



国防科技图书出版基金

粒子输运问题的 数值模拟

Numerical Simulation on
Particle Transport

王尚武 张树发 马燕云 编著



国防工业出版社

National Defense Industry Press



国防科技图书出版基金

粒子输运问题 的数值模拟

Numerical Simulation on
Particle Transport

王尚武 张树发 马燕云 编著

国防工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目(CIP)数据

粒子输运问题的数值模拟/王尚武,张树发,马燕云编
著. —北京:国防工业出版社,2013.8

ISBN 978-7-118-08963-9

I. ①粒... II. ①王... ②张... ③马... III. ①粒子
—输运理论—数值模拟 IV. ①O572.2

中国版本图书馆CIP数据核字(2013)第179253号

※

国防工业出版社 出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

国防工业出版社印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 710×1000 1/16 印张 22¼ 字数 450千字

2013年8月第1版第1次印刷 印数 1—2500册 定价 76.00元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

致 读 者

本书由国防科技图书出版基金资助出版。

国防科技图书出版工作是国防科技事业的一个重要方面。优秀的国防科技图书既是国防科技成果的一部分,又是国防科技水平的重要标志。为了促进国防科技和武器装备建设事业的发展,加强社会主义物质文明和精神文明建设,培养优秀科技人才,确保国防科技优秀图书的出版,原国防科工委于1988年初决定每年拨出专款,设立国防科技图书出版基金,成立评审委员会,扶持、审定出版国防科技优秀图书。

国防科技图书出版基金资助的对象是:

1. 在国防科学技术领域中,学术水平高,内容有创见,在学科上居领先地位的基础科学理论图书;在工程技术理论方面有突破的应用科学专著。
2. 学术思想新颖,内容具体、实用,对国防科技和武器装备发展具有较大推动作用的专著;密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的高新技术内容的专著。
3. 有重要发展前景和有重大开拓使用价值,密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的新工艺、新材料内容的专著。
4. 填补目前我国科技领域空白并具有军事应用前景的薄弱学科和边缘学科的科技图书。

国防科技图书出版基金评审委员会在总装备部的领导下开展工作,负责掌握出版基金的使用方向,评审受理的图书选题,决定资助的图书选题和资助金额,以及决定中断或取消资助等。经评审给予资助的图书,由总装备部国防工业出版社列选出版。

国防科技事业已经取得了举世瞩目的成就。国防科技图书承担着记载和弘扬这些成就,积累和传播科技知识的使命。在改革开放的新形势下,原国防科工委率先设立出版基金,扶持出版科技图书,这是一项具有深远意义的创举。此举势必促使国防科技图书的出版随着国防科技事业的发展更加兴旺。

设立出版基金是一件新生事物,是对出版工作的一项改革。因而,评审工作需要不断地摸索、认真地总结和及时地改进,这样,才能使有限的基金发挥出巨大的效能。评审工作更需要国防科技和武器装备建设战线广大科技工作者、专家、教授,以及社会各界朋友的热情支持。

让我们携起手来,为祖国昌盛、科技腾飞、出版繁荣而共同奋斗!

国防科技图书出版基金
评审委员会

国防科技图书出版基金 第七届评审委员会组成人员

主任委员 潘银喜

副主任委员 吴有生 傅兴男 杨崇新

秘书长 杨崇新

副秘书长 邢海鹰 谢晓阳

委员 才鸿年 马伟明 王小谟 王群书
(按姓氏笔画排序)

甘茂治 甘晓华 卢秉恒 巩水利

刘泽金 孙秀冬 陆军 芮筱亭

李言荣 李德仁 李德毅 杨伟

肖志力 吴宏鑫 张文栋 张信威

陈良惠 房建成 赵万生 赵凤起

郭云飞 唐志共 陶西平 韩祖南

傅惠民 魏炳波

前 言

粒子输运理论研究大量微观粒子(如原子、离子、电子、中子、 γ 射线、X射线)在介质中的输运过程和演化规律。粒子输运问题的数值模拟则是采用数值方法、利用计算机模拟来研究微观粒子在介质中的分布函数随时间变化的行为,这项工作是核武器物理、核反应堆物理、激光核聚变、高温等离子体物理、X光激光物理、磁约束核聚变和惯性约束核聚变研究中不可缺少的重要工作。

