单速一维均匀裸球堆 S_N 模拟的 MATLAB 实现

sunxb10

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:

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

其中 μ 按照 Gauss-Legendre 求积法离散为 μ_{2m} $(m = 1, 2, \cdots, N)$,相应的权重为 ω_{2m};半径 r 离散为 r_{2k} $(k = 1, 2, \cdots, K)$,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 $\mu_{2m'+1}$ $(m' = 0, 1, 2, \cdots, N)$ 和 $r_{2k'+1}$ $(k' = 0, 1, 2\cdots, K)$,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 $\Delta_{k,m} = (r_{2k-1}, r_{2k+1}; \mu_{2m-1}, \mu_{2m+1})$ $(k = 1, 2, \cdots, K$, $m = 1, 2, \cdots, N)$。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:

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

左边第二项积分为:

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

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

左边第三项积分为:

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

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:

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

其中

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

边界条件:外边界(球面)真空,内边界(球心)对称

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

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

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

$$\alpha_{2m+1}=\frac{1-\mu_{2m+1}^2}{2}\tag{5}$$

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

$$\alpha_{2m+1}-\alpha_{2m-1}=-\mu_{2m}\omega_{2m}\tag{6}$$

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

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

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

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

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 $\Phi^{(0)}_{2k,2m}$

（2）计算第 i 轮迭代的源项

$$S^{(i)}_{2k}=\frac{\Sigma_s+\nu\Sigma_f}{2}\cdot\sum_{m=1}^{N}\left(\Phi^{(i)}_{2k,2m}\cdot\omega_{2m}\right) \tag{9}$$

（3）计算 $\mu=-1$ 的角边界通量：根据菱形关系式可得

$$\Phi^{(i+1)}_{2k-1,1}=2\Phi^{(i+1)}_{2k,1}-\Phi^{(i+1)}_{2k+1,1} \tag{10}$$

代入(8)式可得

$$\Phi^{(i+1)}_{2k,1}=\frac{V_{2k}S^{(i)}_{2k}+(A_{2k+1}+A_{2k-1})\Phi^{(i+1)}_{2k+1,1}}{A_{2k+1}+A_{2k-1}+\Sigma_tV_{2k}} \tag{11}$$
$$k=K,K-1,\cdots,2,1$$

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

$$\Phi^{(i+1)}_{2k-1,2m}=2\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}-\Phi^{(i+1)}_{2k+1,2m} \tag{12}$$
$$\Phi^{(i+1)}_{2k,2m+1}=2\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}-\Phi^{(i+1)}_{2k,2m-1} \tag{13}$$

代入(2)式可得

$$\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}=\frac{V_{2k}S^{(i)}_{2k}+E_{2k,2m}\Phi^{(i+1)}_{2k+1,2m}+G_{2k,2m}\Phi^{(i+1)}_{2k,2m-1}}{E_{2k,2m}+G_{2k,2m}+\Sigma_tV_{2k}} \tag{14}$$
$$k=K,K-1,\cdots,2,1$$
$$m=1,2,\cdots,\frac{N}{2}-1,\frac{N}{2}$$

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 $k=K,K-1,\cdots,2,1$ 和 $m=1,2,\cdots,N/2$ 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

$$\Phi^{(i+1)}_{2k+1,2m}=2\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}-\Phi^{(i+1)}_{2k-1,2m} \tag{15}$$
$$\Phi^{(i+1)}_{2k,2m+1}=2\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}-\Phi^{(i+1)}_{2k,2m-1} \tag{16}$$

代入(2)式可得

$$\Phi^{(i+1)}_{2k,2m}=\frac{V_{2k}S^{(i)}_{2k}+E_{2k,2m}\Phi^{(i+1)}_{2k-1,2m}+G_{2k,2m}\Phi^{(i+1)}_{2k,2m-1}}{E_{2k,2m}+G_{2k,2m}+\Sigma_tV_{2k}} \tag{17}$$
$$k=1,2,\cdots,K-1,K$$
$$m=\frac{N}{2}+1,\cdots,N-1,N$$

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 $k = 1, 2, \cdots, K$ 和 $m = N/2+1, \cdots, N-1, N$ 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。

