,2m} + \Sigma_t V_{2k}} \quad (17)$$

$$k = 1, 2, \dots, K-1, K$$

$$m = \frac{N}{2} + 1, \dots, N-1, N$$

对于 $\mu_{2m} > 0$ 的情况，已知球心处边界条件，再加上之前通过递推得到的 $\mu = 0$ 处边界通量，这就是 $\mu > 0$ 的迭代初项，之后按照(15)式、(16)式和(17)式以 $k = 1, 2, \dots, K$ 和 $m = N/2 + 1, \dots, N - 1, N$ 的顺序即可求出 $\mu > 0$ 的所有节点的值。

(6) 比较前后迭代结果，若已满足误差要求则认为完成求解，输出结果即可。

作为简单的示例， $N = 4$ 、 $K = 4$ 时的网格节点迭代求解顺序如图1所示。

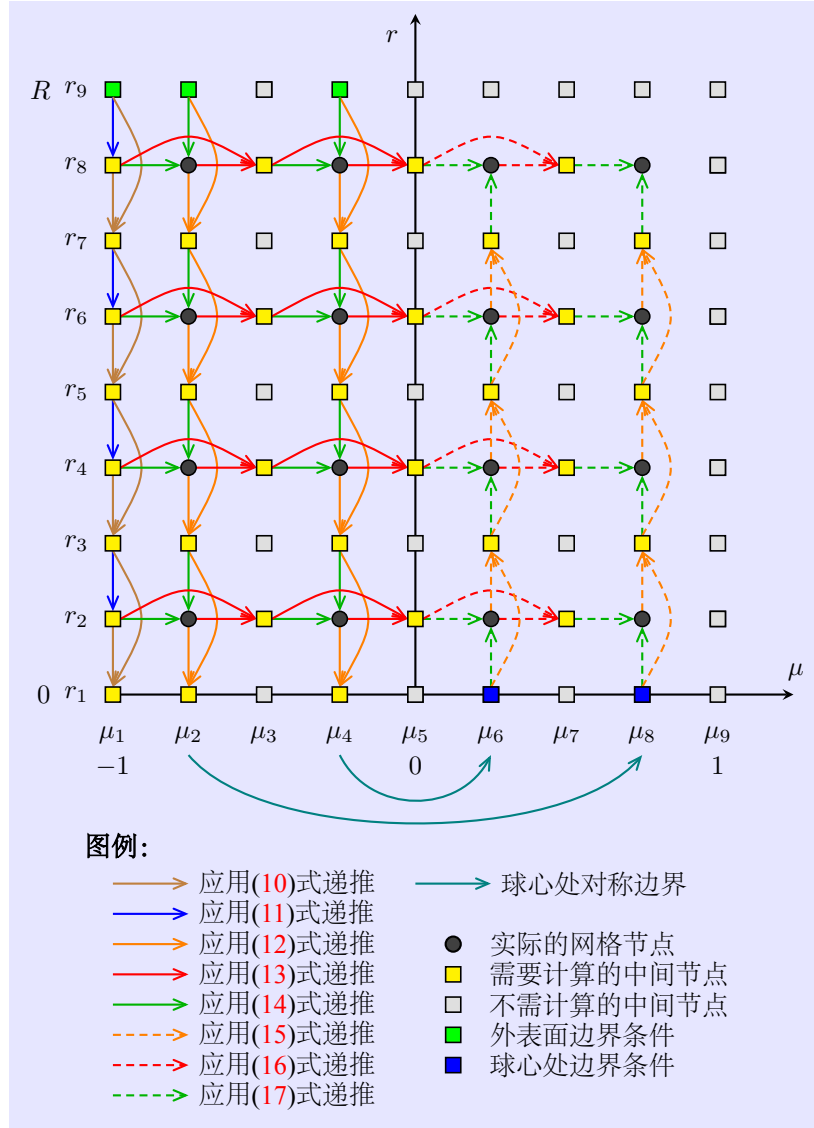


图1 迭代求解顺序 ($N = 4$, $K = 4$)