作者多年为研究生讲授“粒子输运问题的数值模拟”课程,本书是在课程讲义的基础上加工改编而成的。书中系统总结了作者长期在粒子输运问题数值模拟领域的教学实践经验和科研工作成果,是作者多年教学科研工作的结晶。

本书分为6章。

第1章介绍粒子输运的总体理论。内容包括粒子输运过程的3种不同层次描述,粒子输运方程的一般形式,粒子输运方程和刘维方程的关系,粒子二体碰撞动力学,稀薄气体分子输运的 Boltzmann 方程, Boltzmann 碰撞项的性质和流体力学方程组, Boltzmann 碰撞项向 Fokker - Planck 碰撞项的过渡。

第2章介绍等离子体中的带电粒子输运理论。详细讨论了带电粒子在背景等离子体介质中的输运问题,着重介绍了无碰撞输运 Vlasov 方程及考虑二体碰撞的 Fokker - Planck 方程和 Fokker - Planck 碰撞项的具体形式, Fokker - Planck - Landau 碰撞项的性质与磁流体力学方程组,磁流体力学变量的 Lorentz 变换,带电粒子在等离子体中小角度库仑碰撞能量损失率的计算。最后给出了 α 粒子在背景等离子体中输运 Fokker - Planck 方程的有限元数值解,模拟计算了 α 粒子与电子和离子组分库仑碰撞的能量沉积率随时空的变化、 α 粒子的能谱随时间的变化。

第3章介绍辐射输运理论。内容包括光子与物质的相互作用,流体静止坐标系下的辐射输运方程;完全非热动平衡状态下物质自发辐射功率密度、总线性吸收系数和物质净发射光能的计算,束缚电子在量子态上占据概率的动理学方程;部分局域热动平衡状态下物质的净辐射功率密度、辐射不透明度和平均离子模型;部分局域热动平衡条件下辐射输运方程的数值解法,辐射能流的灰体近似和多群近似;运动介质中的辐射输运方程,不同参考系下辐射量的 Lorentz 变换和辐射输运方程的协变性等。

第4章介绍辐射流体力学方程组。内容包括描述流体运动的 Euler 观点和 Lagrange 观点;实验室坐标系下的流体力学变量和辐射场物理量;两种观点下的相

对论和非相对论辐射流体力学方程组;曲线坐标系下 Lagrange 空间中流体力学量的梯度和散度计算。讨论了人为黏性取法、物质状态方程、时空步长选择、差分格式的稳定性 and 计算检验等有关辐射流体力学方程组数值求解必须面临的问题。最后以一维球对称几何下 Lagrange 形式的辐射流体力学方程组的数值解法为例,详细介绍了方程组的离散格式、数值求解方法和计算步骤,并给出了检验差分格式计算精度和格式稳定性的方法。

第 5 章介绍中子输运与燃耗。内容包括运动介质中的中子输运方程,靶核核数变化方程,输运近似和多群中子输运方程,中子输运方程在各种坐标系下的具体形式,中子输运方程和核数变化方程的数值解法与有关计算的几个问题。详细讨论了多群中子输运方程和核数变化方程的离散格式与数值求解技术,给出了一维中子输运方程和核数变化方程的差分格式与计算方案。讨论了负中子通量的处理、差分格式的稳定性 and 收敛条件,给出了用中子数守恒来检验评估数值模拟精度的方法。最后介绍了几个物理量的数值计算格式和中子群常数的制作方法。

第 6 章讨论了中子扩散理论。首先介绍了多群中子扩散方程的数值求解差分格式和边界条件处理。在此基础上,讨论了提高中子扩散方程计算精度的各种理论和方法,包括半经验的改进扩散理论、渐近扩散理论、限流(渐近)扩散理论以及计及散射各向异性的改进扩散理论。这些理论详细介绍了改进扩散系数计算精度的多种方法,并对外推长度的选取也作了深入讨论。给出了外推长度和扩散系数的实用计算公式。最后介绍了采用人造精确解检验多群中子扩散方程差分格式数学精度的计算方法。

本书具有如下特点。

(1) 推导详尽,通俗易懂。本书从第一原理出发给出了各类粒子输运方程及其涉及的粒子与物质相互作用参数计算公式的详细推导过程,给出了各类粒子输运方程和辐射流体力学方程组数值求解的离散格式、稳定性条件的细致判据、离散格式精度的计算检验方法,过程详细,通俗易懂。