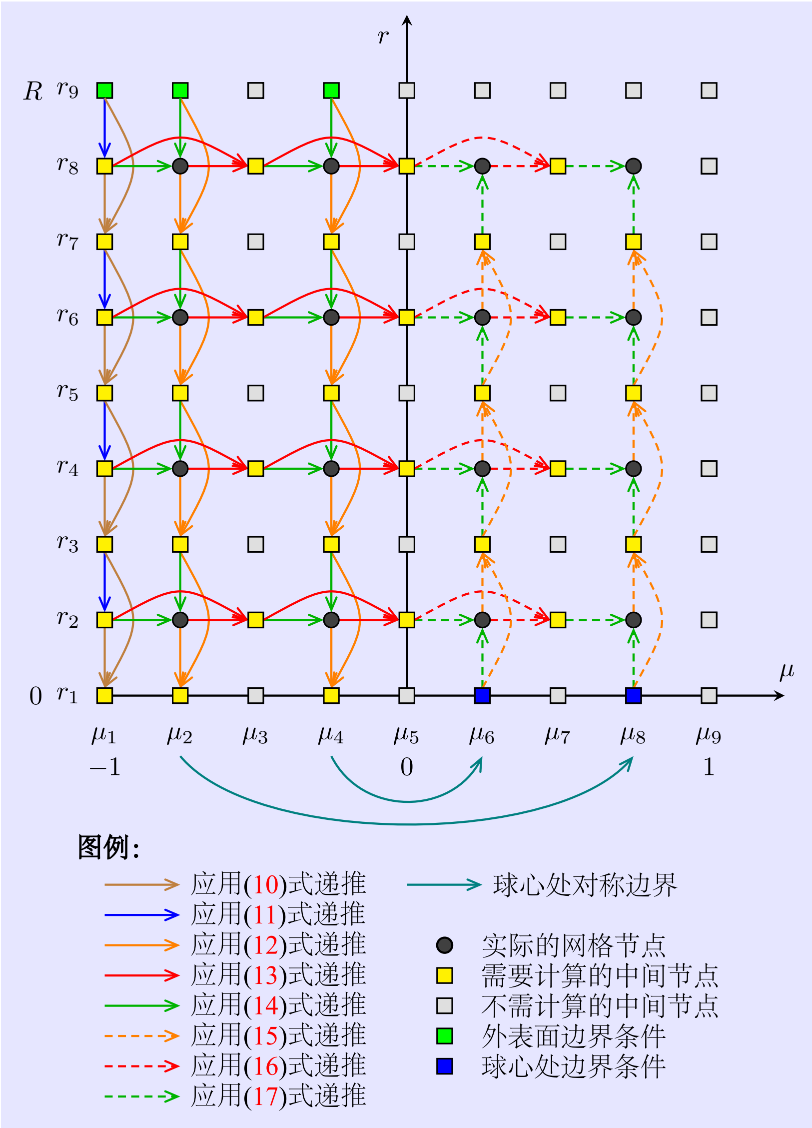

图 1　迭代求解顺序（$N = 4$，$K = 4$）

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 3.71 s，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殖系数为 1.0000590，其中最大有效增殖系数为 1.0000591，最小有效增殖系数为 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，因此算出有效增殖系数非常接近于 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。

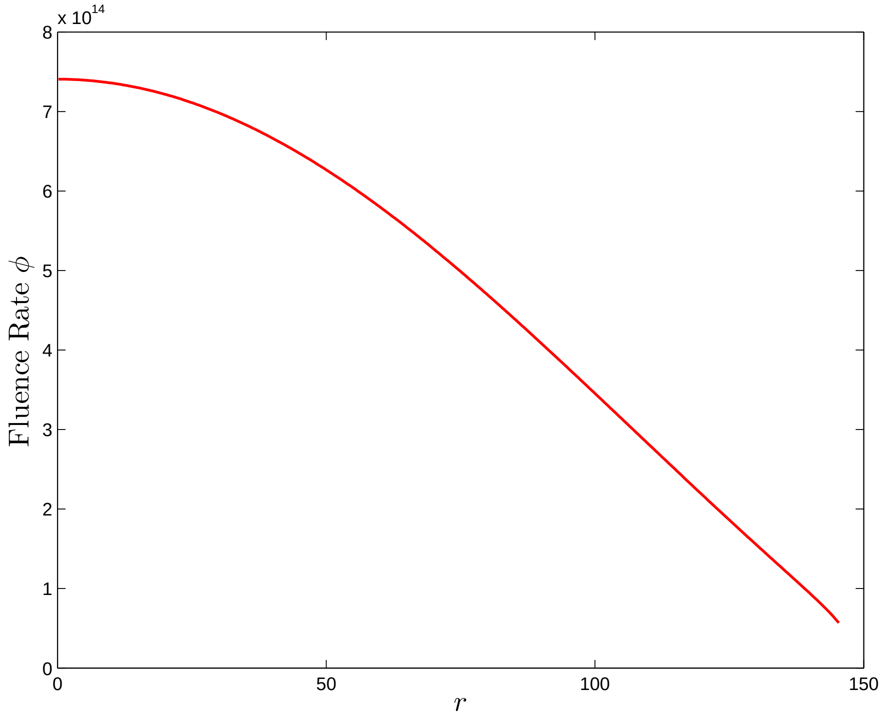

图 2　中子注量率分布（$N = 8$，$K = 400$）