3 求解结果

程序取 $N = 8$, $K = 400$, 迭代中有效增值系数 k_{eff} 相对误差上限为 10^{-8} 。

程序共进行 119 轮循环，耗时 3.71s，编程测试平台：Intel® Core™ i5-2410M CPU @ 2.30GHz (Sandy Bridge)、8GB RAM (DDR3-1333MHz)、Windows 7 Enterprise (64-bit)、MATLAB R2012b (64-bit)。

计算得到所有节点的平均有效增值系数为 1.0000590，其中最大有效增值系数为 1.0000591，最小有效增值系数为 1.0000590。

按照杜书华《输运问题的计算机模拟》一书中的理论，本题的截面数据相当于 $C = (\Sigma_s + \nu \Sigma_f) / \Sigma_t = 1.05$ ，本题的半径相当于 $R = 7.277180\lambda$ (其中 $\lambda = 1/\Sigma_t$ 为中子自由程)，查阅《输运问题的计算机模拟》第 150 页表 4.5.5 给出的 $C = 1.05$ 时的临界半径值，可知本题所给的条件与临界条件 ($R = 7.2771817945\lambda$) 非常接近，因此算出有效增值系数非常接近于 1 是合理的。

以《输运问题的计算机模拟》第 151 页表 4.5.7 给出的 $C = 1.05$ 时的中子通量分布为标准值，对程序计算结果做校验，结果如表1所示。

表 1 中子通量分布校验结果（球心通量归一）

	校验点 r/R			
	0.25	0.50	0.75	1.00
计算值	0.91751509	0.69207565	0.38874946	0.07682279
标准值	0.91612699	0.68954766	0.36621118	0.07449726

计算得到的时中子注量率分布如图2所示。

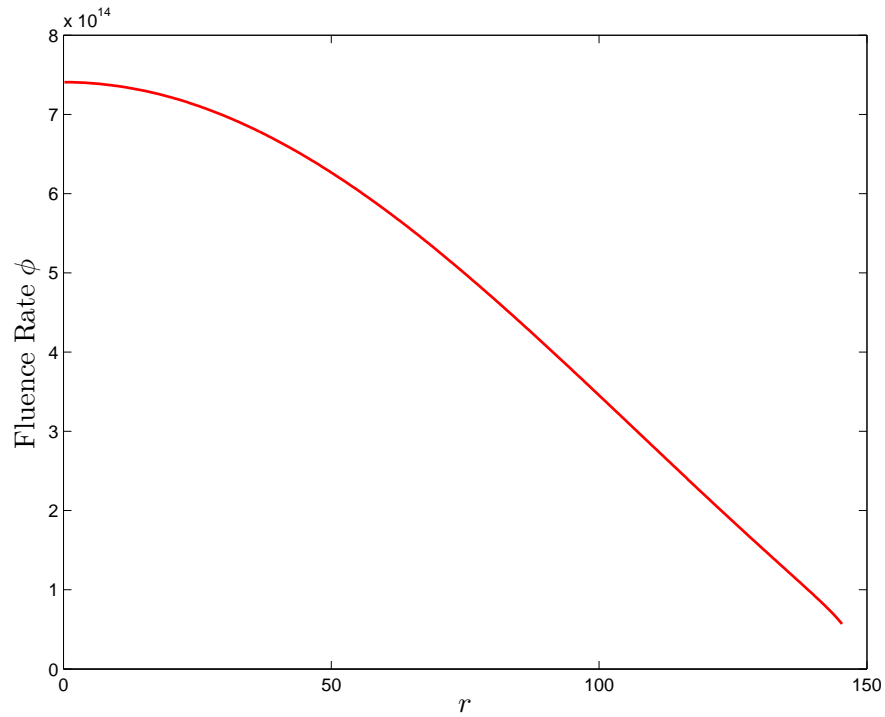


图 2 中子注量率分布 ($N = 8, K = 400$)