(2) 内容全面,自成体系。本书全面介绍了带电粒子输运的 Fokker - Planck 方程、辐射(光子)输运方程、辐射流体力学方程组、运动介质中的中子输运方程和核素燃耗方程的建立和数值求解方法,结合实际问题给出了数值计算所采用的离散格式和计算实例。为配合数值计算需要,对输运方程中涉及的高温介质辐射不透明度、中子与各种核材料的多群常数的计算与制作也给出了简单适用的算法,使该书自成体系。

(3) 注重工程应用,突出数值方法。本书考虑了背景介质的流体力学运动对粒子输运的影响,建立了运动介质中的粒子输运方程,研究了介质原子核的燃耗对中子输运的影响,提出了辐射流体力学方程组与粒子输运方程的耦合数值求解方法,并给出了计算实例。所介绍的计算方法和数值模拟技术对于工程实际问题的

处理具有示范指导作用。

本书面向工程实际需要,突出数值模拟方法,强化针对性与适用性,内容全面而自成体系,是一本特色明显、适用性强、能够引领初学者迅速进入相关领域的入门指导书,对从事相关研究领域数值模拟工作的读者也具有重要参考价值。

尽管作者在写作过程中兢兢业业,殚精竭虑,但囿于作者的学识和水平,难免会有不当甚至错误之处,望各位读者不吝指教。

作者感谢资助本书出版的国防科技图书出版基金评审委员会和国防科技大学科研部,感谢国防工业出版社领导的关怀和辛俊颖编辑付出的辛勤努力,没有他(她)们的鼎力协助,本书不可能顺利出版。

谨以此书祝贺国防科技大学 60 华诞。

编著者

2013 年 5 月 20 日于长沙

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 粒子输运理论研究的内容、目的和方法	1
1.2 粒子输运理论的应用领域	1
1.3 粒子输运理论的发展简史	2
1.4 粒子输运过程的 3 种不同层次描述	2
1.4.1 微观层次的描述	3
1.4.2 运动论层次的描述	8
1.4.3 流体力学层次的描述	13
1.4.4 粒子输运方程和刘维方程的关系(BBKG Hierarchy)	19
1.5 具有相互作用势的两粒子间的二体弹性碰撞动力学(微分 散射截面)	23
1.6 描述稀薄气体分子输运的 Boltzmann 方程	30
1.6.1 Boltzmann 碰撞项	30
1.6.2 Boltzmann 碰撞项的性质和流体力学方程组	33
1.7 Boltzmann 碰撞项向 Fokker - Planck 碰撞项的过渡	41
第 2 章 等离子体中带电粒子输运理论	48
2.1 引言	48
2.2 等离子体中带电粒子的库仑屏蔽势	49
2.3 无碰撞等离子体中带电粒子的输运方程——Vlasov 方程	53
2.4 带电粒子输运的 Fokker - Planck 方程	57
2.5 背景粒子处于局域热力学平衡态时的 Fokker - Planck 方程 的具体形式	62
2.6 Fokker - Planck - Landau 方程及其性质	69
2.6.1 Fokker - Planck - Landau 碰撞项	69
2.6.2 Fokker - Planck - Landau 碰撞项性质与磁流体力学 方程组	76
2.6.3 磁流体力学变量的 Lorentz 变换	87

2.7	带电粒子在等离子体中小角度库仑碰撞的能量损失率	93
2.8	α 粒子输运 Fokker - Planck 方程的有限元数值解	98
2.8.1	α 粒子输运的 Fokker - Planck 方程	99
2.8.2	时间变量的离散和速度变量的多群处理	100
2.8.3	对空间变量和角度变量的有限元处理	101
2.8.4	有限元方程的总体合成与线性代数方程组的求解	102
2.8.5	α 粒子在背景等离子体中单位体积内的能量 沉积率计算	104
第3章	辐射输运理论	109
3.1	描述辐射场的一些物理量	109
3.2	光子与物质相互作用的描述	112
3.3	介质不动时的辐射输运方程(流体静止坐标系中的辐射 输运方程)	115
3.4	完全非热动平衡状态下物质自发辐射功率密度和总线性 吸收系数的计算	117
3.4.1	物质与辐射场构成的各种系统	118
3.4.2	完全非热动平衡状态下物质的自发辐射功率密度 和总线性吸收系数的计算	119
3.4.3	完全非热动平衡下物质净发射光能的计算	133
3.4.4	完全非热动平衡状态下束缚电子在量子态上占据概率 的动理学方程	137
3.5	部分局域热动平衡状态下物质自发辐射功率密度和总线性 吸收系数的计算	142
3.5.1	部分局域热动平衡下物质的净辐射功率密度	142
3.5.2	部分局域热动平衡下的辐射不透明度的计算, 平均离子模型	147
3.6	光子散射宏观转移截面的计算	153
3.7	部分局域热动平衡条件下辐射输运方程的解	155
3.7.1	辐射输运方程的 $P-1$ 近似解	155
3.7.2	一维空间几何下辐射输运方程的解	159
3.7.3	辐射能流的灰体近似	170
3.7.4	辐射能流的多群近似	171
3.8	考虑介质运动时实验室坐标系下的辐射量和辐射输运方程	173
3.8.1	辐射量的 Lorentz 变换	173

3.8.2	Lorentz 变换不变量	176
3.8.3	辐射输运方程的协变性	177
3.8.4	部分局域热动平衡下实验室坐标系中的辐射输运 方程	179
3.8.5	实验室坐标系中辐射量与流体静止坐标系中辐射量 之间的关系	182
第 4 章 辐射流体力学方程组		184
4.1	描写流体运动的两种方法	184
4.1.1	描述流体流动的 Euler 方法和 Lagrange 方法	184
4.1.2	积分变换公式	187
4.2	实验室坐标系中的流体力学变量和辐射场物理量	189
4.2.1	描述流体粒子的运动论理论和流体力学变量	189
4.2.2	实验室系中辐射量与流体静止系中辐射量 的关系	192
4.3	Euler 观点下的相对论辐射流体力学方程组	194
4.3.1	Euler 观点下的相对论辐射流体力学方程组及其随体 微商形式	194
4.3.2	描述高温等离子体流体运动的三温模型	205
4.4	Lagrange 观点下的辐射流体力学方程组	210
4.4.1	辐射流体力学方程组从 Euler 观点到 Lagrange 观点 的转化	210
4.4.2	Lagrange 坐标空间矢量(张量)散度的计算	211
4.5	曲线坐标系下 Lagrange 空间梯度和散度计算	215
4.5.1	球坐标系下标量梯度、矢量和张量的散度	215
4.5.2	柱坐标系下标量的梯度、矢量和张量的散度	219
4.6	一维球对称几何下辐射流体力学方程组的 Lagrange 形式	221
4.7	人为黏性 q 的取法	223
4.8	状态参数的拟合公式	224
4.9	一维辐射流体力学方程组的数值解法	225
4.9.1	方程组的形式与定解条件	225
4.9.2	差分格式	226
4.9.3	差分格式的稳定性条件	231
4.10	计算检验	232

第5章 中子输运和燃耗	236
5.1 中子输运方程和核数变化方程	237
5.1.1 基本概念和物理量	237
5.1.2 运动介质内的中子输运方程	244
5.1.3 靶核核数的变化方程(核的燃耗方程)	248
5.2 输运近似和多群中子输运方程	251
5.2.1 简单输运近似	251
5.2.2 简单输运近似下的多群中子输运方程	256
5.2.3 扩展输运近似	257
5.2.4 输运方程在各种坐标系下的具体形式	259
5.3 中子输运方程和核数变化方程的数值解	267
5.3.1 一维中子输运方程的差分格式	267
5.3.2 负通量的处理与收敛条件	274
5.3.3 核数方程的差分格式	276
5.4 有关计算的几个问题	277
5.4.1 中子数守恒检验	277
5.4.2 中子群常数的平均方法	281
5.4.3 几个物理量的计算	284
第6章 中子扩散理论	288
6.1 中子扩散方程	288
6.1.1 多群中子扩散方程	288
6.1.2 定解条件	290
6.1.3 差分方程	292
6.2 半经验的改进扩散理论	298
6.2.1 扩散方程与输运方程的关系	298
6.2.2 扩散系数的选择	299
6.2.3 限流问题	301
6.2.4 外推长度	303
6.2.5 表面曲率	303
6.3 渐近扩散理论	304
6.3.1 中子扩散方程和扩散系数	304
6.3.2 外推边界条件	309
6.4 限流(渐近)扩散理论	312

6.5	扩散系数和外推长度的实用计算公式	314
6.6	计及散射各向异性的改进扩散理论	315
6.6.1	各向异性情况下扩散系数的计算公式	315
6.6.2	各向异性情况下计算扩散系数的近似方法	319
6.7	人造精确解(检验差分格式数学精度的检验)	324
6.7.1	动态问题	324
6.7.2	K 本征值问题	325
附录	电磁单位制	327
参考文献		334

Contents

Chapter 1 Introduction	1
1.1 The contents, objectives and methods of particle's transport theory	1
1.2 The application fields of particle's transport theory	1
1.3 The brief history of transport theory development	2
1.4 Three different level descriptions of particle's transport process	2
1.4.1 Microscopic level	3
1.4.2 Kinetic theory level	8
1.4.3 Hydrodynamic level	13
1.4.4 BBKGY Hierarchy	19
1.5 The dynamics of two – body collision with interaction potential (differential scattering cross section)	23
1.6 The Boltzmann equation for rarefied gas transport	30
1.6.1 The Boltzmann collision term	30
1.6.2 The properties of Boltzmann collision term and equations of hydrodynamics	33
1.7 The Fokker – Planck equation derived from Boltzmann equation	41
Chapter 2 The Transport Equation of Charged Particles in Plasma	48
2.1 Introduction	48
2.2 The “Debye – shielded” Coulomb potential of a charged particle in plasma	49
2.3 Collisionless transport of charged particles in plasma; Vlasov equation	53
2.4 Fokker – Planck equation of charged particle transport	57
2.5 Fokker – Planck equation with background particles at local thermal equilibrium state	62
2.6 Fokker – Planck – Landau equation and its properties	69

2.6.1	Fokker – Planck – Landau collision term	69
2.6.2	The properties of Fokker – Planck – Landau collision term and the equations of magnetohydrodynamics	76
2.6.3	The magnetohydrodynamics variables and their Lorentz transformations	87
2.7	The energy loss rate of charged particles transporting in plasma due to small angle Coulomb collisions	93
2.8	The numerical solution to Fokker – Planck equation of α particles in plasma by Finite Element Method	98
2.8.1	The Fokker – Planck transport equation of α particles	98
2.8.2	Time discrete and multi – group treatment to the speed of α particles	100
2.8.3	Finite element treatments on space and direction variables	101
2.8.4	The assembly and solution of FEM equations	102
2.8.5	The calculation of the energy deposition rate of α particles in unit volume plasma	104
Chapter 3	Radiation Transport Theory	109
3.1	The physical quantities of radiation fields	109
3.2	The interaction of photons with matter	112
3.3	Radiation transport equation in stationary media	115
3.4	The calculation of spontaneous emission power density and total coefficient of linear absorption under complete non – equilibrium state	117
3.4.1	Various systems constituted by matter particles and photons	118
3.4.2	Spontaneous emission power density and linear absorption coefficient	119
3.4.3	The net light energy emitted by high temperature plasma	133
3.4.4	The kinematical equation of occupation probabilities of electrons in quantum states	137
3.5	The calculation of spontaneous emission power density and total coefficient of linear absorption under partial local thermal	

equilibrium state	142
3.5.1 The net emission power density by high temperature plasma under partial LTE state	142
3.5.2 The opacity of matter under partial LTE state and average atom model	147
3.6 The macroscopic transfer cross section of photons due to scattering with matter particles	153
3.7 The solution of radiation transport equation under partial LTE state	155
3.7.1 The $P - 1$ approximate solution to radiation transport equation	155
3.7.2 The solution of radiation transport equation in one - dimensional space	159
3.7.3 The grey approximate of radiative energy flow	170
3.7.4 The multi - group approximate of radiative energy flow	171
3.8 The radiation quantities and radiation transport equation within moving medium (the radiation transport equation in laboratory coordinate system)	173
3.8.1 The Lorentz transformations of radiation quantities	173
3.8.2 The invariants under Lorentz transformations	176
3.8.3 The covariance of radiation transport equation	177
3.8.4 The radiation transport equation in lab system under partial LTE state	179
3.8.5 The relationship between radiation quantities in Lab system and fluid stationary system	182
Chapter 4 Radiation Hydrodynamics Equations	184
4.1 Two formulations of descriptions of fluid motion	184
4.1.1 Euler method and Lagrange method	184
4.1.2 The formula of integral transformation	187
4.2 The hydrodynamic quantities and radiation quantities in Lab system	189
4.2.1 The kinetic theory of matter particles and hydrodynamic variables	189
4.2.2 The radiation quantities in Lab system	192